

# 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.Шагин

*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 СО<sub>2</sub>-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/см<sup>2</sup> для P, Sb и 300 кВт/см<sup>2</sup>

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  $\sim 1$  мэВ и близки к энергии основного состояния для «чистого» кулоновского центра (31.3 мэВ). В то же время поправка  $\Delta$  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.Шагин. 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.Шагин. 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.

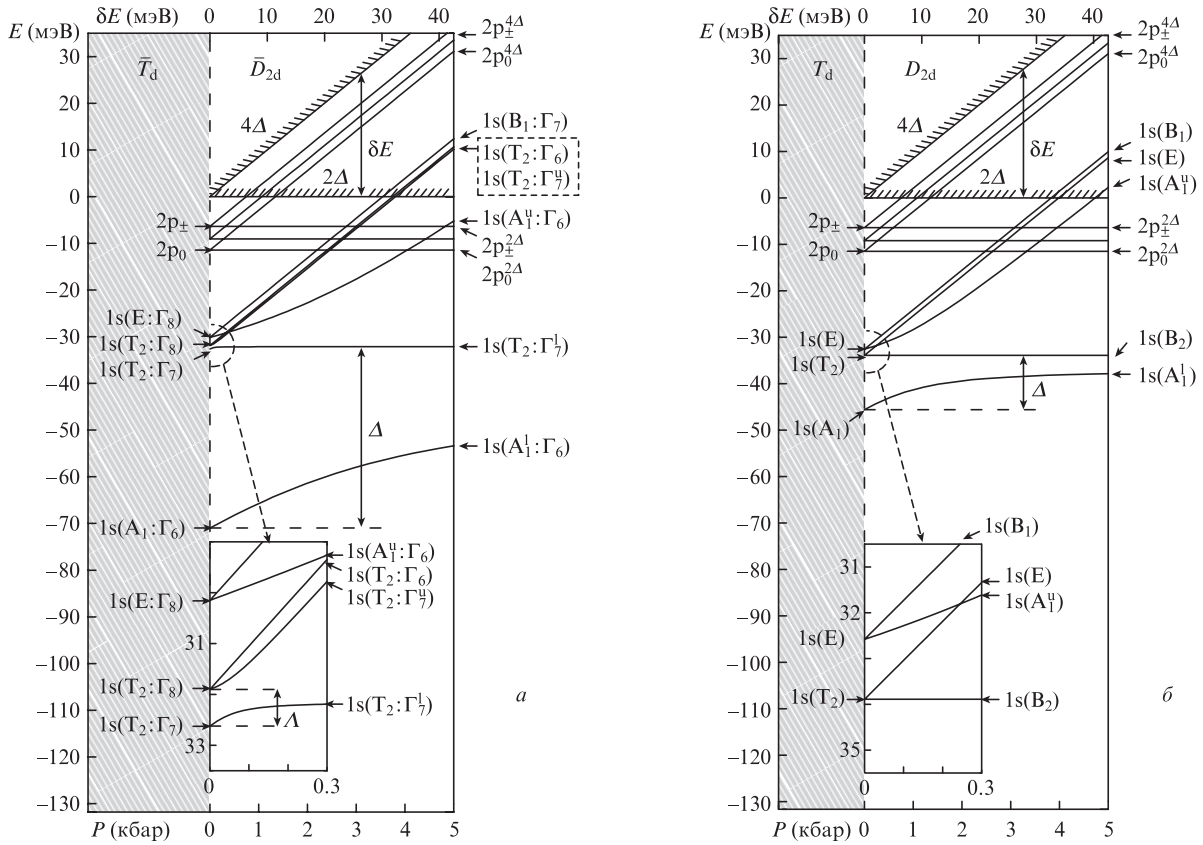


Рис.1. Схема уровней электронных состояний Si:Bi (а) и Si:P (б) при одноосной деформации сжатия кристалла кремния  $\mathbf{F} \parallel [100]$ .

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  $\Lambda_{so}$  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  $\delta E$  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  $2\Delta$  и  $4\Delta$  указывают на принадлежность состояний к  $2\Delta$ - и  $4\Delta$ -долинам соответственно. Следует отметить, что при  $\delta E \gg \Delta$  потенциал ячейки уже не связывает 1s-состояния долин  $2\Delta$  и  $4\Delta$ , а для состояний триплета гибридизация этих долин, обусловленная спин-орбитальным взаимодействием, подавляется уже при  $\delta E > \Lambda_{so}$ . Величина расщепления  $\delta E$  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<sup>-1</sup> – компоненты тензора жесткости [14].

В случае недеформированного кремния при накачке CO<sub>2</sub>-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  $2\Delta$ -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

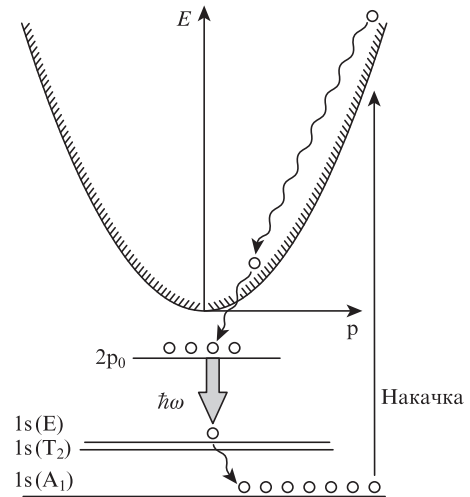


Рис.2. Схема формирования инверсии населенностей между состояниями мелкого донора фосфора (P) в кремнии (Si) в импульсном пространстве при фотовозбуждении CO<sub>2</sub>-лазером.

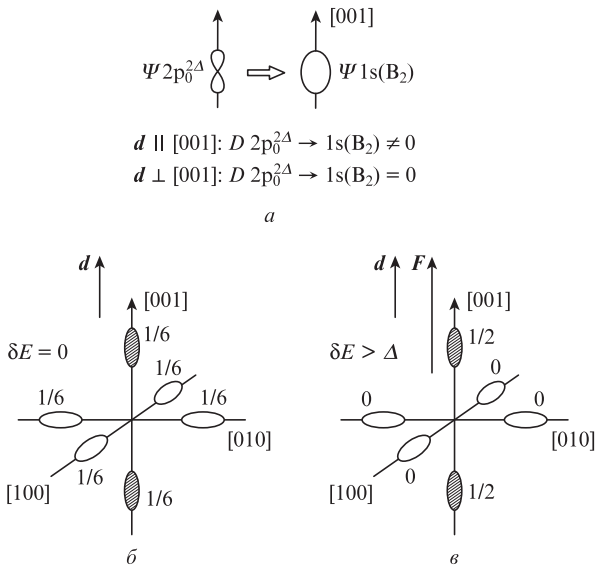


Рис.3. Оптический переход  $2p_0 \rightarrow 1s$  в кремнии: волновые функции  $\Psi$  и матричный элемент  $D$  дипольного перехода (а), населенности долин в недеформированном образце ( $\delta E = 0$ ) (б) и в условиях одноосной деформации ( $\delta E > \Delta$ ) (в). Цифры (0, 1/6, 1/2) показывают 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  $\sigma$ . Согласно волновой функции основного состояния донора при деформации  $\delta E > \Delta$  вдоль оси  $[100]$  [13] при накачке излучением  $\text{CO}_2$ -лазера ( $\sim 10.6$  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  $\sigma_0$  – сечение фотоионизации для недеформированного кремния,  $e$  – вектор поля накачки, а  $\sigma_{\perp}$  и  $\sigma_{\parallel}$  – сечения фотоионизации для одной долины основного состояния при поляризации поля накачки, перпендикулярной и направленной вдоль тяжелой массы соответственно. Для оценки использовались значения  $\sigma_{\perp}$  и  $\sigma_{\parallel}$  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  $\sim 0.5$  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  $\text{CO}_2$ -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  $\text{CO}_2$ -лазера регистрировалась Ge: Ga-детектором. Результаты измерений представлены на рис.5. Согласно полученным данным поглощение ТГц излуче-

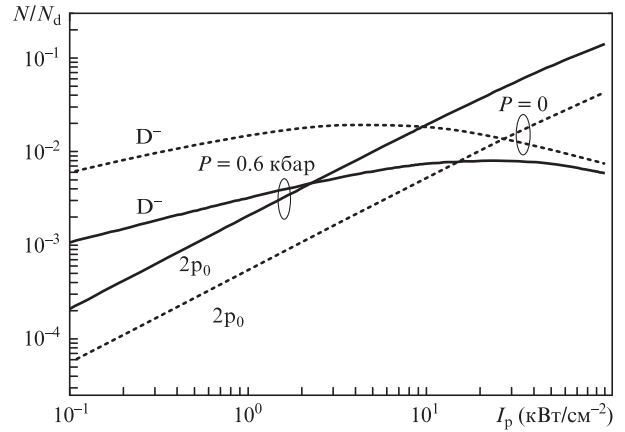


Рис.4. Расчет населенностей состояний  $2p_0$  и  $D^-$ -центров в Si: Sb от интенсивности накачки  $\text{CO}_2$ -лазера.  $N_d$  – концентрация доноров.

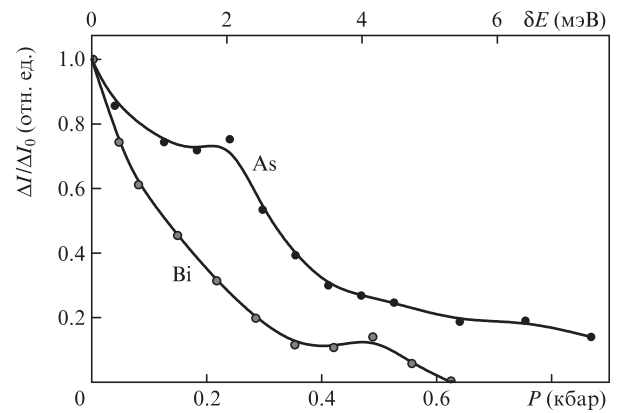


Рис.5. Зависимость поглощения  $\Delta I = \max(I_{in} - I_{out})$  излучения квантово-каскадного лазера ( $\lambda = 97$  мкм) от деформации сжатия вдоль направления  $[100]$ , нормированного на величину  $\Delta I_0 = \Delta I (P = 0)$ .

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  $\text{CO}_2$ -лазером (неполяризованное излучение) в зависимости от деформации сжатия кристалла по оси  $[100]$  [19]. Здесь  $\delta N$  – 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<sup>-1</sup> и использовались представления о каскадном захвате электронов на верхние возбужденные состояния донора с излучением длинноволновых акустических фононов [20]. Зависимость от деформации темпов

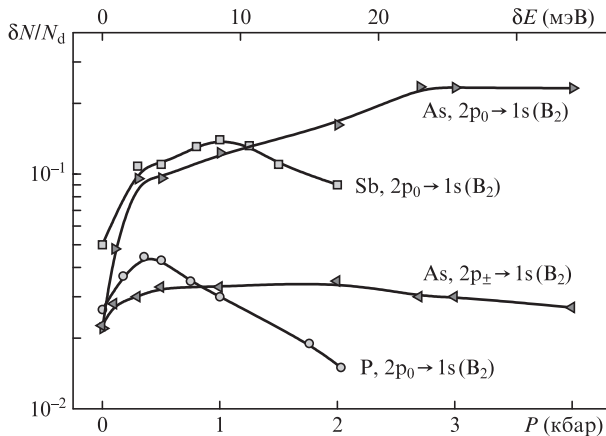


Рис.6. Зависимость инверсии населенностей состояний на переходах  $2p_0, 2p_{\pm} \rightarrow 1s(B_2)$  доноров Sb, P, As от деформации  $F \parallel [100]$  ( $\delta N$  – разность населенностей состояний на рабочем переходе).

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  $\text{CO}_2$ -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)	$N_d (10^{15} \text{ см}^{-3})$
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.

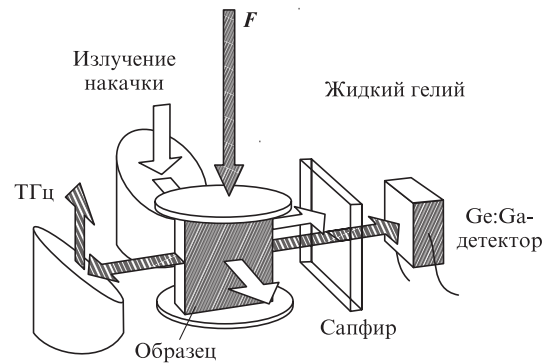


Рис.7. Оптическая схема эксперимента.

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  $\text{CO}_2$ -лазером опубликованы в работах [23–25]. Видно, что использование  $\text{CO}_2$ -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  $\text{CO}_2$ -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  $22 \text{ мэВ}$  (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  $\text{Вт/см}^2$  соответственно. Особняком снова стоит донор Bi, для которого минимальная пороговая интенсивность накачки близка к 3.6  $\text{кВт/см}^2$ .

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

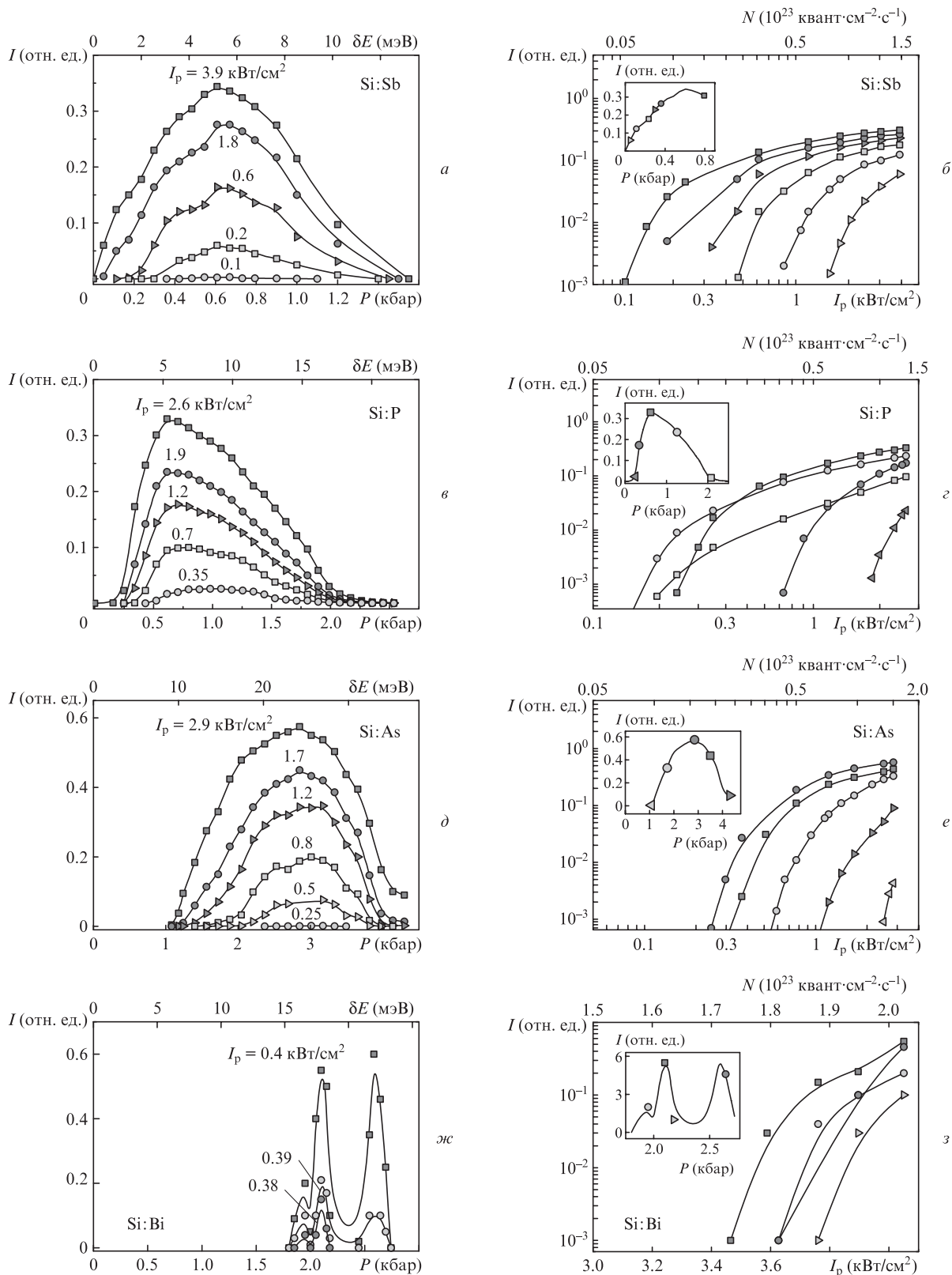


Рис.8. Зависимости выходной интенсивности стимулированного ТГц излучения доноров V группы от деформации сжатия по оси [100] при указанных интенсивностях накачки (*a, в, д и ж*) и от интенсивности накачки  $I_p$  CO<sub>2</sub>-лазера (10.6 мкм, 300 нс) для указанных на вставках деформаций (*б, г, е и 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,*a*, а для P – на рис.1,*б*. Представленные спектры не противоречат известным спектрам поглощения (см., напр., [14]). Ввиду особого харак-

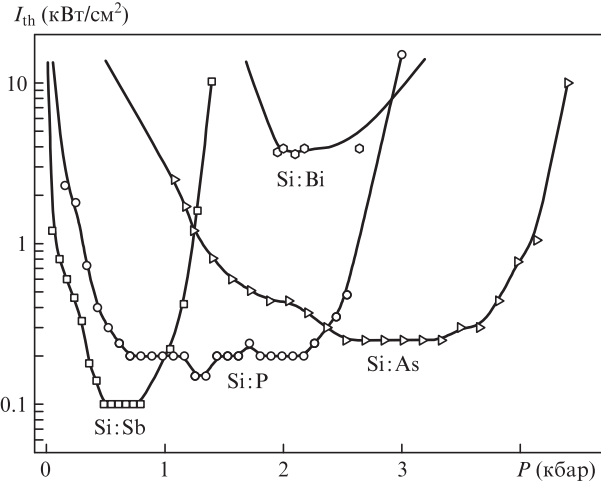


Рис.9. Зависимость пороговой интенсивности накачки  $I_{th}$  при возбуждении излучением  $CO_2$ -лазера ( $\lambda = 10.6$  мкм,  $\tau = 300$  нс) от деформации сжатия кремния ( $F||[100]$ ) для доноров Sb, P, As, Bi. Плотность потока  $2$  кВт/см<sup>2</sup> соответствует  $\sim 10^{23}$  квант·см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

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)	$\leq 0.2$ см <sup>-1</sup>	1 см <sup>-1</sup> *
внутрицентровая накачка (36 мкм)	2–4 см <sup>-1</sup>	–
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 <sup>2</sup>	$\geq 100-200$ Вт/см <sup>2</sup>
Перестройка частоты $\Delta\omega/\omega$	0	$\sim 1\%$
Рабочие температуры		
		< 15–20 К
Концентрация доноров		
		(2–4) $\times 10^{15}$ см <sup>-3</sup>
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.

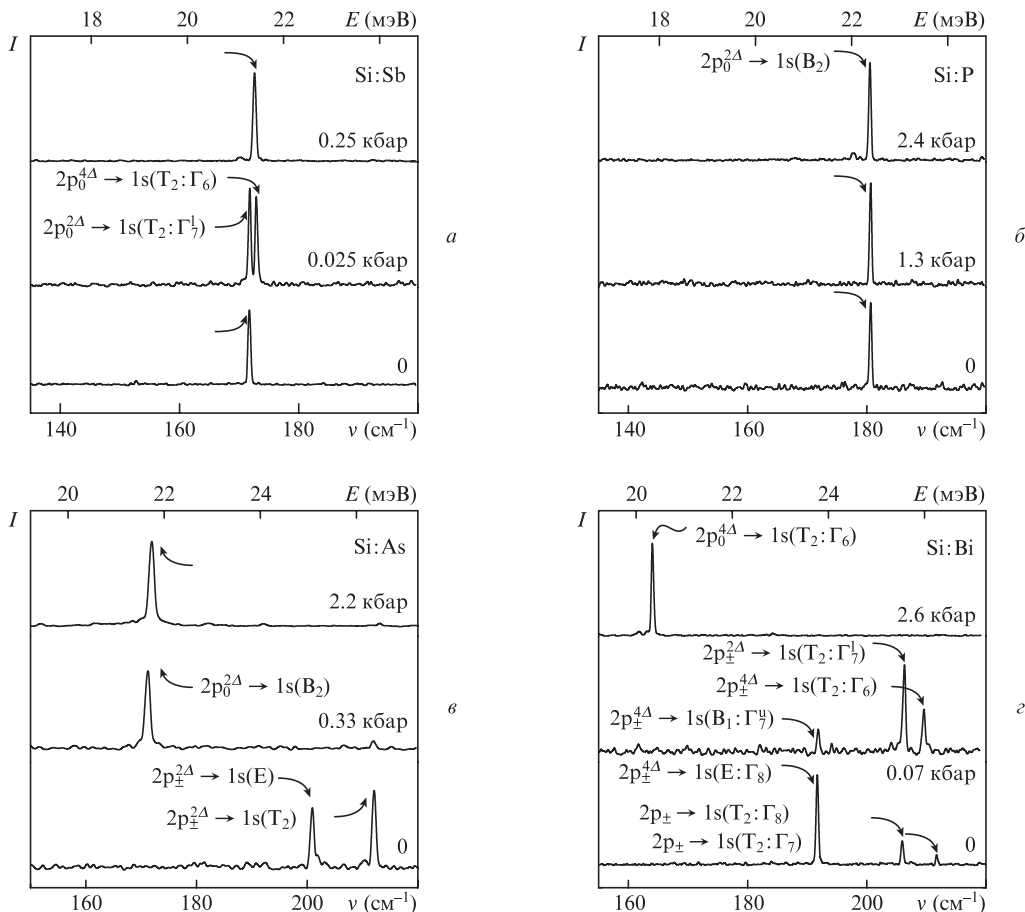


Рис.10. Частоты излучения доноров V группы при оптическом возбуждении излучением  $CO_2$ -лазера и одноосном сжатии кристалла  $F||[100]$ . У оси справа показаны значения приложенного давления.

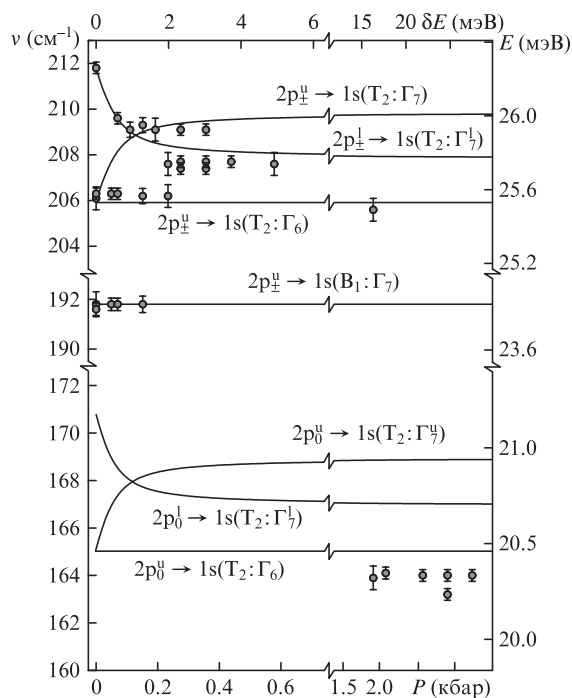


Рис.11. Зависимость частоты  $\nu$  стимулированного излучения Si:Bi от деформации сжатия вдоль направления [100].

## 5. Обсуждение

Проведенные измерения наглядно демонстрируют увеличение коэффициента усиления на оптически возбуждаемых излучением  $\text{CO}_2$ -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  $200 \text{ Вт/см}^2$  и  $10 \text{ мэВ}$  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  $20 \text{ мэВ}$ . 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 фонами 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  $\theta$  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 CO<sub>2</sub>-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-

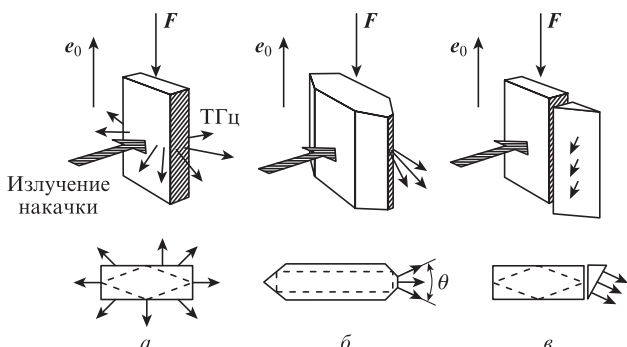


Рис.12. Направленность излучения в зависимости от формы образцов (поляризация поля волны излучения  $e_0 \parallel F$ ).

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\_a, 14-02-31628мол\_a) 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).