



Полупроводники с водородоподобными
центрами как
активная среда для терагерцовых лазеров

*Семинар аспирантов и студентов ИФМ РАН и межфакультетской
базовой кафедры «Физика наноструктур и наноэлектроника»
8 октября 2009 г.*

Содержание

1. Атом водорода.

Уровни энергии и волновые функции. Правила отбора.

2. Однозарядные доноры и акцепторы в полупроводниках.

Приближение эффективной массы. простая зона, случай вырождения, случай многодолинного полупроводника. «Водородоподобное» поведение и влияние кристаллической решетки.

3. ТГц лазеры на основе n-Si

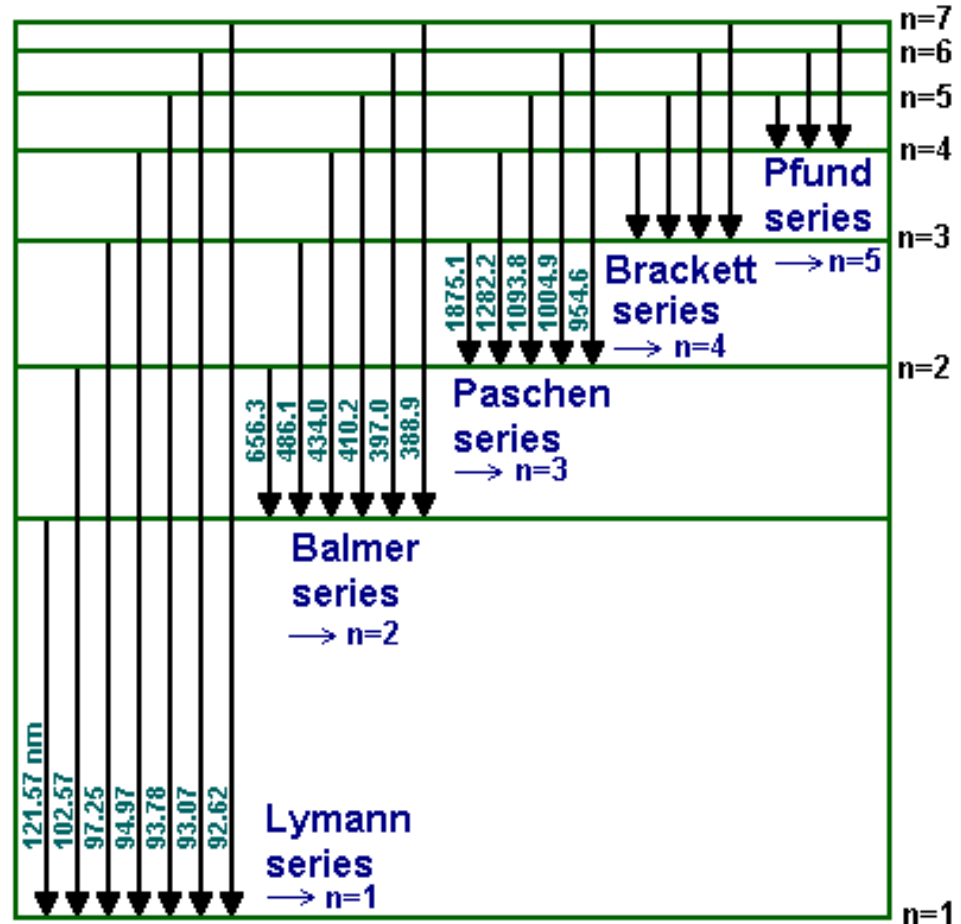
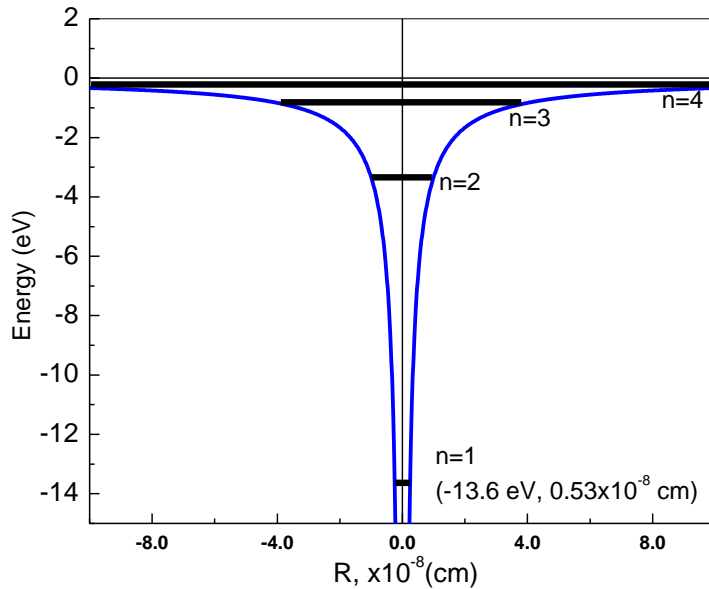
Атом водорода

Уравнение Шредингера

$$-\hbar^2/2m\Delta\psi+(E-U(r))\psi=0; \quad U(r)=-e^2/r$$

Уровни энергии в отрицательной области спектра:

$$Ry = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}$$



Атом водорода

Квантовые числа

$$n = 1, 2, 3, \dots;$$

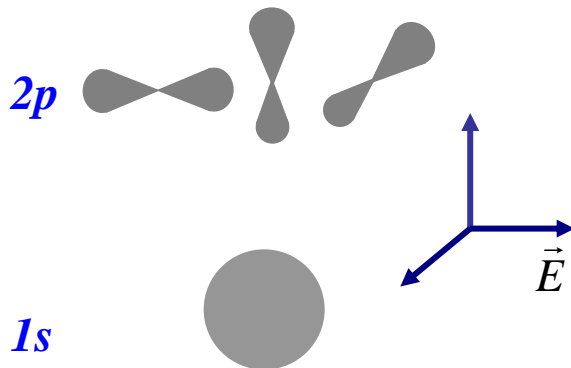
$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1;$$

s, p, d, f

$$m = -l, -(l-1), \dots, (l-1), l$$

Правила отбора:

$$\Delta l = 1$$



Волновые функции:

$$\Psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi r_0^3}} e^{-r/r_0}$$

$$\Psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_0^3}} e^{-r/(2r_0)} (2 - r/r_0)$$

$$\Psi_{2p_0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi r_0^3}} e^{-r/(2r_0)} (r/r_0) \cos\theta$$

$$\Psi_{2p_{\pm}} = \frac{1}{8\sqrt{2\pi r_0^3}} e^{-r/(2r_0)} (r/r_0) \sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

Водородоподобные центры в полупроводниках

Приближение.

Плавность потенциала $U(\mathbf{r})$, $E_{1s} \ll E_g$

$$(H_0(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}))\Psi = E\Psi \quad \Psi(\mathbf{r}) = \sum_i F_i(\mathbf{r}) u_{nk_0} e^{ik_0 \mathbf{r}}(\mathbf{r})$$

Простая зона

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + U(\mathbf{r}) - E \right\} F_n(\mathbf{r}) = 0$$

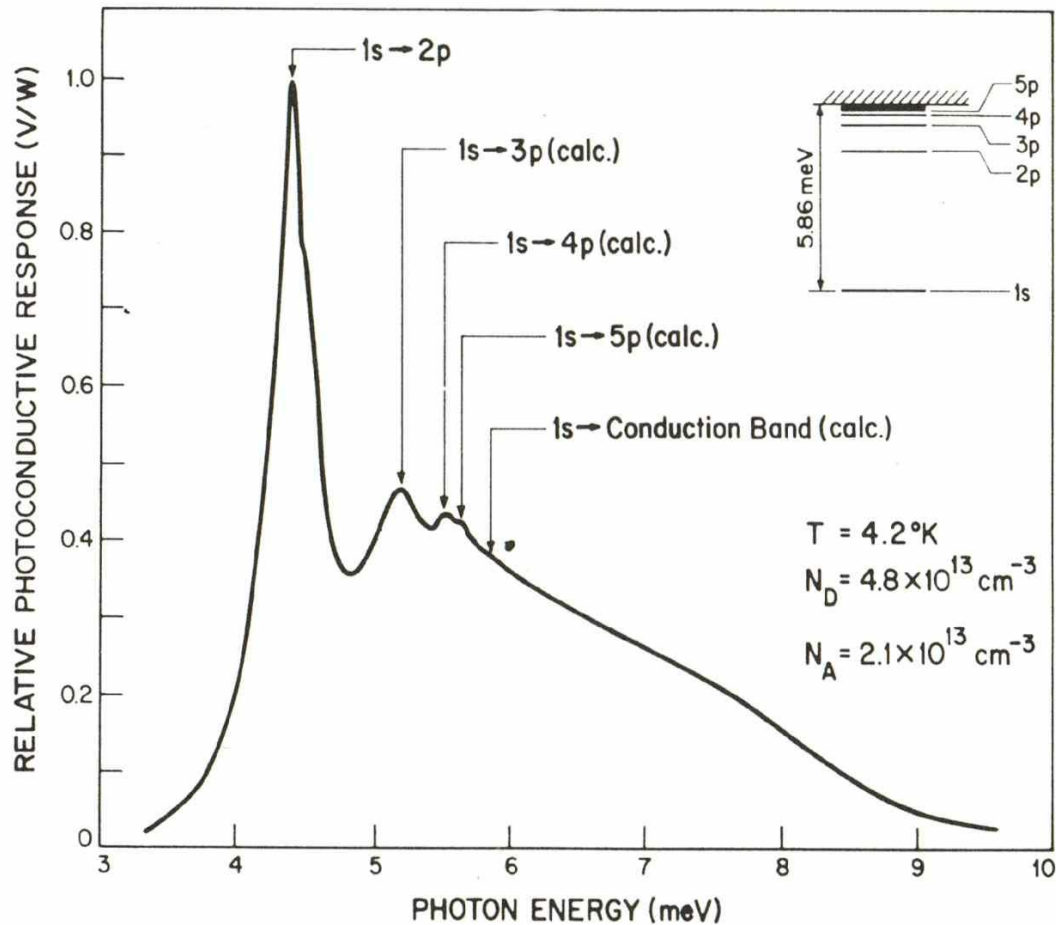
$$U(\mathbf{r}) = -e^2 / \epsilon r$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = F_n(\mathbf{r}) u_{nk_0} e^{ik_0 \mathbf{r}}(k_0, \mathbf{r})$$

$$r^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} = \frac{\epsilon}{m^* / m_0} r_0$$

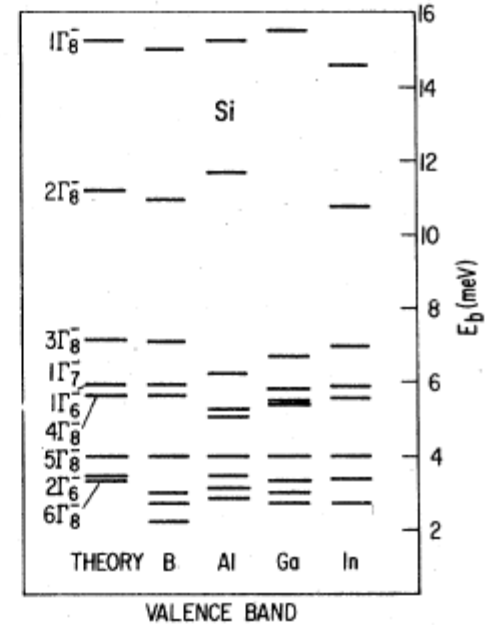
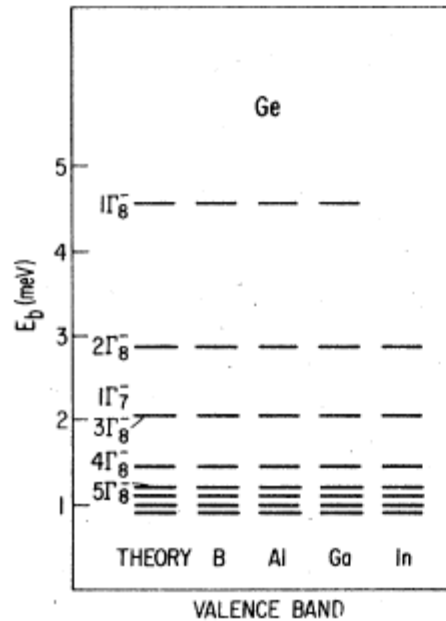
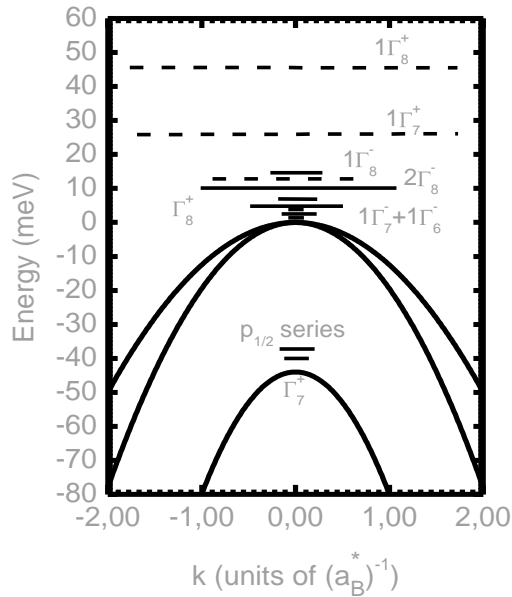
$$Ry^* = \frac{m^* e^4}{\epsilon^2 2\hbar^2} = \frac{m^* / m_0}{\epsilon^2} Ry$$

Фотопроводимость в n-GaAs



Far-infrared photoconductivity spectrum of a high purity GaAs sample showing red transition energies and those calculated from the hydrogenic model using the transition energy. The hydrogenic energy level diagram is shown in the inset. (After Stillman.⁶¹)

Акцепторы в полупроводниках



Уравнения для огибающих

$$\sum_{\nu} D_{\nu\nu'}(-i\nabla)F_{\nu'}(\vec{r}) + U(\vec{r})F_{\nu}(\vec{r}) = EF_{\nu}(\vec{r})$$

Приближение изотропных подзон

$$\left(A \left\{ k^2 - \mu \left[\vec{\epsilon} \cdot \vec{J} - \frac{1}{3} k^2 J^2 \right] \right\} + \frac{e^2}{\epsilon r} \right) F_{\nu} = EF_{\nu}$$

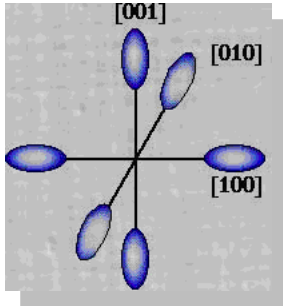
$\mu = 0 \longrightarrow$ «Атом водорода»

$$E_{\pm} = A(1 \pm \mu)k^2$$

Состояния под отщепленной подзоной

$$E_n = -\lambda - \frac{e^4}{4A\epsilon^2 n^2}$$

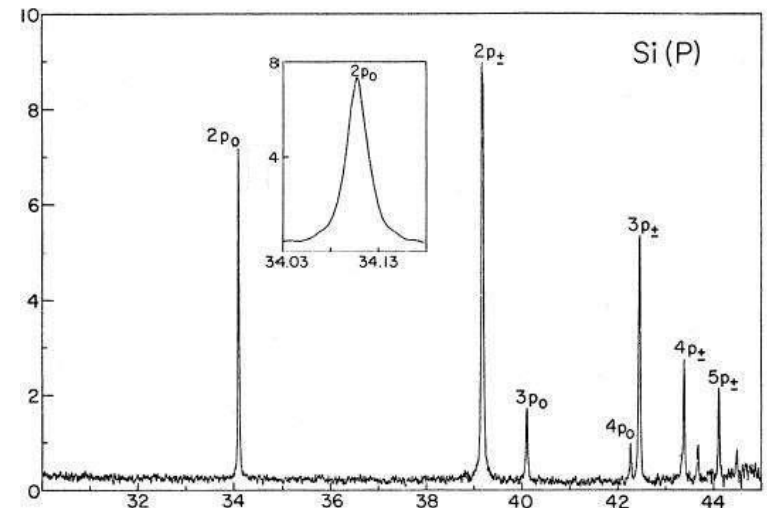
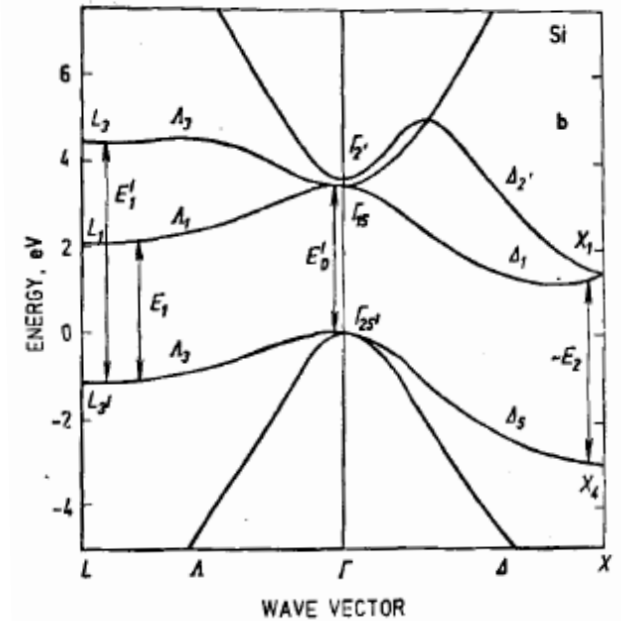
Зона проводимости с эквивалентными экстремумами (кремний)



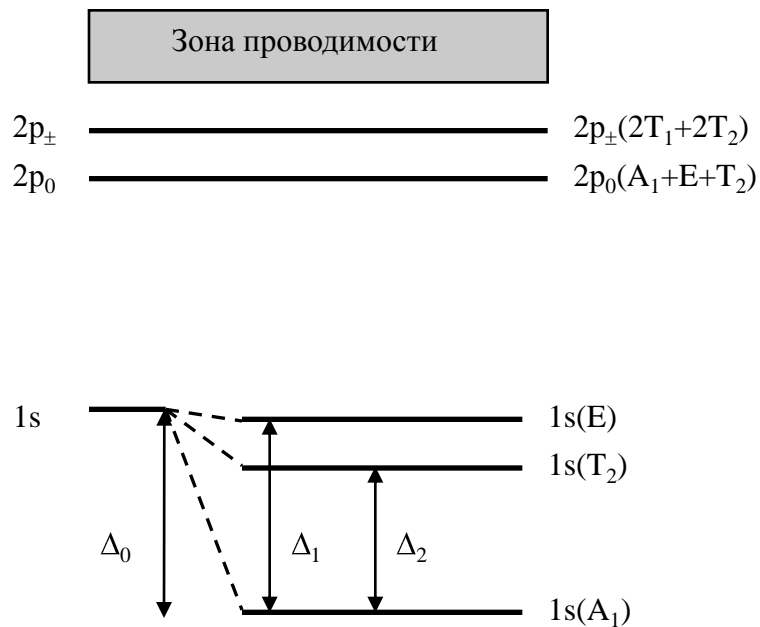
$$E(k) = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{\perp}}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j C_j u_j(r) e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}} F_j(r),$$

$$\left\{ - \left[\frac{\hbar^2}{2m_t} \left(\frac{\partial^2}{dx^2} + \frac{\partial^2}{dy^2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_l} \frac{\partial^2}{dz^2} \right] - \frac{e^2}{\epsilon r} \right\} F(\vec{r}) = EF(\vec{r})$$



Зона проводимости с эквивалентными экстремумами (кремний)



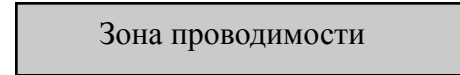
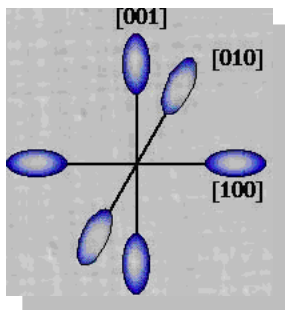
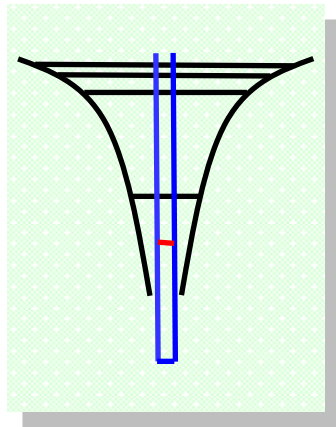
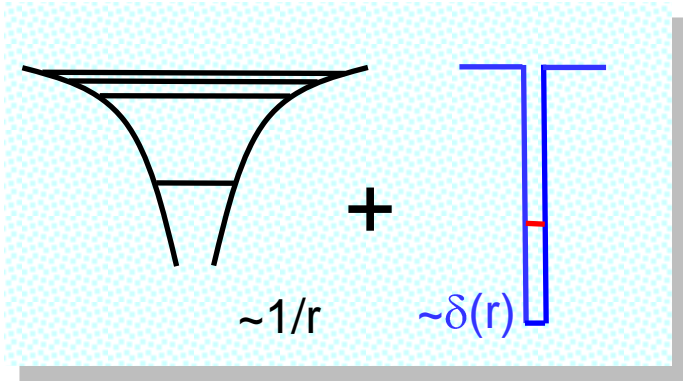
Приближение эффективной массы

Приближение эффективной массы + химический сдвиг

Схема уровней энергии доноров пятой группы в кремнии. В скобках указаны неприводимые представления группы T_d . Δ_0 – определяет понижение синглета, Δ_1, Δ_2 - определяют расстояние от A_1 до дуплета E и триплета T_2 .

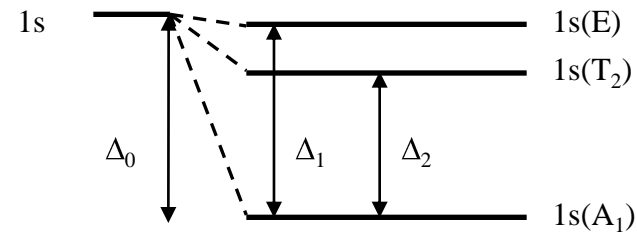
Level	P ^a	As ^a	Sb ^b	Bi ^c
1s(A ₁)	45.59	53.76	42.74	70.98
1s(E)	32.58 ^{b,g,h}	31.26 ^{b,h}	30.47 ^{b,h}	
1s(E + T ₂)				
1s(T ₂)	33.89	32.67 ^b	32.89	32.89 ⁱ
2p ₀	11.48	11.50	11.51	11.44
2s		9.11 ^j		8.78 ^j
2p _±	6.40	6.40	6.38	6.37
3p ₀	5.47	5.49	5.50 ^k	5.48
3s				4.70
3d ₀	3.83 ^k	3.8 ^j		3.80
4p ₀	3.31	3.31	3.33 ^k	3.30
3p _±	3.12	3.12	3.12	3.12
4s				2.89
4f ₀	2.33			2.36
4p _± , 5p ₀	2.19	2.19	2.20 ^k	2.18
4f _±	1.90	1.90	1.94 ^k	1.91
5f ₀	1.65		1.71 ^k	1.67
5p _±	1.46	1.46	1.48 ^k	1.46
5f _±	1.26			...
6p _±	1.09	1.07 ^b	1.10 ^k	1.08

Состояния мелких доноров в кремнии



$$2p_{\pm} \quad 2p_{\pm}(2T_1+2T_2)$$

$$2p_0 \quad 2p_0(A_1+E+T_2)$$



Приближение эффективной массы

Приближение эффективной массы + химический сдвиг

волновые функции

$$F_{1s}^l(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 b}} \exp\left\{-\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}$$

$$F_{2p_0}^l(r) = \frac{x_l}{\sqrt{32\pi a^2 b^2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}$$

$$F_{2p_{\pm}}^l(r) = \frac{z_l + iy_l}{\sqrt{64\pi a^4 b^3}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}$$

$$F_{2s}^l(r) = \frac{2 - \sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}}{\sqrt{32\pi a^2 b}} \exp\left\{-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{r^2 - x_l^2}{a^2} + \frac{x_l^2}{b^2}}\right\}$$

$$a^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\perp} E}, \quad b^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel} E}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_j C_j u_j(r) e^{i\vec{k}_j \vec{r}} F_j(r),$$

$$\psi_{A_1} = \frac{1}{\sqrt{6}} (111111)$$

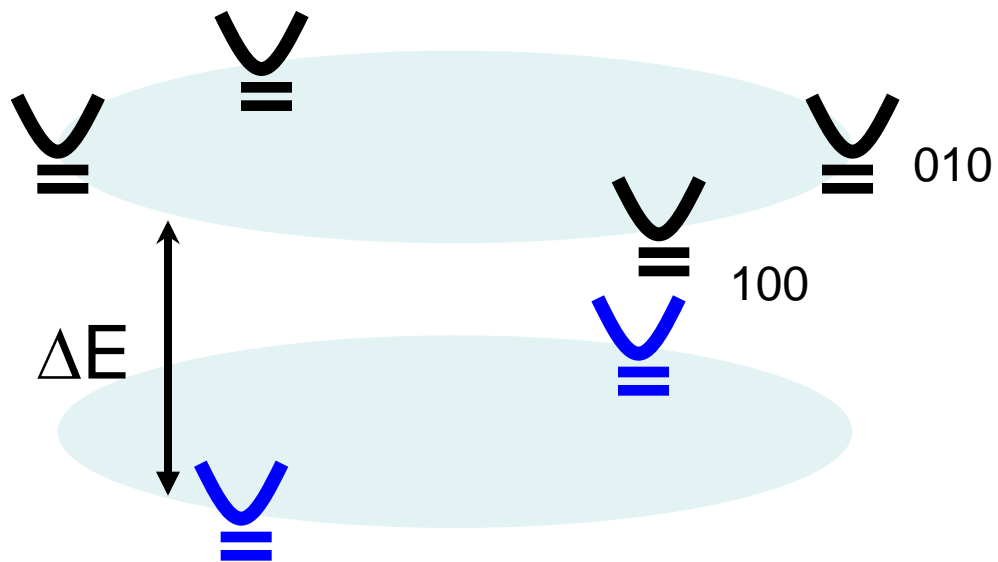
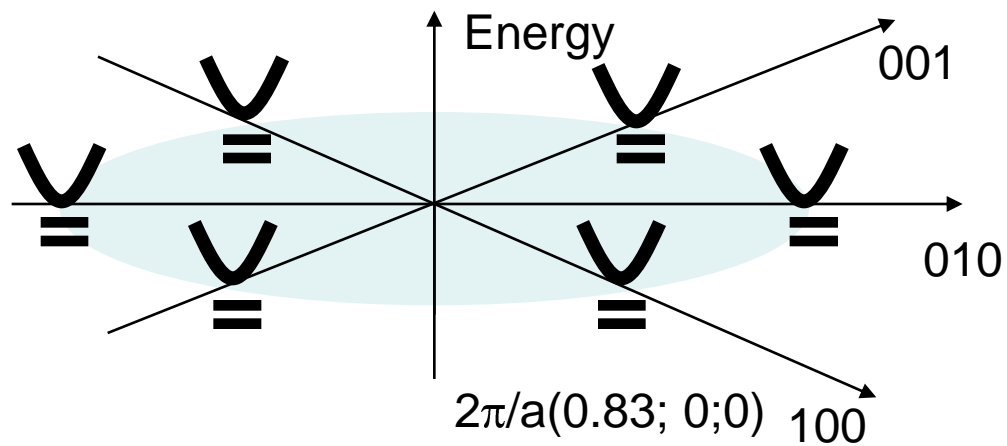
$$\psi_E^1 = \frac{1}{2} (11 \bar{1} \bar{1} 00)$$

$$\psi_E^2 = \frac{1}{2\sqrt{3}} (1111 \bar{2} \bar{2})$$

$$\psi_{T_2}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \bar{1} 0000)$$

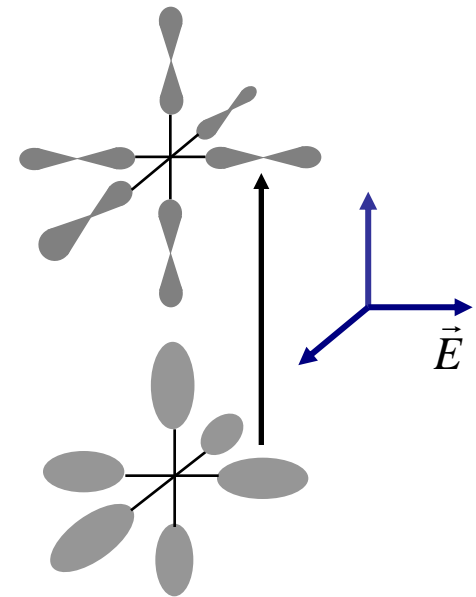
$$\psi_{T_2}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (001 \bar{1} 00)$$

$$\psi_{T_2}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (00001 \bar{1})$$

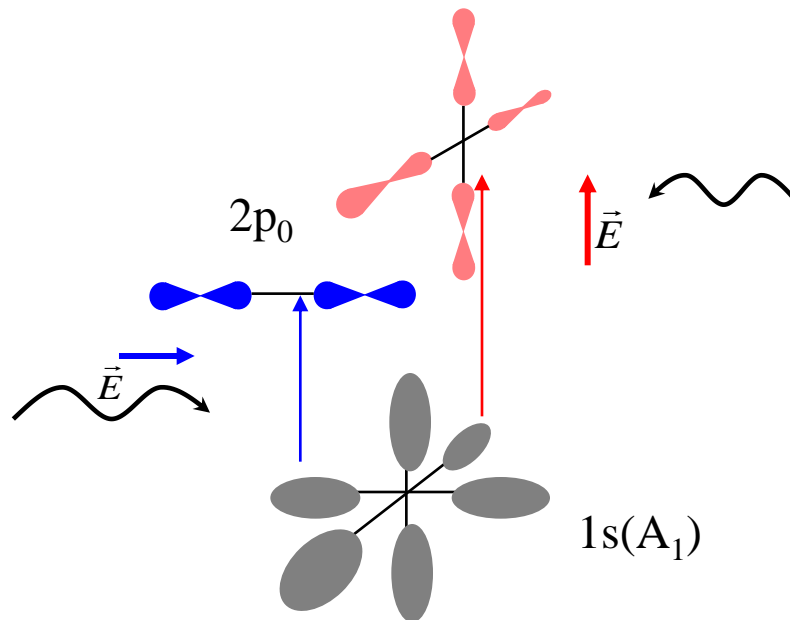


Влияние деформации

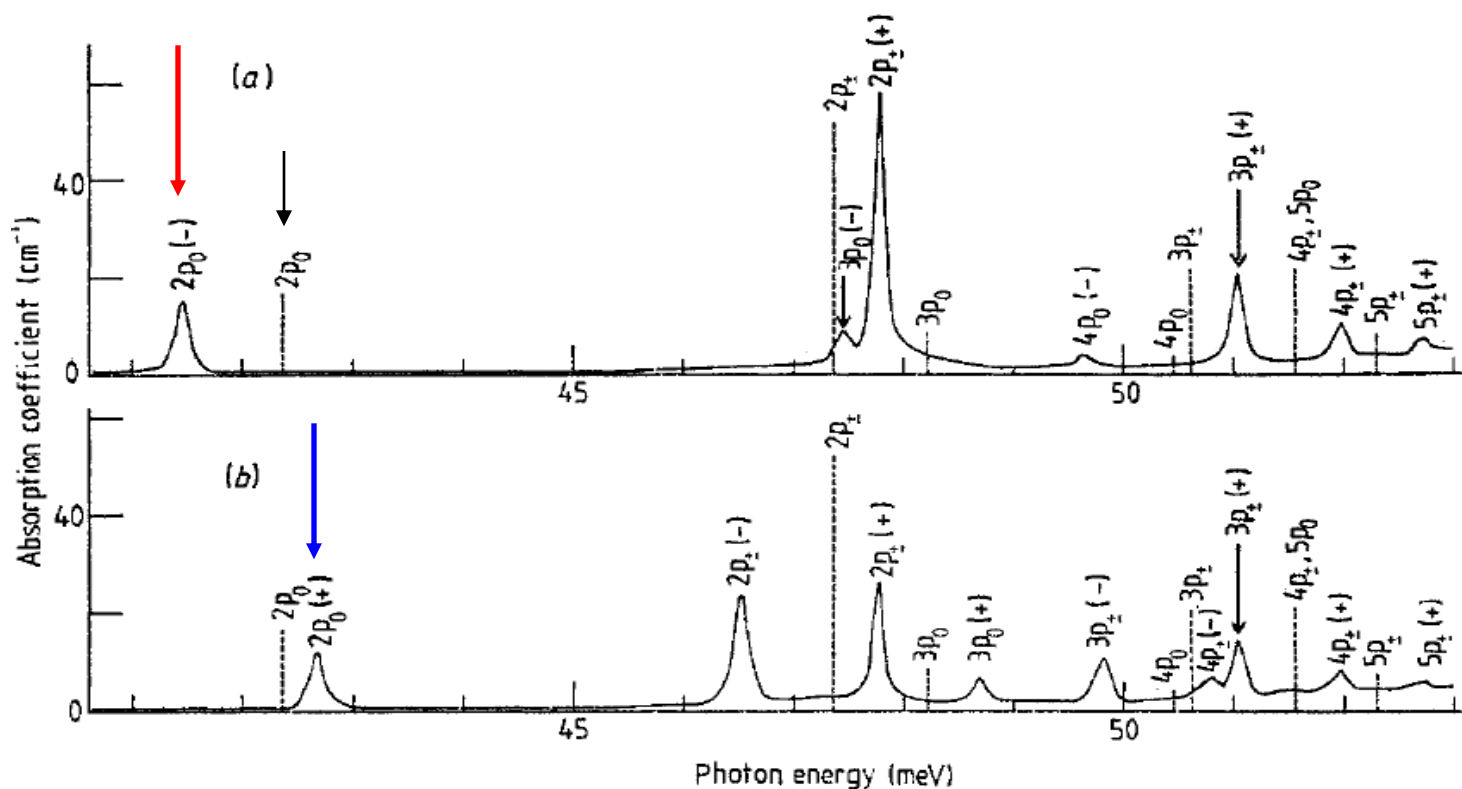
Отсутствие деформации



Малые деформации

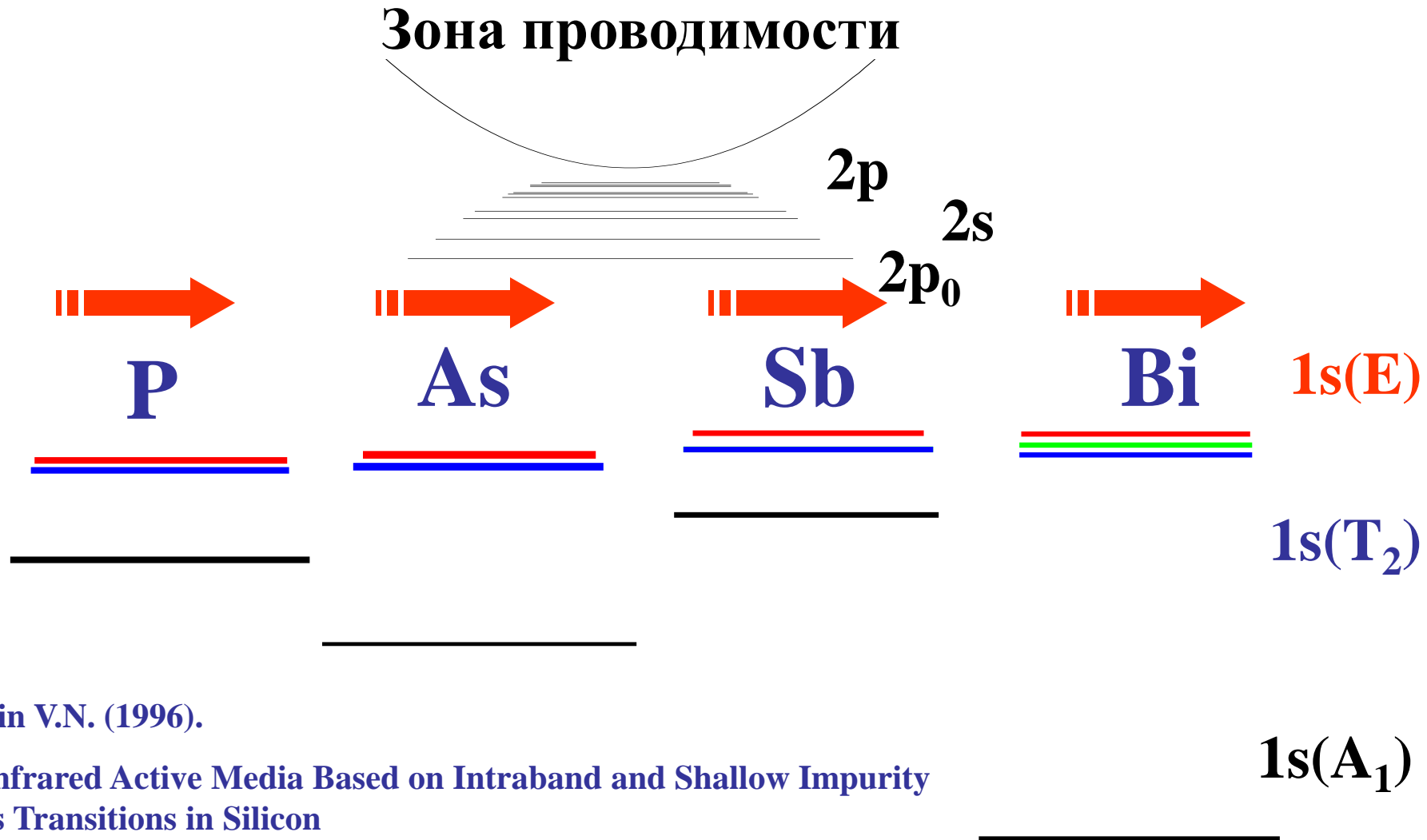


Расщепление линий при деформации Водородоподобное поведение



16. The effect of uniaxial stress on the excitation spectrum of Si (As) for $F \parallel [100]$; q is the direction of light propagation. Measurements were made using liquid helium as coolant. Donor concentration $n \sim 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (after Aggarwal and Ramdas 1965c). (a) $E \parallel F, q \parallel [011]$, (b) $E \perp F, q \parallel [011]$.

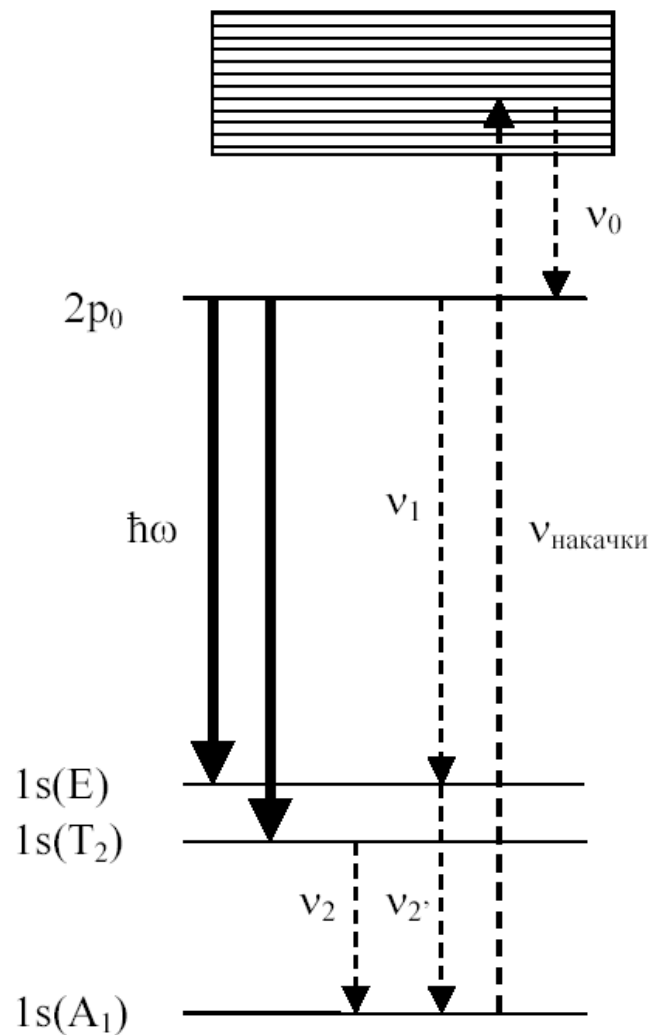
Доноры V группы в кремнии



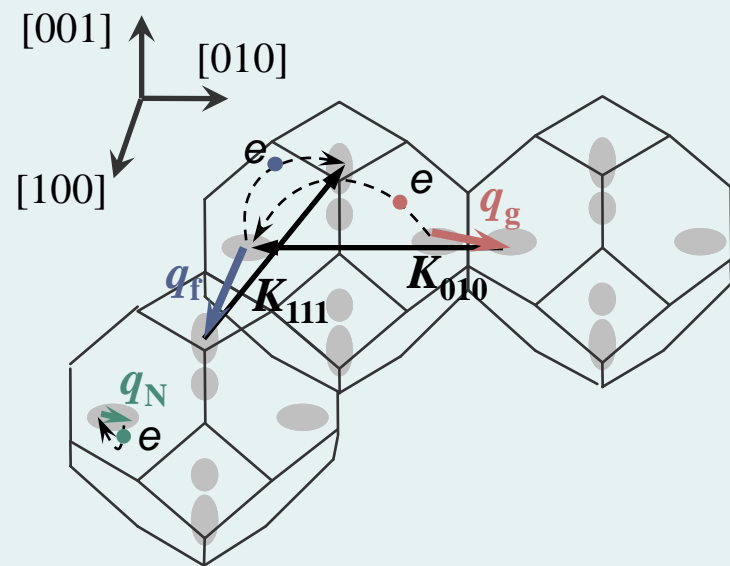
Shastin V.N. (1996).

Far Infrared Active Media Based on Intraband and Shallow Impurity States Transitions in Silicon

Лазеры на основе n-Si

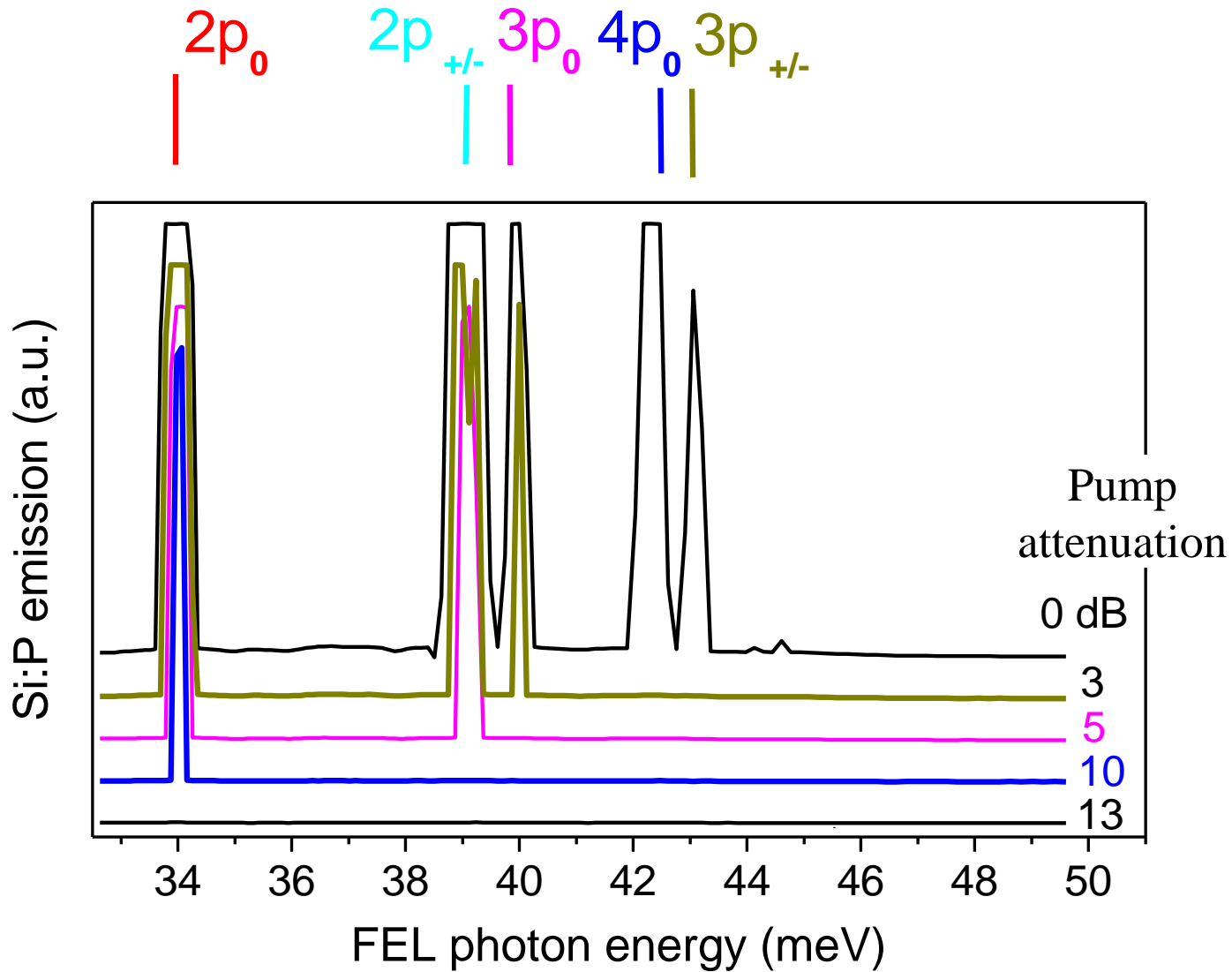


Междолинное рассеяние в Si

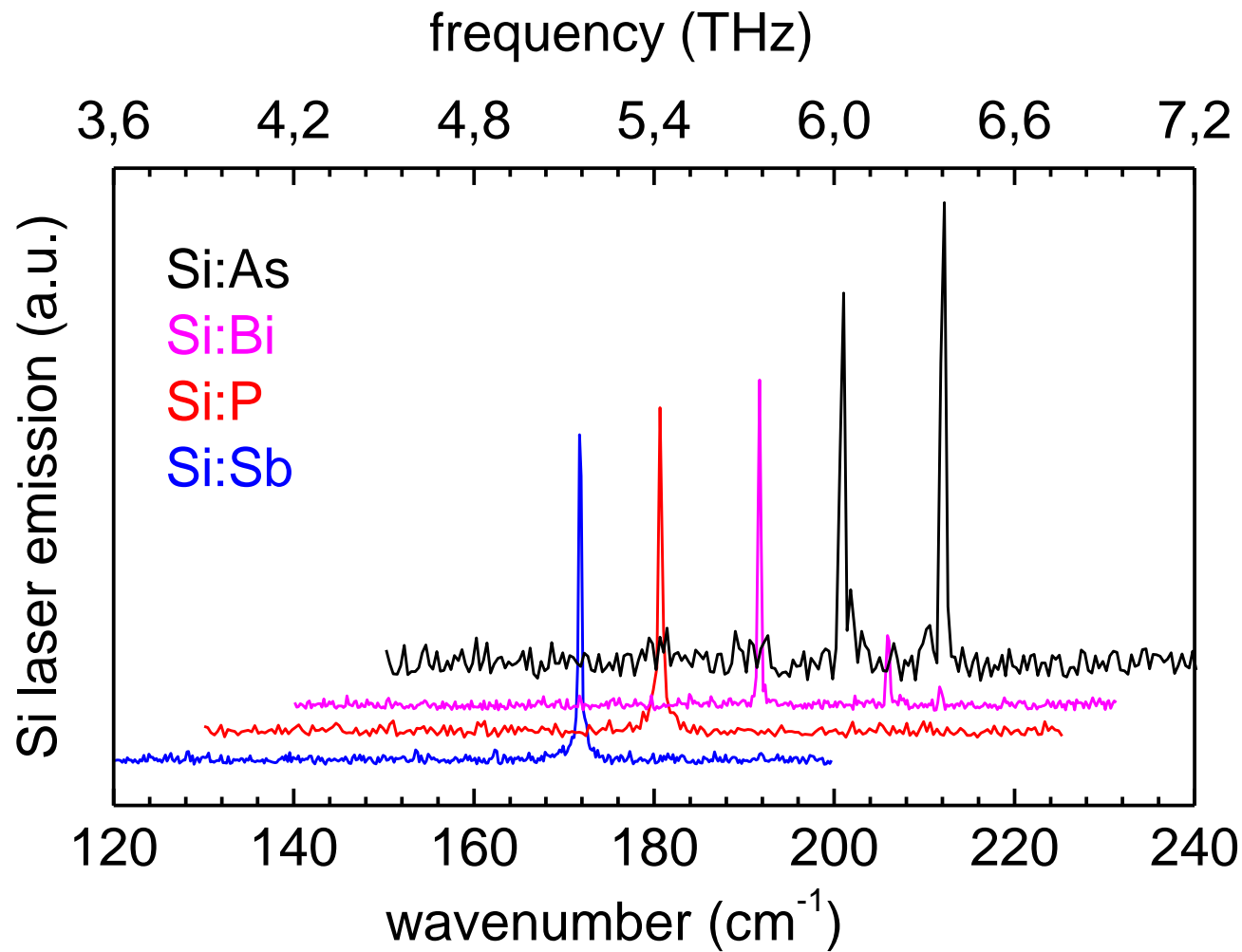


- Brillouin zone
- vector of reciprocal lattice;
- normal process;
- umklapp-process f -type;
- umklapp-process g -type;

Si:P. Спектр возбуждения

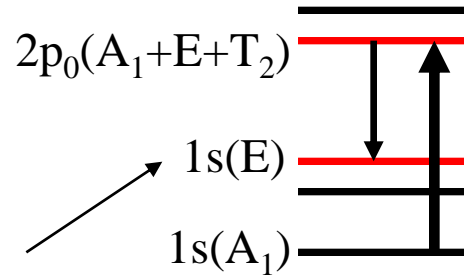
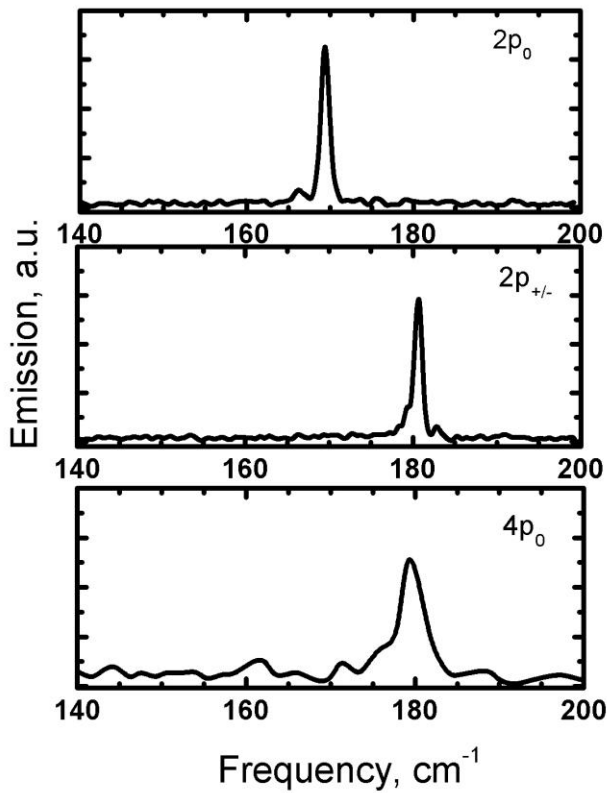


Спектры излучения

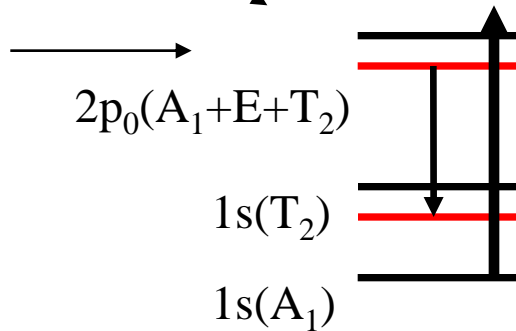


Правила отбора

Спектры излучения



Правила отбора

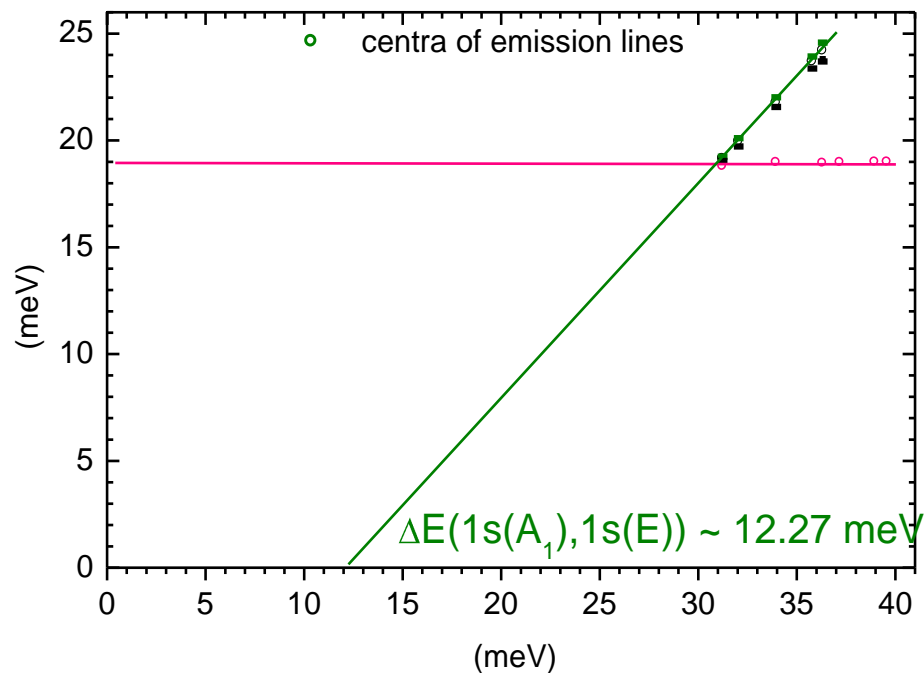


Матричный элемент

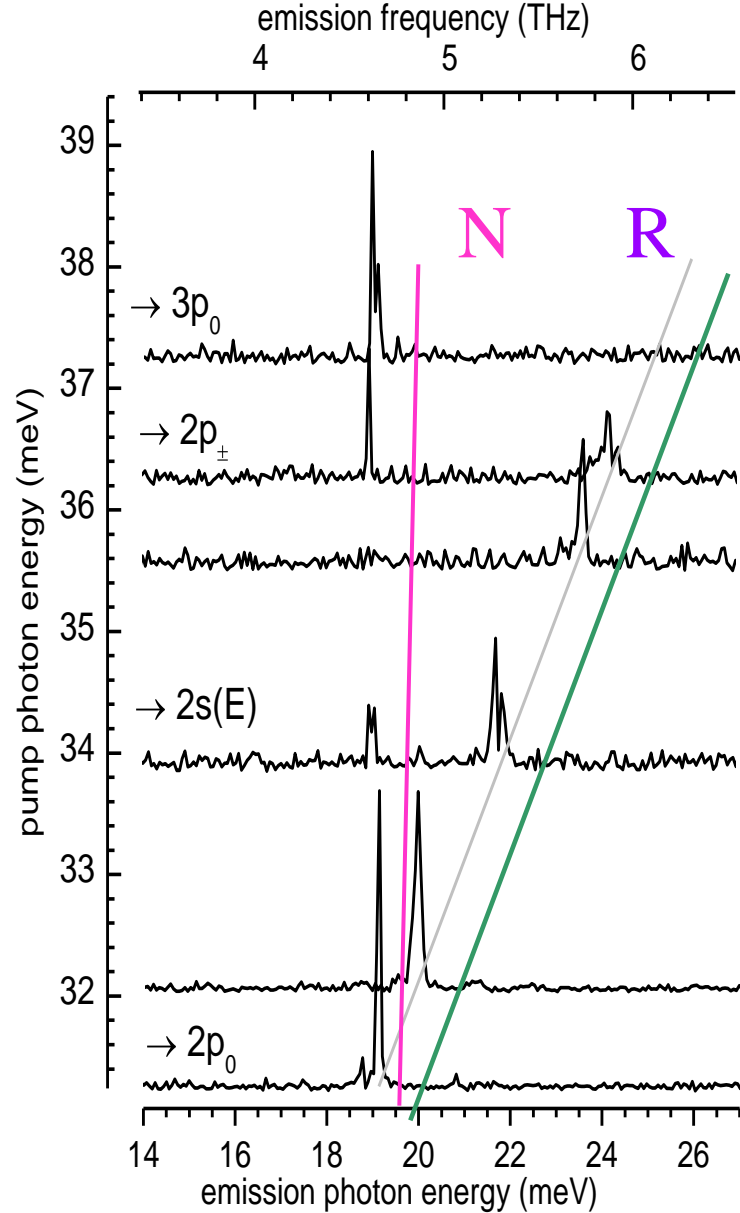
$$M_{12} \propto \sum_i C_{2i}^* C_{1i} \int F_{2i}^* \nabla F_{1i} d^3 r,$$

$$\begin{cases} \psi_{A_1} = \frac{1}{\sqrt{6}} (111111) \\ \psi_E^1 = \frac{1}{2} (11 \bar{1} \bar{1} 00) \\ \psi_E^2 = \frac{1}{2\sqrt{3}} (1111\bar{2}\bar{2}) \\ \psi_{T_2}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \bar{1} 0000) \\ \psi_{T_2}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (001 \bar{1} 00) \\ \psi_{T_2}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (00001 \bar{1}) \end{cases}$$

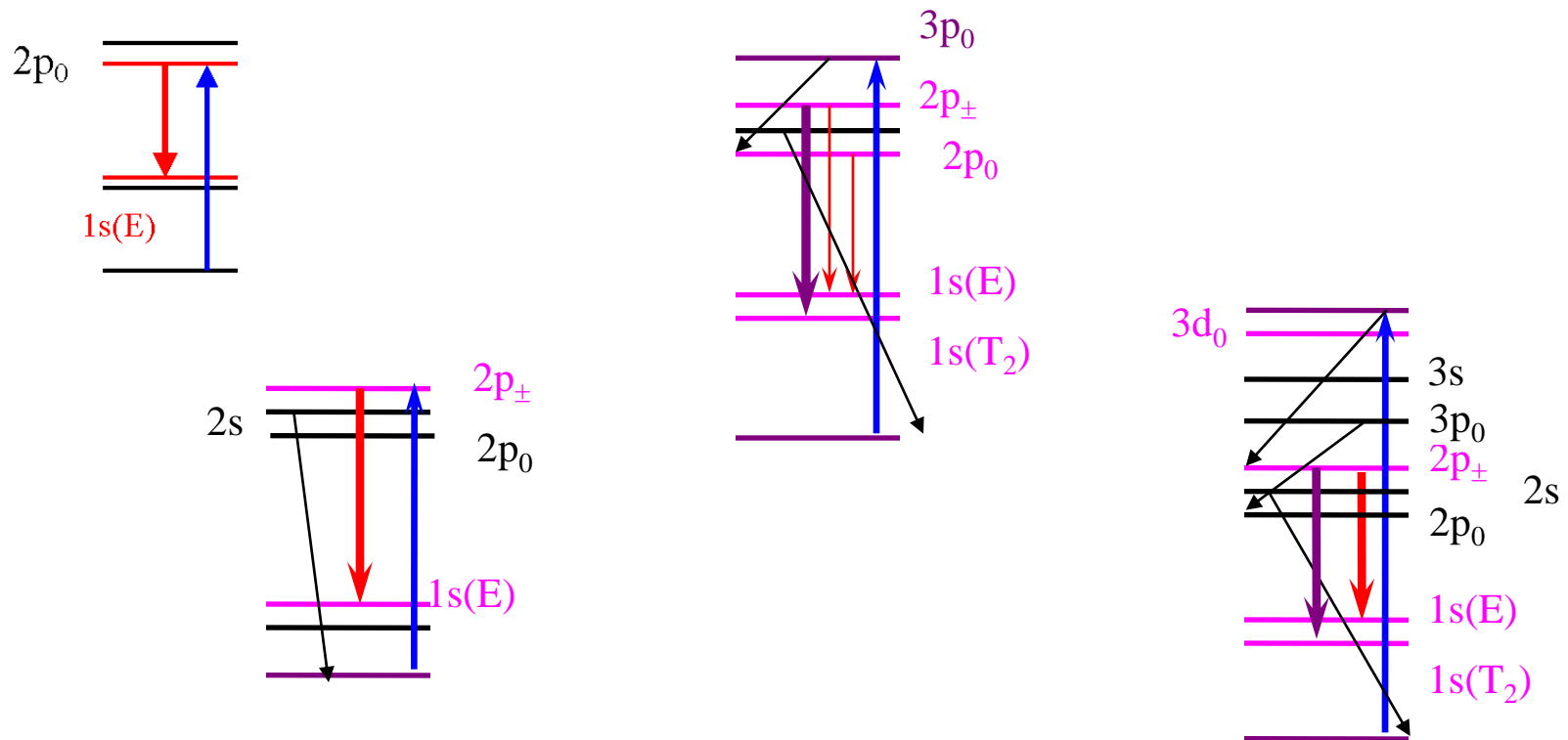
Raman-type Si:Sb laser



$$\hbar\omega \approx \hbar\omega_{\text{FEL}} - 12.1 \text{ meV}$$



Отклонения от каскадной модели захвата (Si:As)



Накачка
 Излучение кремния
 Безызлучательная релаксация