

## ТОНКАЯ СТРУКТУРА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ ЭКСИТОНА, СВЯЗАННОГО НА АТОМЕ БОРА В КРЕМНИИ

В.А.Карасюк, Я.Е.Покровский

Исследована тонкая структура бесфононной линии излучения экситона, связанного на атоме бора в кремнии, в том числе при сжатии вдоль оси (111). Предложена интерпретация этой структуры, учитывающая долин-орбитальное расщепление,  $i-j$  спаривание дырок и их обменное взаимодействие с электроном.

Примесные атомы бора в кремнии создают наиболее мелкие акцепторные состояния с энергией ионизации 45,7 мэВ, что хорошо согласуется с расчетами в приближении эффективной массы. Поэтому следует ожидать, что специфика потенциала центральной ячейки, занятой примесным ионом, в случае бора не должна существенно проявляться и в связанном экситоне, который поэтому может быть хорошей моделью для исследования структуры экситонов, связанных на акцепторах. Экситон, связанный на акцепторе III группы в кремнии, содержит две дырки и электрон, движущиеся в поле примесного иона. Расщепление основного состояния связанного экситона обусловлено как взаимодействием между легкими частицами, так и долин-орбитальным расщеплением электронного состояния. Эти расщепления в случае бора относительно невелики, и в <sup>1</sup> не удалось разрешить структуру соответствующей линии излучения. В настоящей работе эта структура исследована интерференционным методом <sup>2</sup>, в том числе при одноосном сжатии кремния, что позволило сделать некоторые выводы о вкладе различных типов взаимодействий в тонкое расщепление энергетических уровней связанного экситона.

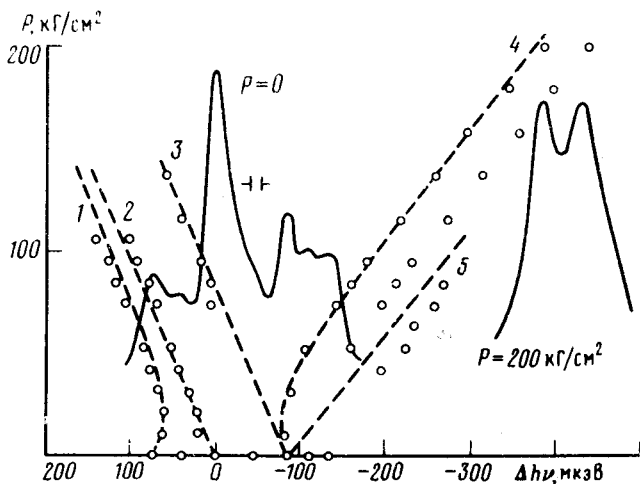


Рис.1. Спектры бесфононной линии излучения экситонов, связанных на атомах бора в кремнии при давлении  $P = 0$ ; 4,2 К и  $P = 200$  кг/см<sup>2</sup>; 2 К. Зависимость спектрального положения компонент в спектре от  $P$ : кружки — эксперимент, пунктир — расчет. Концентрация бора  $- 7 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>

Спектры бесфононной линии излучения экситона, связанного на атоме бора, приведены на рис.1 и рис.2. Эти спектры содержат большое число компонент. При одноосном сжатии четырехкратно вырожденное дырочное состояние  $\Gamma_8$  расщепляется на два, вырожденные только по спину. Поэтому две дырки в основном состоянии образуют спиновый синглет и не могут давать вклада в расщепление. При сжатии в направлении (111), эквивалентном относительно электронных долин, расщепление основного состояния связанного экситона может быть вызвано лишь долин-орбитальным расщеплением электронных состояний. Спектр на рис. 1 справа, записанный при относительно высоком давлении  $P$  и низкой температуре, соответствует преимущественному заселению основного состояния связанного экситона при одноос-

ном сжатии. Поэтому наблюдаемое расщепление  $\cong 50$  мкэВ обусловлено долин-орбитальным расщеплением и характеризует его величину.

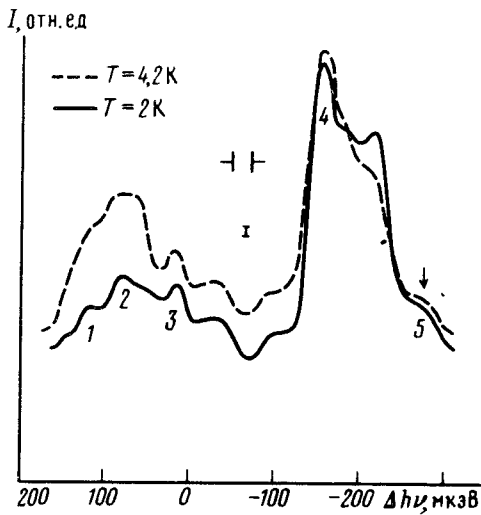


Рис. 2

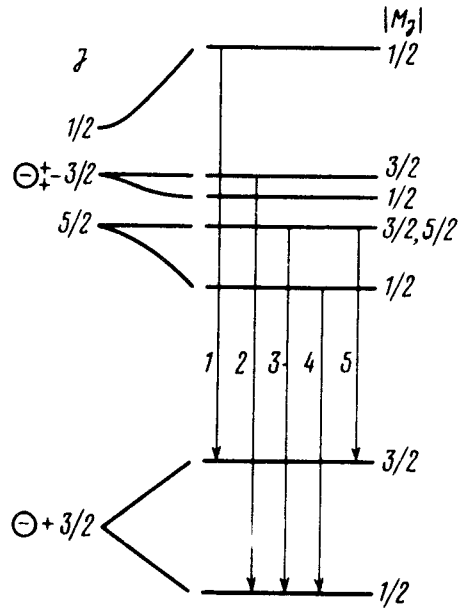


Рис. 3

Рис.2. Спектры бесфоновой линии излучения экситонов, связанных на атомах бора при 2 и 4,2 К.  $P = 85$  кГ/см<sup>2</sup>

Рис.3. Схема уровней экситона, связанного на акцепторе, с электроном в состоянии  $\Gamma_1$  и нейтрального акцептора при сжатии вдоль оси (111). Стрелками показаны идентифицированные оптические переходы

Долин-орбитальное расщепление приводит к существенному усложнению спектров (рис. 1, 2). Поэтому нам удалось проследить эволюцию лишь некоторых наиболее интенсивных компонент при изменении давления  $P$ , которые мы связываем с рекомбинацией электрона из состояния  $\Gamma_1$ . В отличие от состояний  $\Gamma_3$  и  $\Gamma_5$ , волновая функция электрона в состоянии  $\Gamma_1$  не имеет узла в центральной ячейке, что увеличивает вероятность бесфонового излучательного перехода. По этой же причине мы полагаем, что электрон в состоянии  $\Gamma_1$  имеет большую энергию, чем в состояниях  $\Gamma_3$  и  $\Gamma_5$ , поскольку он должен сильнее отталкиваться отрицательно заряженным примесным ионом. Кроме того, электрон в симметричном состоянии  $\Gamma_1$  не должен вызывать кристаллического расщепления. Мы полагаем, что в этом случае основной вклад в расщепление дает  $j-j$  спаривание дырок и электронно-дырочный обмен, которые можно учесть в сферическом приближении. Соответствующий член в гамильтониане может быть записан в виде <sup>3</sup>:

$$\mathcal{H} = A \mathbf{j}_1 \cdot \mathbf{j}_2 + B(\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2) \cdot \mathbf{s}, \quad (1)$$

где  $\mathbf{j}_1, \mathbf{j}_2$  — операторы углового момента дырок,  $\mathbf{s}$  — оператор спина электрона,  $A$  и  $B$  — константы, характеризующие  $j-j$  спаривание и электронно-дырочный обмен. Собственными значениями являются энергии  $E_1, E_3, E_5$ , соответствующие полному моменту  $J = 1/2; 3/2; 5/2$  и определяющие спектральное положение компонент в отсутствие деформации. Одноосное сжатие вдоль оси (111) не изменяет энергии состояний с проекциями полного момента на ось сжатия  $|M_J| = 5/2; 3/2$ . В то же время деформация приводит к перемешиванию и нелинейному изменению энергии основного состояния с различными  $J$  и одинаковой проек-

цией  $|M_J| = 1/2$ . Это изменение описывается уравнением <sup>4</sup>:

$$(E_1 - E)(E_3 - E)(E_5 - E) = 4E_T^2 \left[ -\frac{3}{5}(E_3 - E) + \frac{2}{5}(E_5 - E) \right], \quad (2)$$

где  $2E_T$  — расщепление деформацией дырочного состояния. Соответствующая схема энергетических уровней и некоторые оптические переходы 1–5 приведены на рис.3. Спектральное положение компонент, соответствующих этим переходам, в зависимости от давления  $P$ , рассчитанное согласно (2), приведено на рис.1 пунктирными линиями 1–5. Значения энергий  $E_1, E_3, E_5$  определены из спектра на рис.1 при  $P = 0$ , что дало  $E_1 - E_3 = 74$  мкэВ,  $E_3 - E_5 = 86$  мкэВ. Отсюда значения констант взаимодействия  $A = -21$  мкэВ,  $B = -17$  мкэВ. Расщепление дырочного состояния как в связанном экситоне, так и в нейтральном акцепторе полагалось равным  $2E_T$  (мкэВ) =  $2,96 \times P$  (кГ/см<sup>2</sup>), изотропная компонента деформации учитывалась подбором одинакового линейного сдвига всех уровней с давлением.

Из рис.1 видно, что компоненты 3 и 5, спектральное положение которых линейно зависит от  $P$ , развиваются из длинноволновой области спектра при  $P = 0$ . Это согласуется с выбором состояния с  $J = 5/2$  в качестве основного, поскольку из состояния с  $J = 1/2$  не может происходить „линейных“ компонент, а интенсивность компоненты с  $J = 3/2$  при  $P = 0$  должна быть максимальной <sup>3</sup>. Аналогичное расположение уровней характерно для атомов. Однако для экситонов, связанных на атомах алюминия и галлия в кремнии, наблюдается противоположное расположение термов <sup>1</sup>, что по-видимому, является проявлением специфики потенциала центральной ячейки. Отсюда следует, что бор в большей степени является „идеальным“ акцептором в кремнии, чем другие примесные атомы III группы. Следует также обратить внимание на приблизительно равноценный вклад дырочного  $j-j$  и электрон-дырочного взаимодействия (близость значений констант  $A$  и  $B$ ) в расщепление состояний экситона, связанного на атоме бора. Это подтверждает существенную роль электронно-дырочного обмена в многочастичных экситон-примесных комплексах в кремнии <sup>5</sup>.

#### Литература

1. Thewalt M.L.W. Can. J. Phys., 1977, 55, 1463.
2. Каминский А.С., Карасюк В.А., Покровский Я.Е. ЖЭТФ, 1980, 79, 422.
3. White A.M. J. Physics C, 1973, 6, 1971.
4. Schmidt M., Morgan T.N., Schairer W. Phys. Rev., 1975, 11B, 5002.
5. Каминский А.С., Карасюк В.А., Покровский Я.Е. ЖЭТФ, 1982, 83, 2237.