

Терагерцевые лазеры на внутрицентровых переходах доноров V группы в одноосно деформированном кремнии

К.А.Ковалевский, Н.В.Абросимов, Р.Х.Жукавин, С.Г.Павлов, Г.-В.Хьюберс, В.В.Цыпленков, В.Н.Шастин

Дан краткий обзор экспериментальных результатов исследования характеристик стимулированного терагерцевого излучения (4.9–6.4 ТГц) оптически возбуждаемых нейтральных доноров V группы (фосфор, сурьма, мышьяк, висмут) в кристаллическом кремнии при его одноосной деформации сжатия по оси [100]. Показано, что такая деформация оказывает существенное воздействие на рассматриваемые характеристики и при ее оптимальных величинах, которые зависят от центра легирования, может уменьшить пороговую интенсивность накачки и увеличить эффективность генерации излучения. Обсуждаются возможные механизмы такого влияния. Приводится оценка предельно достижимых параметров выходного излучения.

Ключевые слова: кремниевый лазер, одноосная деформация, терагерцевое излучение.

1. Введение

Впервые на возможность генерации длинноволнового ИК излучения на внутрицентровых переходах доноров и акцепторов в кремнии при их оптическом возбуждении было указано в 1996 г. [1]. Спустя четыре года этот эффект наблюдался при оптическом возбуждении доноров фосфора излучением ТЕА СО₂-лазера в кремнии, охлаждаемом жидким гелием [2]. Несколько позже аналогичный результат был получен и на других донорах V группы (Sb, As, Bi) [3, 4]. Специфика стимулированного излучения указанных центров при внутрицентровом оптическом возбуждении исследовалась с помощью лазера на свободных электронах (FELIX). Было обнаружено переключение рабочих переходов при изменении частоты излучения накачки и получен эффект генерации при стоксовом ВКР света электронами, связанными потенциалом доноров [5–9]. В большинстве работ исследовался в основном недеформированный кремний. Проведенные измерения позволили идентифицировать рабочие переходы, установить оптимальную концентрацию легирования ($(2-4) \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$) и возможные значения коэффициента усиления ($0.1-0.2 \text{ см}^{-1}$), определили предельные рабочие температуры (15–25 К) и пороговые уровни накачки (30 кВт/см² для P, Sb и 300 кВт/см²

для As, Bi) [10]. Была дана оценка темпов распада наиболее важных состояний [11, 12].

При одноосной деформации кристалла состояния зоны проводимости претерпевают серьезные изменения, что сказывается на процессах релаксации и населенности рабочих состояний, изменяет поляризационные характеристики среды. Целью настоящей статьи является обзор полученных к настоящему времени результатов по стимулированному излучению оптически возбуждаемых доноров в одноосно деформированном кремнии при сжатии кристалла по оси [100].

2. Одноосная деформация

Как известно, кремний имеет шесть одинаковых, но разноориентированных X-долин зоны проводимости, и приближение эффективной массы хорошо описывает все возбужденные нечетные состояния ($2p_0, 2p_{\pm}, 3p_0$ и т. д.) донора. Эти состояния формируются независимо при каждой долине и поэтому шестикратно вырождены по их числу. Однако для четных состояний ($1s, 2s$ и т. д.) это не так. Внедрение центра легирования, который замещает атом кремния, приводит к локальному нарушению решетки кристалла и появлению действующего на размерах ячейки потенциала (потенциал ячейки). Такой дополнительный потенциал расщепляет четные состояния и частично снимает их вырождение; при этом состояния разных долин смешиваются, формируя синглет A_1 , дублет E и триплет T_2 . Обозначения A_1, E, T_2 отражают симметрию состояний и соответствуют неприводимым представлениям точечной симметрии тетраэдра T_d [13, 14]. В большей степени это касается наиболее локализованного состояния $1s$, которое расщепляется на $1s(A_1), 1s(E)$ и $1s(T_2)$. Энергии состояний $1s(E)$ и $1s(T_2)$ отличаются на величину ~ 1 мэВ и близки к энергии основного состояния для «чистого» кулоновского центра (31.3 мэВ). В то же время поправка Δ к энергии основного $1s(A_1)$ состояния велика и составляет 11.4, 14.3, 22.5 и 39.7 мэВ для доноров Sb, P, As и Bi соответственно. Обычно ее называют химическим сдвигом. Дополнительно в спектрах сурьмы в Si:Sb и вис-

К.А.Ковалевский, Р.Х.Жукавин, В.В.Цыпленков, В.Н.Шастин. Институт физики микроструктур РАН, Россия, Нижегородская обл., 607680 Кстовский район, д. Афонино, ул. Академическая, 7; e-mail: atan4@yandex.ru, zhur@ipmras.ru

Н.В.Абросимов. Institute for Crystal Growth, Max-Born-Strasse 2, 12489 Berlin, Germany

С.Г.Павлов. Institute of Planetary Research, German Aerospace Center (DLA), Rutherfordstrasse 2, 12489 Berlin, Germany

Н.-В.Хьюберс. Institute of Planetary Research, German Aerospace Center (DLA), Rutherfordstrasse 2, 12489 Berlin, Germany; Institut für Optik und Atomare Physik, Technische Universität Berlin, Strasse des 17 Juni 135, 10623 Berlin, Germany

В.Н.Шастин. Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Россия, 603950 Н.Новгород, просп. Гагарина, 23; e-mail: shastin@ipmras.ru

Поступила в редакцию 14 апреля 2014 г.

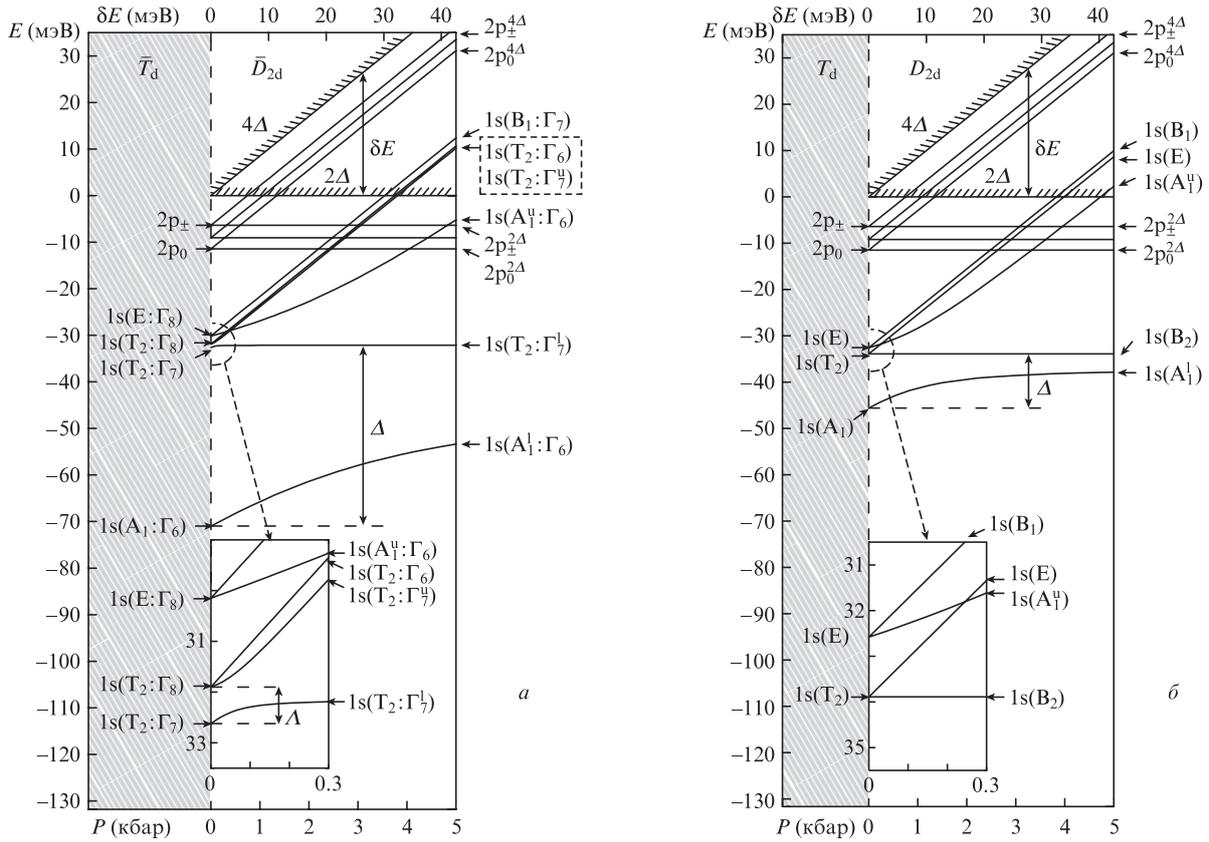


Рис.1. Схема уровней электронных состояний Si:Bi (а) и Si:P (б) при одноосной деформации сжатия кристалла кремния $\mathbf{F} \parallel [100]$.

мута в Si:Bi наблюдается расщепление состояния $1s(T_2)$ на $1s(T_2:\Gamma_7)$ и $1s(T_2:\Gamma_8)$, связанное с потенциалом спин-орбитального взаимодействия (использованы обозначения из работы [15]). Максимальное расщепление Λ_{so} имеет Bi, у которого $\Lambda_{so} \approx 0.71$ мэВ [16] (например, в Sb $\Lambda_{so} \approx 0.29$ мэВ [15]). Для центров P и As влияние спин-орбитального взаимодействия пренебрежимо мало.

С другой стороны, одноосная деформация кристалла также вызывает снятие вырождения и расщепление δE состояний разноориентированных долин зоны проводимости. Типичные зависимости энергии состояний зоны проводимости от одноосной деформации сжатия по оси [100] на примере Si:P ($\Lambda_{so} = 0$) и Si:Bi ($\Lambda_{so} = 0.71$ мэВ) приведены на рис.1. Обозначения состояний группы 1s снабжены дополнительными индексами (l – нижний, u – верхний), которые показывают их относительное положение на оси энергии. Верхние индексы 2Δ и 4Δ указывают на принадлежность состояний к 2Δ - и 4Δ -долинам соответственно. Следует отметить, что при $\delta E \gg \Delta$ потенциал ячейки уже не связывает 1s-состояния долин 2Δ и 4Δ , а для состояний триплета гибридизация этих долин, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием, подавляется уже при $\delta E > \Lambda_{so}$. Величина расщепления δE связана с давлением P выражением $\delta E = \Xi_u(s_{11} - s_{12})P$. Здесь $\Xi_u = 8.77$ эВ – константа деформационного потенциала, $s_{11} - s_{12} = 9.7 \times 10^{-12}$ Па⁻¹ – компоненты тензора жесткости [14].

В случае недеформированного кремния при накачке CO₂-лазера формирование инвертированного распределения основывается на накоплении фотовозбужденных электронов на долгоживущих 2p-состояниях (рис.2). Нижними рабочими уровнями является группа отщепленных состояний $1s(E)$, $1s(T_2)$. Для доноров Sb и P рабочими переходами являются $2p_0 \rightarrow 1s(T_2)$, для As и Bi – $2p_{\pm} \rightarrow 1s(E)$

и $2p_{\pm} \rightarrow 1s(T_2)$. Изменение состояний зоны проводимости не может не сказаться на процессе релаксации возбуждаемых электронов, населенности рабочих состояний и стимулированном излучении. Отметим наиболее важные факторы. Во-первых, при достаточно большой деформации по оси [100] возбуждаемые в зону проводимости электроны в ходе релаксации энергии распределяются уже не по шести долинам, а преимущественно уходят в нижние 2Δ -долины. При векторе поля волны $\mathbf{e}_0 \parallel \mathbf{F}$, где \mathbf{F} – сила сжатия кристалла, это дает максимально возможное значение усиления на оптическом переходе $2p_0^{2\Delta} \rightarrow 1s^{2\Delta}$. Для сравнения, при $\delta E = 0$ только 1/3 часть электронов дает

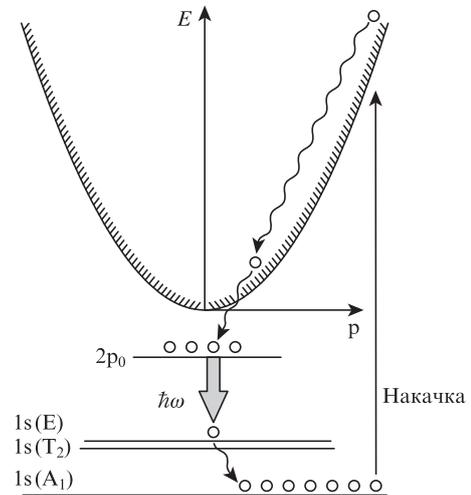


Рис.2. Схема формирования инверсии населенностей между состояниями мелкого донора фосфора (P) в кремнии (Si) в импульсном пространстве при фотовозбуждении CO₂-лазером.

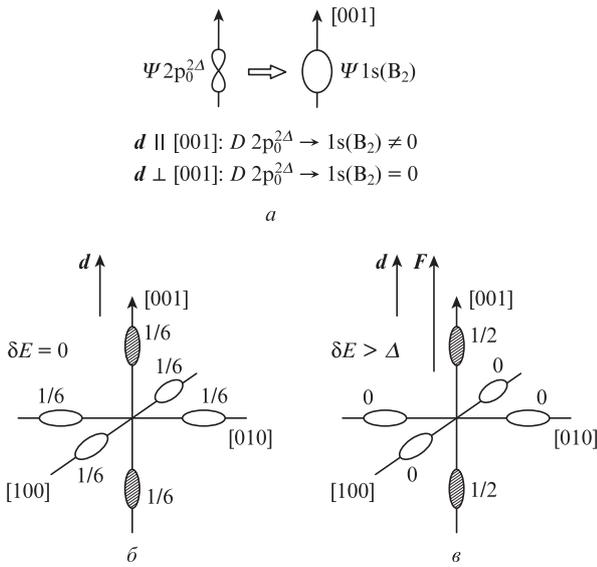


Рис.3. Оптический переход $2p_0 \rightarrow 1s$ в кремнии: волновые функции Ψ и матричный элемент D дипольного перехода (a), населенности долин в недеформированном образце ($\delta E = 0$) (б) и в условиях одноосной деформации ($\delta E > \Delta$) (в). Цифры (0, 1/6, 1/2) показывают распределение электронов по долинам, штриховкой отмечены долины с ненулевым матричным элементом для указанного вектора d .

эффективно вклад в усиление (см. рис.3). Заметим, что деформация кристалла изменяет сечение фотоионизации центра σ . Согласно волновой функции основного состояния донора при деформации $\delta E > \Delta$ вдоль оси $[100]$ [13] при накачке излучением CO_2 -лазера (~ 10.6 мкм) с ростом давления $\sigma \rightarrow \sigma_{\perp}$ ($\sim 4/3 \sigma_0$) для $e \perp F$ и $\sigma \rightarrow \sigma_{\parallel}$ ($\sim 1/4 \sigma_0$) для $e \parallel F$, где σ_0 – сечение фотоионизации для недеформированного кремния, e – вектор поля накачки, а σ_{\perp} и σ_{\parallel} – сечения фотоионизации для одной долины основного состояния при поляризации поля накачки, перпендикулярной и направленной вдоль тяжелой массы соответственно. Для оценки использовались значения σ_{\perp} и σ_{\parallel} из работы [17]. Таким образом, с ростом деформации эффективность оптической накачки с $e \perp F$ несколько возрастает.

Другой особенностью одноосно деформированного кристалла является изменение состояний отрицательно заряженных доноров (D^- -центров), которые появляются в условиях частичной ионизации центров легирования. Они поглощают излучение в широкой полосе частот ТГц диапазона и приносят значительные внутренние потери. Согласно теории и измерениям, энергия связи D^- -центра уменьшается с ростом деформации с 2 до ~ 0.5 мэВ [18], и при температуре электронов $T \approx 10$ К это должно приводить к значительному (примерно в 10 раз) снижению их концентрации N (рис.4) и связанному с ними поглощению. Для проверки такого заключения нами были проведены измерения поглощения ТГц излучения оптически возбуждаемыми донорами в зависимости от деформации кристалла кремния. Вместе с CO_2 -лазером в оптической схеме эксперимента использовался квантово-каскадный лазер с длиной волны ($\lambda = 97$ мкм) как источник зондирующего излучения. Модуляция сигнала каскадного лазера после прохождения образцов Si: As и Si: Bi при их засветке излучением CO_2 -лазера регистрировалась Ge: Ga-детектором. Результаты измерений представлены на рис.5. Согласно полученным данным поглощение ТГц излуче-

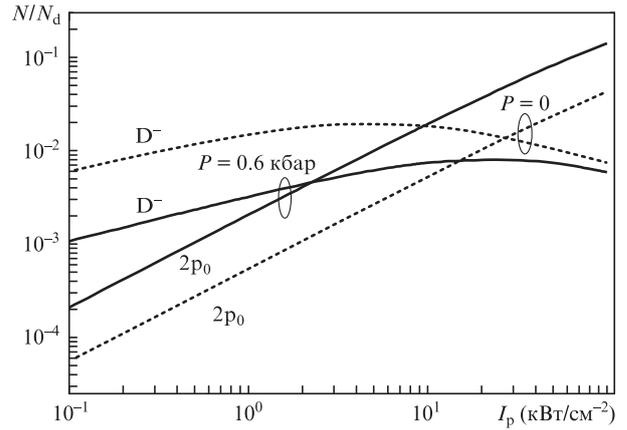


Рис.4. Расчет населенностей состояний $2p_0$ и D^- -центров в Si:Sb от интенсивности накачки CO_2 -лазера. N_d – концентрация доноров.

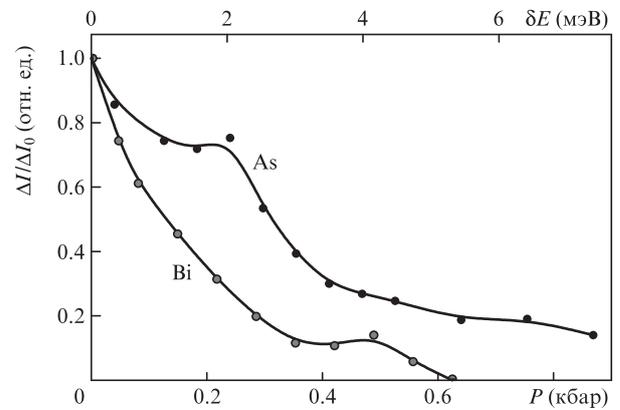


Рис.5. Зависимость поглощения $\Delta I = \max(I_{in} - I_{out})$ излучения квантово-каскадного лазера ($\lambda = 97$ мкм) от деформации сжатия вдоль направления $[100]$, нормированного на величину $\Delta I_0 = \Delta I (P = 0)$.

ния действительно уменьшается с ростом деформации как минимум в пять раз при $P < 1$ кбар.

Кроме отмеченных факторов, имеется еще один. Это изменение времен жизни рабочих состояний в одноосно деформированном кристалле. Так, например, релаксация верхнего рабочего состояния $2p_0$ в P и Sb контролируется излучением коротковолновых (междолинных) фононов LA-g и TA-f, ответственных за переброс электронов между долинами. Можно показать, что уже небольшая деформация вдоль оси $[100]$ «выключает» распад состояния $2p_0$ в состояние $1s(B_2)$ с участием междолинных фононов TA-f. Согласно расчетам время жизни состояния $2p_0$ в одноосно деформированном кремнии должно увеличиться в 2–3 раза [12].

На рис.6 приведены результаты расчета величины $\delta N/N_d$, которая характеризует инверсную населенность на рабочих переходах для доноров фосфора, мышьяка и сурьмы в кремнии при возбуждении CO_2 -лазером (неполяризованное излучение) в зависимости от деформации сжатия кристалла по оси $[100]$ [19]. Здесь δN – разность населенностей состояний на рабочем переходе, который указан на рисунке, а N_d – концентрация доноров. Для оценки населенностей решалась система линейных балансных уравнений. При этом темп фотоионизации фиксировался на уровне $\sim 10^9$ с $^{-1}$ и использовались представления о каскадном захвате электронов на верхние возбужденные состояния донора с излучением длинноволновых акустических фононов [20]. Зависимость от деформации темпов

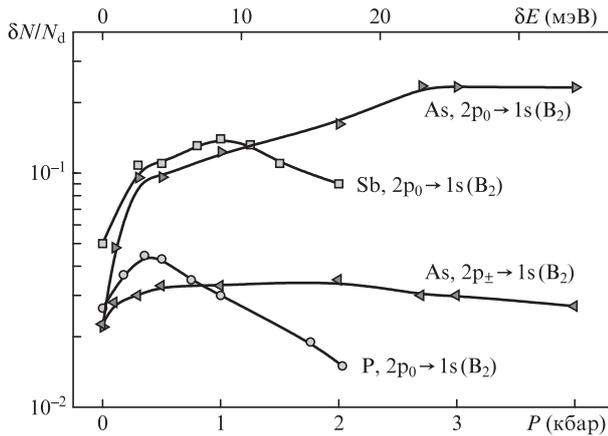


Рис.6. Зависимость инверсии населенностей состояний на переходах $2p_0, 2p_{\pm} \rightarrow 1s(B_2)$ доноров Sb, P, As от деформации $F \parallel [100]$ ($\delta N -$ разность населенностей состояний на рабочем переходе).

релаксации всех важных состояний учитывалась в полной мере [12]. В расчетах полагалось, что расстояние между центрами долин по направлению $[100]$ $K_0 = 0.835 \times 2\pi a^{-1}$, где a – постоянная решетки кристалла. Заметим, что данные по этому параметру разнятся от $0.83 \times 2\pi a^{-1}$ до $0.85 \times 2\pi a^{-1}$ [21, 22]. Константы электрон-фононного взаимодействия заимствованы из работы [21], но они также не являются абсолютно надежными. Тем не менее, несмотря на отмеченные недостатки, теоретические кривые рис.6 помогают выявить основные факторы, влияющие на зависимость интенсивности стимулированного излучения от деформации.

3. Образцы кремния и техника эксперимента

Кристаллы кремния были выращены методом зонной плавки и легированы донорами V группы с концентрацией $N_d \approx 3 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ($N_a/N_d < 1\%$). Образцы вырезались в форме параллелепипеда, ориентированного вдоль кристаллографических направлений $[100]$ и $[110]$. Размеры образцов и другие их параметры указаны в табл.1. Грани образца ориентировались с точностью до $1'$ и полировались. В результате такой образец становился добротным резонатором на модах полного внутреннего отражения. Выход ТГц излучения осуществлялся благодаря дифракции и/или отклонению граней от параллельности. Потери такого резонатора, включая поглощение решеткой кристалла, согласно тестовым измерениям не превышали $0.01 - 0.02 \text{ см}^{-1}$. Давление сжатия могло достигать 4–5 кбар и прикладывалось вдоль длинной стороны образца. Оптическая накачка на длине волны $\lambda = 10.6 \text{ мкм}$ ($\hbar\omega = 117 \text{ мэВ}$) осуществлялась CO_2 -лазером с модулированной добротностью. Поле накачки ориентировалось перпендикулярно направлению деформации. Максимальная интенсивность накачки достигала $\sim 4 \text{ кВт/см}^2$ в импульсе длитель-

Табл.1. Исследуемые образцы.

Образец	Материал	Размеры (мм)	N_d (10^{15} см^{-3})
1	Si:Sb	2.75×4.70×6.15	4
2	Si:P	2.75×4.90×6.20	4
3	Si:As	1.90×6.10×4.10	2
4	Si:Bi	2.55×4.90×6.00	3

Примечание: деформация вдоль оси $[100]$, метод роста – зонная плавка.

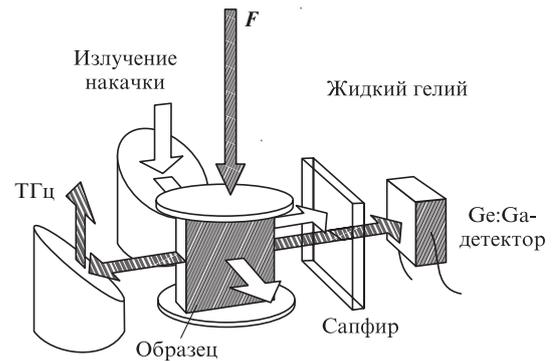


Рис.7. Оптическая схема эксперимента.

ностью $\sim 300 \text{ нс}$. Охлаждение исследуемого образца осуществлялось жидким гелием. Оптическая схема измерений показана на рис.7. ТГц излучение регистрировалось фотоприемником на основе Ge:Ga. Для предотвращения попадания излучения накачки на фотоприемник использовалась пластинка сапфира толщиной 1 мм. Измерения спектра стимулированного излучения проводились на фурье-спектрометре с разрешением $\sim 0.2 \text{ см}^{-1}$.

4. Эксперимент

На рис.8 представлены измеренные зависимости интенсивности выходного стимулированного излучения для всех доноров V группы в кремнии от величины одноосной деформации кристалла кремния при его сжатии по оси $[100]$. Аналогичные данные при импульсной накачке длительностью $\sim 100 \text{ нс}$ ТЕА CO_2 -лазером опубликованы в работах [23–25]. Видно, что использование CO_2 -лазера с длительностью импульса 300 нс позволяет снизить пороговую интенсивность накачки для доноров P, Sb, As до уровня $\sim 100 \text{ Вт/см}^2$, что на два порядка меньше того, что наблюдается на недеформированном кремнии, а также в 2–3 раза меньше, чем при накачке ТЕА CO_2 -лазером.

Для всех доноров наблюдается немонотонная зависимость интенсивности выходного стимулированного излучения от деформации. При $P = 0$ генерация отсутствует и возникает при достижении некоторого значения этого параметра. С ростом давления выходной сигнал для доноров Sb, P и As увеличивается, достигает максимума и затем уменьшается. При этом оптимальное для стимулированного излучения значение деформации увеличивается с ростом химического сдвига центра. Из общей картины выпадает донор Bi, для которого наблюдаются резонансы вблизи $\delta E = 17$ и 22 мэВ (рис.8, ж, з). Зависимости пороговой интенсивности накачки от деформации вдоль кристаллографического направления $[100]$ для всех четырех примесей представлены на рис.9. Экспериментальные точки соединены аппроксимирующими кривыми. Видно, что минимальный порог генерации для каждого донора наблюдается в некотором интервале давлений, который можно назвать областью оптимальной деформации. Для Sb, P и As минимальные пороги генерации близки и составляют 100, 200 и 300 Вт/см^2 соответственно. Особняком снова стоит донор Bi, для которого минимальная пороговая интенсивность накачки близка к 3.6 кВт/см^2 .

На рис.10 приведены спектры стимулированного излучения доноров в кремнии для характерных величин деформаций сжатия вдоль кристаллографического направления $[100]$. Видно, что частоты генерации для разных

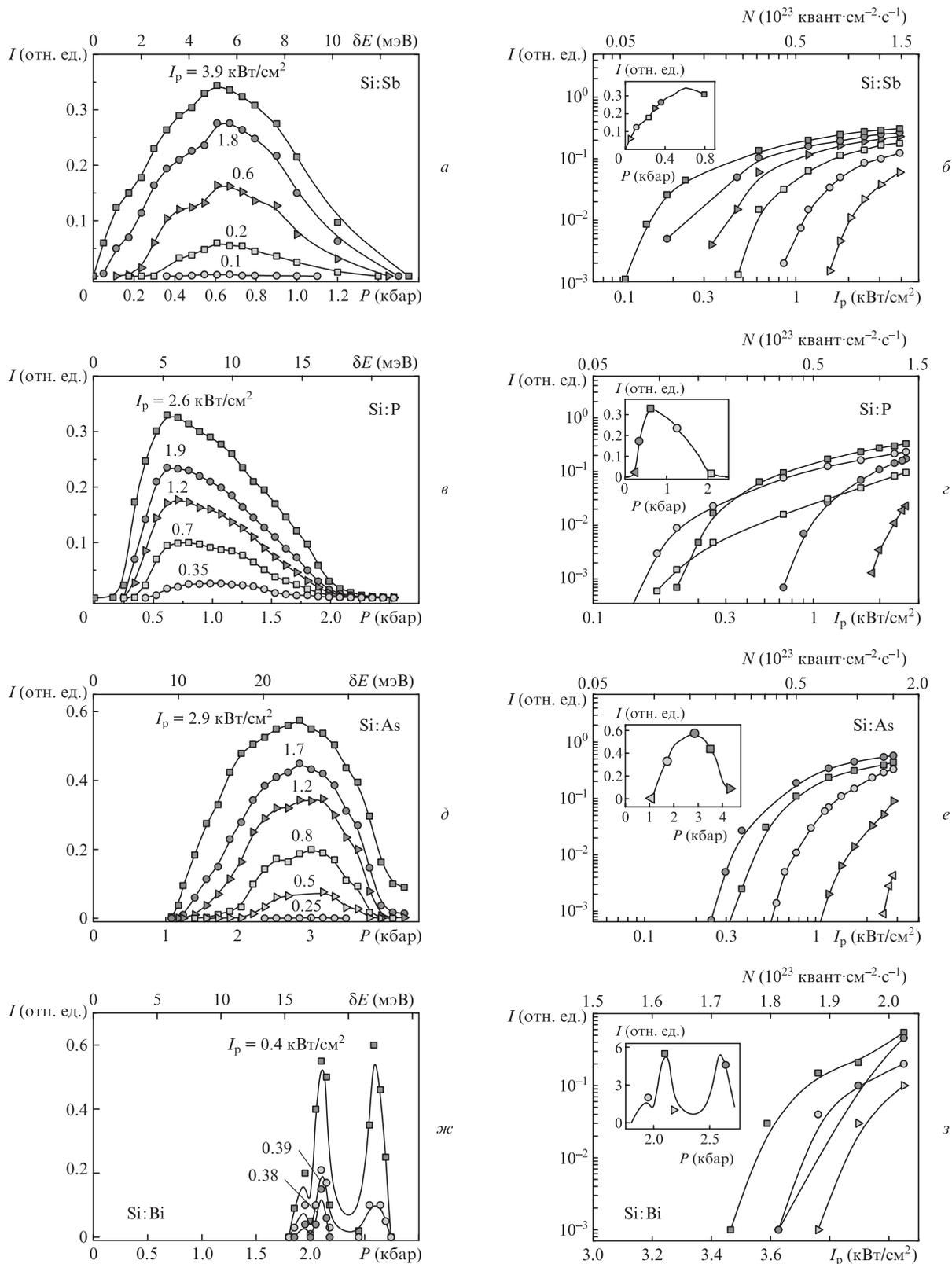


Рис.8. Зависимости выходной интенсивности стимулированного ТГц излучения доноров V группы от деформации сжатия по оси [100] при указанных интенсивностях накачки (*а*, *в*, *д* и *ж*) и от интенсивности накачки I_p CO_2 -лазера (10.6 мкм, 300 нс) для указанных на вставках деформаций (*б*, *г*, *е* и *з*).

доноров различны, хотя и близки. Кроме того, для всех доноров, за исключением P, наблюдается зависимость частоты генерации от деформации кристалла. Обратим внимание, что на рисунках отмечены переходы, определяющие стимулированное излучение. Их идентификация про-

водилась на основе теоретической зависимости спектра состояний доноров от деформации. Для доноров Bi такая зависимость показана на рис.1,а, а для P – на рис.1,б. Представленные спектры не противоречат известным спектрам поглощения (см., напр., [14]). Ввиду особого харак-

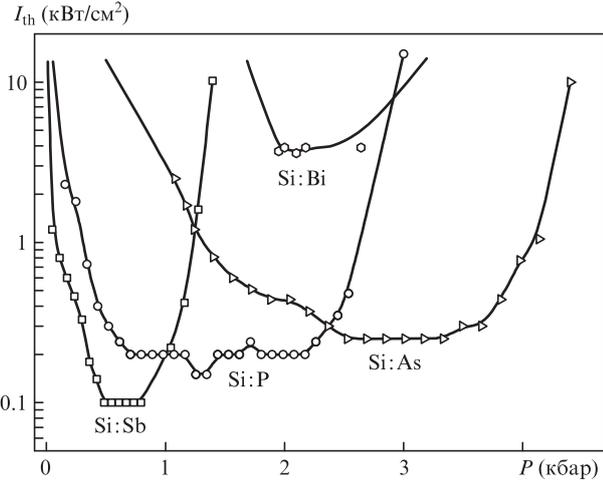


Рис.9. Зависимость пороговой интенсивности накачки I_{th} при возбуждении излучением CO_2 -лазера ($\lambda = 10.6$ мкм, $\tau = 300$ нс) от деформации сжатия кремния ($F||[100]$) для доноров Sb, P, As, Bi. Плотность потока 2 кВт/см 2 соответствует $\sim 10^{23}$ квант·см $^{-2}$ ·с $^{-1}$.

тера излучения доноров **Bi** подробная зависимость частот генерации этого центра от деформации сжатия по оси $[100]$ показана на рис.11.

Основные характеристики лазеров на внутрицентровых переходах доноров в деформированном кремнии при оптическом возбуждении излучением CO_2 -лазера сведены в итоговой табл.2. Часть из них есть результат измерений, а часть, отмеченная звездочкой, является теоретиче-

Табл.2. Измеренные и оцененные теоретически (*) параметры кремниевых ТГц лазеров.

Параметр	Без деформации	При деформации по оси $[100]$
Коэффициент усиления:		
фотоионизация (10.6 мкм)	≤ 0.2 см $^{-1}$	1 см $^{-1}$ *
внутрицентровая накачка (36 мкм)	$2-4$ см $^{-1}$	–
Квантовая эффективность:		
фотоионизация (10.6 мкм)	$\leq 1\%$ *	$\leq 10\%$ *
фотоионизация (17 мкм)	–	$\leq 15\%$ *
внутрицентровая накачка (19–39 мкм)	50% *	–
КПД (10.6 мкм)	до 10^{-3} *	до 10^{-2} *
Пороговая интенсивность накачки (10.6 мкм)	$\geq 15-100$ кВт/см 2	$\geq 100-200$ Вт/см 2
Перестройка частоты $\Delta\omega/\omega$	0	$\sim 1\%$
Рабочие температуры		
		$< 15-20$ К
Концентрация доноров		
		$(2-4) \times 10^{15}$ см $^{-3}$
Диапазон частот линий генерации		
		$4.9-6.4$ ТГц

ской оценкой. При такой оценке учитывалось поглощение излучения накачки решеткой кристалла и уменьшение эффективности накачки рабочих состояний из-за рассеяния в нерабочие состояния.

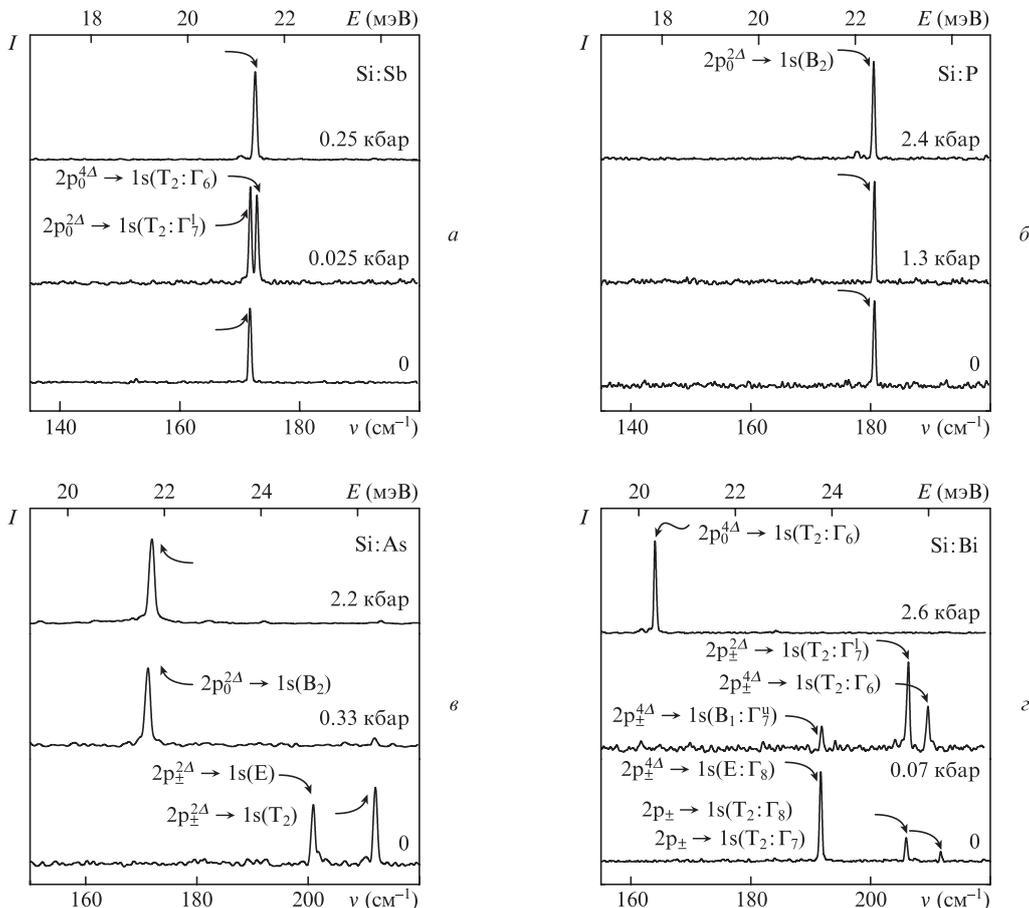


Рис.10. Частоты излучения доноров V группы при оптическом возбуждении излучением CO_2 -лазера и одноосном сжатии кристалла $F||[100]$. У оси справа показаны значения приложенного давления.

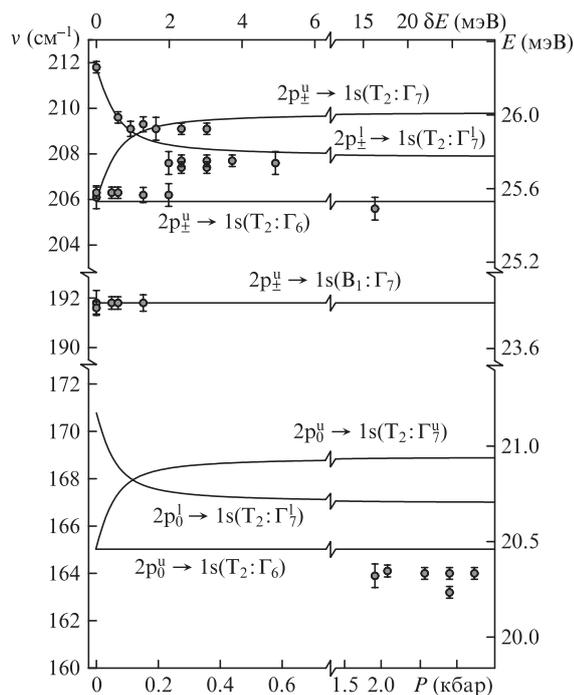


Рис.11. Зависимость частоты ν стимулированного излучения Si:Bi от деформации сжатия вдоль направления [100].

5. Обсуждение

Проведенные измерения наглядно демонстрируют увеличение коэффициента усиления на оптически возбуждаемых излучением CO_2 -лазера внутрицентровых переходах доноров V группы в кремнии, одноосно деформированном по оси [100]. Как следствие этого, повышается квантовая эффективность излучения и уменьшается порог генерации. Из данных рис.8,а–г видно, что доноры P и Sb наиболее близки по условиям стимулированного излучения. Тем не менее, доноры Sb имеют меньший порог накачки ($I_{\text{th}} \approx 100 \text{ Вт/см}^2$) при деформации $\delta E_{\text{орт}} \approx 5 \text{ мэВ}$. Для доноров P эти параметры составляют 200 Вт/см^2 и 10 мэВ соответственно. Заметим, что стимулированное излучение доноров P сохраняется при большей деформации кристалла. Эти данные не совпадают с результатами расчетов населенности рабочих состояний (см. рис.6 и [19]), согласно которым оптимум деформации для Si:Sb должен быть при $\delta E_{\text{орт}} \approx 8 \text{ мэВ}$, а для Si:P – при $\delta E_{\text{орт}} \approx 5 \text{ мэВ}$. Мы полагаем, что расхождение может быть частично устранено при использовании в расчетах параметра $K_0 = 0.85 \times 2\pi a^{-1}$, а оценка на рис.6 получена для $K_0 = 0.835 \times 2\pi a^{-1}$ [22]. Однако полного количественного согласия ожидать не следует, так как кроме параметров населенности и усиления на рабочих переходах необходимо учитывать и другие факторы. К таковым следует отнести зависимость поглощения на отрицательно заряженных донорах от деформации (рис.4, 5). То же самое можно сказать относительно данных по Si:As. Тем не менее, наблюдаемый сдвиг в сторону больших значений оптимальной деформации для доноров Sb, P и As следует за химическим сдвигом. Напомним, что в недеформированном кремнии энергия связи основного состояния $1s(A_1^1)$ составляет для сурьмы $\sim 42.74 \text{ мэВ}$, фосфора $\sim 45.59 \text{ мэВ}$, а мышьяка $\sim 53.76 \text{ мэВ}$ [14]. Соответственно химический сдвиг равен 11.4, 14.3 и 22.5 мэВ. Согласно расчету [12] время жизни нижнего состояния $1s(B_2)$ рабочего перехода контроли-

руется для доноров Sb и P взаимодействием с междолинными фононами TA-g, имеющими энергию $\sim 12 \text{ мэВ}$, а для донора As – фононами LA-g и TA-f. Энергия таких фононов согласно дисперсионным кривым [26] близка к 20 мэВ . Заметим, что в расчетах учитывался химический сдвиг основного состояния, а его волновая функция считалась водородоподобной. Выход нижнего состояния рабочего перехода из резонанса с указанными междолинными фононами из-за уменьшения энергии связи состояния $1s(A_1^1)$ с ростом деформации и, соответственно, уменьшения энергии перехода $1s(B_2) \rightarrow 1s(A_1)$ приводит к постепенному снижению инверсии и полному исчезновению генерации.

Данные по измерению частот излучения доноров P и Sb (рис.10,а,б) хорошо согласуются с расчетами спектров состояний (спектр для P см. на рис.1,б). Идентифицировать рабочие переходы нетрудно. Для этих центров таковым является переход $2p_0^{2A} \rightarrow 1s(B_2)$, на частоту которого (согласно теории и эксперименту) одноосная деформация кристалла не оказывает никакого влияния. Наблюдаемый для доноров сурьмы при малой деформации двухчастотный режим генерации связан с состояниями $1s(T_2: \Gamma_7^1)$ и $1s(T_2: \Gamma_6)$, возникшими в результате спин-орбитального расщепления состояния $1s(T_2)$ (см. рис.1,а). Данные измерений частот генерации Sb в зависимости от деформации подтверждают оценку параметра спин-орбитального расщепления $A_{SO} \approx 0.29 \text{ мэВ}$ [15]. Для атомов As, также как и для P, эффект спин-орбитального взаимодействия пренебрежимо мал. Следовательно, на указанных на рис.10 переходах частота излучения не должна зависеть от деформации (см. рис.1). Но из-за изменения энергии связи основного состояния $1s(A_1)$ может наблюдаться смена частот. Это имеет место для As при сжатии кристалла по оси [100] при давлении $\sim 300 \text{ бар}$ (рис.10,в). Переключение частот объясняется участием в процессе внутрицентральной релаксации междолинного фонона LA-f ($\sim 47 \text{ мэВ}$), который в недеформированном кремнии и при малых деформациях сбрасывает электроны донора As из состояния $2s$ на основное $1s(A_1)$, выключая накачку состояния $2p_0$. Однако при $P > 300 \text{ бар}$ резонансное взаимодействие выключается и $2p_0$ становится наиболее населенным возбужденным состоянием. Как уже отмечалось, в недеформированном Si:As распад состояния $1s(B_2)$ происходит в основном благодаря излучению междолинных фононов LA-g и TA-f, энергия которых близка к энергии перехода $1s(B_2) \rightarrow 1s(A_1)$. Однако при давлениях, превышающих 1 кбар, эти фононы выходят из резонанса, но включается процесс релаксации данного состояния на фононах TA-g. Тем самым во всем диапазоне деформаций до 4–5 кбар (рис.6) должна сохраняться инверсная населенность состояний и усиление на переходах $2p \rightarrow 1s(B_2)$.

По результатам измерения частот излучения доноров Bi в зависимости от деформации сжатия по оси [100] и их сопоставлению с соответствующей теоретической зависимостью спектра состояний зоны проводимости обнаружено, что данный центр в отличие от других доноров V группы при оптическом возбуждении на длинах волн 9.6–10.6 мкм генерирует на переходах 4Δ-долин. Это объясняет наблюдаемые особенности зон оптимальной деформации и порога накачки. Энергия основного состояния донора висмута в недеформированном кремнии близка к 71 мэВ с химическим сдвигом $\sim 39.7 \text{ мэВ}$. Релаксация возбужденных $1s$ -состояний (нижних рабочих состояний при генерации стимулированного излучения) определяется взаимодействием с фононами LA-f и LA-g; в релаксации

2p- состояний (верхних рабочих) существенную роль играют междолинные переходы при взаимодействии с оптическими фононами TO-f и LO-g, что определяет особенность релаксации возбужденных состояний этого центра [19]. Согласно спектральным измерениям в широком интервале деформаций генерация наблюдается на переходах 4Δ-долин (см. рис.11). Инверсная населенность состояний 2Δ-долин оказывается подавленной из-за прямого захвата фотовозбужденных носителей из зоны проводимости в основное состояние с излучением фононов LO-g. В верхних 4Δ-долинах такой фактор отсутствует. Однако согласно измерениям лишь около 10% возбуждаемых электронов попадает на рабочие $2p_0^{4A}$ -состояния верхних долин, что увеличивает пороговую интенсивность накачки.

6. Направленность и поляризация выходного излучения

Очевидно, что такие характеристики стимулированного излучения в рассматриваемой среде определяются конструкцией резонатора и деформацией кристалла. Приведенные в статье измерения были выполнены на образцах-резонаторах, имеющих форму параллелепипеда (рис.12,а). Установлено, что в отсутствие деформации излучение из такого образца не поляризовано, а диаграмма направленности имеет большой угол расходимости: $\theta > 60^\circ$. Использование образцов, вырезанных в форме, показанной на рис.12,б, позволяет получить направленный ($\theta \approx 10^\circ$) выход поляризованного по оси деформации стимулированного излучения. Разумеется, указанное значение угла θ не является предельным и может быть уменьшено. В частности, это возможно сделать в конструкции с использованием кремниевой призмы связи (рис.12,в). Дополнительным достоинством такой схемы является возможность регулирования потерь на выход стимулированного излучения путем изменения зазора между активным образцом и призмой.

7. Заключение

Показано, что одноосное сжатие кристалла по оси [100] приводит к существенному увеличению квантовой эффективности и коэффициента усиления активной среды ТГц диапазона на основе оптически возбуждаемых излучением CO₂-лазера доноров в кремнии, а пороговые значения интенсивности накачки показывают возможность получения квазинепрерывного режима генерации. Такой результат является следствием влияния деформации на состояния зоны проводимости, что уменьшает внутрен-

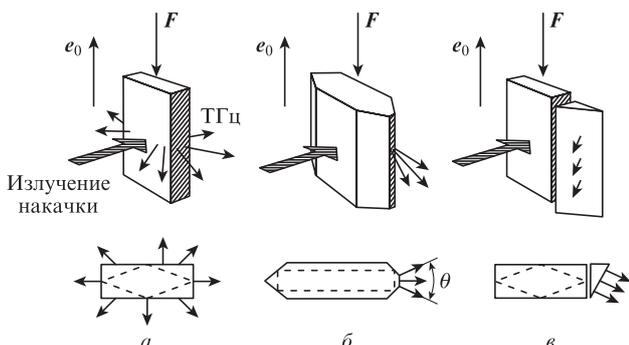


Рис.12. Направленность излучения в зависимости от формы образцов (поляризация поля волны излучения $e_0 \parallel F$).

ние потери, увеличивает эффективность накачки и снижает темп релаксации/распада рабочих состояний. К этому следует добавить и уменьшение внутренних потерь, связанных с поглощением на отрицательно заряженных донорах и их комплексах. При изменении величины деформации может происходить как смена рабочих переходов (Si:As) и соответствующее скачкообразное изменение частоты генерации, так и более плавная ее перестройка, связанная с влиянием деформации на величину спин-орбитального расщепления $1s(T_2)$ состояний (Si:Bi и Si:Sb).

Работа поддержана РФФИ (гранты №14-02-00638А, 13-02-97116р_поволжье_а, 14-02-31628мол_а) и Минобрнауки (проект RFMEFI61614X0008).

1. Shastin V.N. *21st Int. Conf. on Infrared and Millimeter Waves: Conf. Digest* (Berlin, 1996, abstr. ID CT2).
2. Pavlov S.G., Zhukavin R.Kh., Orlova E.E., Shastin V.N., Kirsanov A.V., Hübers H.-W., Auen K., Riemann H. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 5220 (2000).
3. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Rummeli M.H., Zhukavin R.Kh., Orlova E.E., Shastin V.N., Riemann H. *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 4717 (2002).
4. Hübers H.-W., Pavlov S.G., Riemann H., Abrosimov N.V., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N. *Appl. Phys. Lett.*, **84**, 3600 (2004).
5. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Hovenier J.N., Klaassen T.O., Carder D.A., Phillips P.J., Redlich B., Riemann H., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 037404 (2006).
6. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Hovenier J.N., Klaassen T.O., Riemann H., Abrosimov N.V., Notzel N., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N. *J. Luminescence*, **121**, 304 (2006).
7. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Böttger U., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N., Hovenier J.N., Redlich B., Abrosimov N.V., Riemann H. *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 091111 (2008).
8. Pavlov S.G., Böttger U., Hovenier J.N., Abrosimov N.V., Riemann H., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N., Redlich B., van der Meer A.F.G., Hübers H.-W. *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 171112 (2009).
9. Pavlov S.G., Böttger U., Eichholz R., Abrosimov N.V., Riemann H., Shastin V.N., Redlich B., Hübers H.-W. *Appl. Phys. Lett.*, **95**, 201110 (2009).
10. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Orlova E.E., Zhukavin R.Kh., Riemann H., Nakata H., Shastin V.N. *Phys. Stat. Sol. (b)*, **235** (1), 126 (2003).
11. Цыпленков В.В., Ковалевский К.А., Шасти́н В.Н. *ФТП*, **42** (9), 1032 (2008).
12. Цыпленков В.В., Ковалевский К.А., Шасти́н В.Н. *ФТП*, **43** (11), 1450 (2009).
13. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М.: Наука, 1972, с. 340).
14. Ramdas A.K., Rodriguez S. *Rep. Prog. Phys.*, **44**, 1297 (1981).
15. Mayur A.J., Dean Sciacca M., Ramdas A.K., Rodriguez S. *Phys. Rev. B*, **48** (15), 10893 (1993).
16. Pavlov S.G., Hübers H.-W., Orlova E.E., Zhukavin R.Kh., Shastin V.N. *Semicond. Sci. Technol.*, **19**, 465 (2004).
17. Бейнихес И.Л., Коган Ш.М. *ЖЭТФ*, **93**, 285 (1987).
18. Oliveira L.E., Falicov L.M. *Phys. Rev. B*, **33**, 6990 (1986).
19. Цыпленков В.В. *Канд. дисс.* (Н.Новгород, Институт физики микроструктур РАН, 2010).
20. Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясиевич И.Н. *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках* (СПб: Издание ПИЯФ им. Б.П.Константинова, 1997, с. 376).
21. Jacoboni C., Reggiani L. *Rev. Mod. Phys.*, **55** (3), 645 (1983).
22. Ю П., Кардона М. *Основы физики полупроводников* (М.: Физматлит, 2002, с. 199).
23. Pavlov S.G., Böttger U., Hübers H.-W., Zhukavin R.Kh., Kovalevsky K.A., Tsyplenkov V.V., Shastin V.N., Abrosimov N.V., Riemann H. *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 141109 (2007).
24. Zhukavin R.Kh., Tsyplenkov V.V., Kovalevsky K.A., Shastin V.N., Pavlov S.G., Böttger U., Hübers H.-W., Riemann H., Abrosimov N.V., Nötzel N. *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 051101 (2007).
25. Shastin V.N., Zhukavin R.Kh., Kovalevsky K.A., Tsyplenkov V.V., Pavlov S.G., Hübers H.-W. *J. Phys.: Conf. Ser.*, **193**, 012086 (2009).
26. Dolling G. in *Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids* (IAEA, Vienna, 1963, v. 2, p. 37).