

ЭЛЕКТРОН-ЭЛЕКТРОННЫЙ ОБМЕН В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ТОНКАЯ СТРУКТУРА МНОГОЭКСИТОННЫХ КОМПЛЕКСОВ В КРЕМНИИ

Г.Е.Лукус, Н.С.Аверкиев

Показано, что тонкая структура уровней экситона, связанного на нейтральном доноре (НД) в кремнии, обнаруженная недавно в [1], обусловлена наряду с электрон-дырочным обменным взаимодействием между электронами разных долин. Оценены энергии электрон-электронного ($e - e$) и электрон-дырочного ($e - h$) обменов.

Недавно Каминский, Карасюк и Покровский сумели впервые разрешить тонкую структуру линий излучения связанных многоэкситонных комплексов в кремнии. Особый интерес представляет обнаружение тонкой структуры линии комплекса НДЭ_2 в кремнии, деформированном по оси z [001]. В деформированном кристалле исходное состояние НДЭ_2 вырождено только по спину электрона Γ_4 и не расщепляется. Спины двух остальных электронов, заполняющих оболочку Γ_1 , также как и спины двух дырок Γ_6 антипараллельны и поэтому $e - h$ обмен отсутствует. Единственной причиной расщепления конечного состояния – возбужденного состояния НДЭ_2^* с двумя электронами Γ_1 и Γ_4 и дыркой Γ_6 – является обменное взаимодействие. Поэтому указанные эксперименты впервые открывают возможность непосредственного определения обменных энергий в кремнии. В работе [1] учитывался только обмен между дыркой Γ_6 и электроном Γ_4 и предполагалось, что оболочка Γ_1 является сильно локализованной орбиталью и поэтому электрон Γ_1 не взаимодействует с дыркой. Хотя эта модель объясняет наблюдаемое расщепление, вытекающее из нее соотношение для интенсивностей линий не согласуется с экспериментальной кривой рис.3 [1], воспроизведенной на рис.1: согласно этой модели спектр должен состоять из трех линий, одна из которых в два раза интенсивнее двух других. Согласно оболочечной модели [2] плавные волновые функции для состояний Γ_1 и Γ_4 одинаковы и эти оболочки отличаются лишь быстрыми функциями: для оболочки Γ_1 при большой деформации $U_{\Gamma_1} =$

$= \frac{1}{\sqrt{2}} (U_1 + U_{\bar{1}})$, для оболочки Γ_4 $U_{\Gamma_4} = \frac{1}{\sqrt{2}} (U_1 - U_{\bar{1}})$, где U_1 и $U_{\bar{1}}$ — блоховские функции электронов долин $[001]$ и $[00\bar{1}]$ соответственно. Поэтому в рамках оболочечной модели $e-h$ обмен для электронов Γ_1 и Γ_4 должен быть одинаков и определяться выражением:

$$\mathcal{H}_{ex}^{eh} = \Delta_{\perp} (\mathbf{J} \mathbf{S}) + (\Delta_{\parallel} - \Delta_{\perp}) (\mathbf{J}_z \mathbf{S}_z) \quad (1)$$

Здесь \mathbf{J} — момент дырки ($J_z = \pm 1/2$), $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_4$ — суммарный момент двух электронов Γ_1 и Γ_4 .

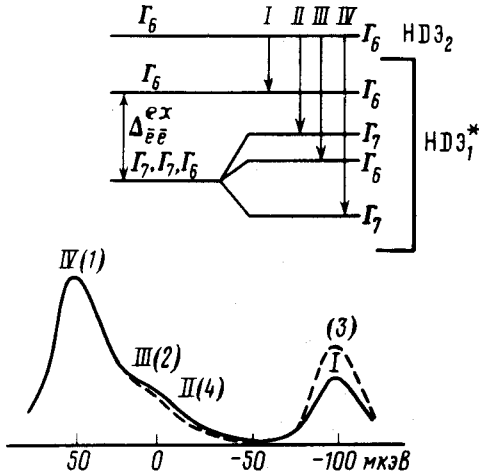


Рис.1. Тонкая структура линии α_2 в кремнии, сжатом по $[001]$. Пунктир — эксперимент [1], сплошная линия — расчет по таблице при $\Delta_3 = 104$ мкэВ, $\Delta_{\perp} = -47$ мкэВ, $\Delta_{\parallel} = -12$ мкэВ. Теоретическая кривая уширена и совмещена с экспериментальной по максимуму линии (1) IV

Согласно [3] $e-h$ обмен в недеформированном кристалле описывается гамильтонианом:

$$\mathcal{H}_{ex}^{eh} = 2 \Delta_1 (\mathbf{J} \mathbf{S}) + 2 \Delta_2 \sum_i J_i^3 S_i \quad (2)$$

Если деформационное расщепление дырочных уровней мало по сравнению с энергией связи дырки, то константы Δ_i в (1) и (2) связаны соотношениями: при сжатии по $[001]$ $\Delta_{\perp} = 4\Delta_1 + 10 \Delta_2$, $\Delta_{\parallel} = 2\Delta_1 + 1/2 \Delta_2$, при растяжении по $[001]$ $\Delta_{\perp} = 3\Delta_2$, $\Delta_{\parallel} = 6\Delta_1 + 27/2 \Delta_2$.

Наряду с $e-h$ обменом необходимо учитывать и $e-e$ обмен между электронами в разных долинах. Близость g -фактора электронов в кремнии к $g_0 = 2$ и его изотропия указывают на отсутствие заметного смешивания состояний разных зон в результате спин-орбитального взаимодействия. Поэтому $e-e$ обмен должен быть сферически изотропным и описывается гамильтонианом:

$$\mathcal{H}_{ex}^{ee} = \Delta_3 (\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_4) = \frac{1}{2} \Delta_3 (S^2 - 3/2) \quad (3)$$

константа Δ_3 определяется обменным взаимодействием между электронами долин $[001]$ и $[00\bar{1}]$:

$$\Delta_3 = 2 J v^{-1} \int d^3 r_1 d^3 r_2 U_1^*(\mathbf{r}_1) U_{\bar{1}}(\mathbf{r}_1) V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) U_1(\mathbf{r}_2) U_{\bar{1}}^*(\mathbf{r}_2), \quad (4)$$

где $J = \int |\phi(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \mathbf{r}_h)|^2 d^3 r d^3 r_h$, а $\phi(\mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_2^e, \mathbf{r}_h) = \phi(\mathbf{r}_2^e, \mathbf{r}_1^e, \mathbf{r}_h)$ — пламенная функция НДЭ₁, v — объем.

№	Энергия	Интенсивность	
		I_{\parallel}	I_{\perp}
I	Δ_{ee}^{ex}	2	1/2
II	$\Delta_{\parallel}(R-1)/4$	$3 - R^{-1}(1+8\xi)$	$\frac{1+R^{-1}}{4}$
III	$\Delta_{\parallel}/2$	0	1
IV	$-\Delta_{\parallel}(R+1)/4$	$3 + R^{-1}(1+8\xi)$	$\frac{1-R^{-1}}{4}$

$$R = (1 + 8\xi^2)^{1/2} \quad \xi = \Delta_{\perp} / \Delta_{\parallel}$$

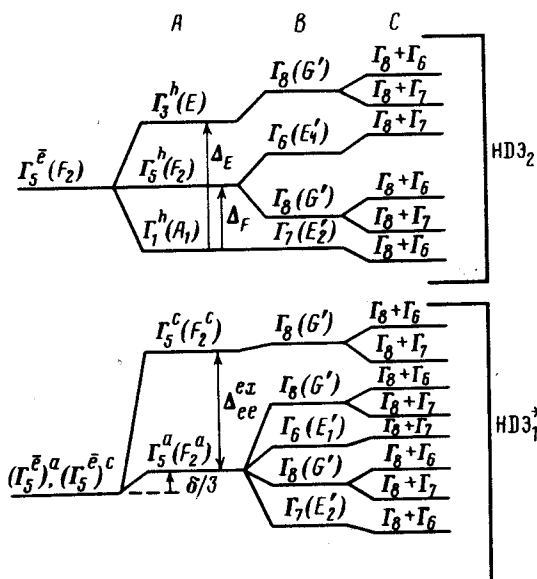


Рис.2. Расщепление термов $2\Gamma_1^e, \Gamma_5^e, 2\Gamma_8^h$ НДЭ₂ и $\Gamma_1^e, \Gamma_5^e, \Gamma_8^h$ НДЭ₁* при учете $e-e$ обмена, $e-h$ обмена и обменно-долинного расщепления (А) и $h-h$ обмена (В) и кристаллического расщепления (С) (в скобках указаны обозначения представлений по [7]).

В таблице приведены энергии четырех состояний НДЭ₁* с учетом $e-e$ и $e-h$ обменов и интенсивности переходов в эти состояния, рассчитанные по правилам отбора [4], которые для NP -переходов при рекомбинации электрона Γ_1 совпадают с правилами отбора для прямых переходов в точке Γ . Для определения трех констант Δ_{\perp} , Δ_{\parallel} и Δ_3 необходимо знать положение четырех линий I ÷ IV. В работе [1] на экспериментальной кривой указаны линии 1, 2, 3, которые можно отождествить с наиболее интенсивными (при $\Delta_{\perp} / \Delta_{\parallel} \geq 1$) линиями IV, III и I таблицы соответственно. Если отождествить слабый пик (4) на экспериментальной кривой с линией II, то для констант Δ_i получим: $\Delta_3 = 104$ мкэВ, $\Delta_{\perp} = -47$ мкэВ, $\Delta_{\parallel} = -12$ мкэВ, что соответствует $\Delta_1 = -48$ мкэВ, $\Delta_2 = -17$ мкэВ. Теоретическая кривая на рис.1, построенная при этих значениях Δ_i отличается от экспериментальной: несколько меньшей интенсивностью линии (3) I. Отметим, что эти значения Δ_1 , Δ_2 согласуются с оценками обменной константы $|\Delta_{ex}^{eh}| \approx |\Delta_1| \approx 50$ мкэВ, полученные

ми в [5] из величины времени спиновой релаксации электрона. В недеформированном кристалле учет орбитально-долинного расщепления, $\hbar - \hbar$ (для НДЭ_2), $e - \hbar$ и $e - e$ (для НДЭ_1^*) обменов, не позволил получить теоретический спектр люминесценции близкий к экспериментальному, что, по-видимому, свидетельствует о важной роли кристаллического расщепления подобно тому, как это имеет место в германии [6]. Обменно-долинное взаимодействие [6] приводит лишь к сдвигу всех термов $\Gamma_1 \cdot \Gamma_5$ состояния НДЭ_1^* . Структура спектра НДЭ_2 и НДЭ_1^* при учете этих расщеплений показана на рис.2. Поскольку обменные интегралы (4) в случаях, когда два электрона находятся в "параллельных" долинах (например, $[001]$ и $[\bar{0}0\bar{1}]$) и "перпендикулярных" ($[001]$ и $[010]$ или $[100]$) несколько различаются, величины $e - e$ обмена для состояний $\Gamma_1 \Gamma_5$ и $\Gamma_1 \Gamma_3$ могут различаться и отличаться от величины обмена в деформированном кристалле Δ_3 . По этой же причине константа Δ_3 в (3) может зависеть от величины деформации, так как функция Γ_1 , образующаяся в результате смешивания состояний Γ_1 и Γ_3 недеформированного кристалла, изменяется с деформацией.

Между состояниями $\text{НДЭ}_2 - \text{НДЭ}_1^*$, показанными на рис.2, разрешены все переходы. Поэтому спектр должен состоять из большого числа линий. На экспериментальном спектре рис.1 [1] разрешены 12 линий, большинство из которых соответствует нескольким переходам рис.2. Поэтому однозначно выбрать параметры спектра НДЭ_2 и НДЭ_1^* в недеформированном кристалле по данным этого рисунка не удалось.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
27 мая 1981 г.

Литература

- [1] А.С.Каминский, В.А.Красюк, Я.Е.Покровский. Письма в ЖЭТФ, 33, 141, 1981.
- [2] G.Kirczenow. Can. J. Phys., 55, 1787, 1977.
- [3] Г.Е.Пикус, Г.Л.Бир. ЖЭТФ, 60, 195, 1971; 62, 324, 1972.
- [4] Г.Е.Пикус. ФТТ, 19, 1653, 1977.
- [5] P.D.Altukhov, K.N.El'tzov, G.E.Pikus, A.A.Rogachev. Proc. 14-th Intern. Conf. Phys. of Semicond, Edinburg, 1978, p.379.
- [6] Г.Е.Пикус, Н.С.Аверкиев. Письма в ЖЭТФ, 32, 352, 1980.
- [7] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. М., изд. Наука, 1974.