

Расчет энергетических уровней мелкого акцептора в одноосно-деформированном германии

© М.А. Одноблюдов, В.М. Чистяков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 октября 1997 г. Принята к печати 23 декабря 1997 г.)

Вариационным методом рассчитаны положения резонансных и локализованных энергетических уровней мелкой акцепторной примеси в одноосно-сжатом германии в пределе больших давлений. Приведена зависимость положения этих уровней от приложенного давления.

Введение

Проблема расчета положения энергетических уровней мелкого акцептора в деформированных полупроводниках стала в настоящее время особенно актуальна благодаря обнаружению стимулированного излучения дальнего инфракрасного (ИК) диапазона из *p*-Ge, подвергнутого одноосному сжатию [1]. Считается, что стимулированное излучение вызвано оптическими переходами дырок между различными состояниями мелких акцепторов и связано с образованием резонансных акцепторных состояний, т.е. акцепторных состояний, попадающих в непрерывный спектр валентной зоны под действием одноосной деформации. Для подтверждения этой гипотезы необходима информация о положении локализованных и резонансных акцепторных уровней в деформированном Ge. В работе [2], где расчет проводился в рамках модели потенциала нулевого радиуса, показано, что резонансные состояния в такой системе существуют и найдены их энергии и времена жизни. Однако для описания реальной ситуации при больших давлениях этот метод дает слишком приближенные результаты, касающиеся положения уровней. Кроме того, потенциал нулевого радиуса не дает энергии возбужденных состояний. Проводились также расчеты [3], использующие вариационный метод, который с хорошей точностью позволяет рассчитать энергии локализованных состояний, однако он не дает даже наличия резонансных состояний. Это происходит, по-видимому, вследствие того, что вариационный метод не дает возможности проследить трансформацию локализованного состояния в резонансное.

В работе произведен расчет акцепторных уровней в пределе больших деформаций, рассчитаны энергии основного и нескольких возбужденных состояний локализованной и резонансной серий. Мы использовали вариационный метод, заранее предполагая, что резонансные состояния существуют, и при расчете рассматривая их как локализованные.

Теория

Валентная зона в сферическом приближении и при приложении одноосной деформации описывается гамильтонианом Латтинжера 4×4 [4,5]:

$$H(\mathbf{k}, \zeta) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} a_+ & b & c & 0 \\ b^* & a_- & 0 & c \\ c^* & 0 & a_- & -b \\ 0 & c^* & -b^* & a_+ \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} a_+ &= -(\gamma_1 - 2\gamma)k_z^2 - (\gamma_1 + \gamma)(k_x^2 + k_y^2) - \zeta, \\ a_- &= -(\gamma_1 + 2\gamma)k_z^2 - (\gamma_1 - \gamma)(k_x^2 + k_y^2) + \zeta, \\ b &= 2\sqrt{3}\gamma(k_x - ik_y)k_z, \\ c &= \sqrt{3}\gamma(k_x - ik_y)^2, \quad \gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5. \end{aligned} \quad (1a)$$

При записи (1) была выбрана следующая система базисных блоховских функций:

$$\begin{aligned} u_{3/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY) \uparrow, \quad u_{1/2} = \frac{i}{\sqrt{6}}((X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow), \\ u_{-3/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY) \downarrow, \\ u_{-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}}((X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow). \end{aligned} \quad (2)$$

Диагонализация гамильтониана (1) дает нам спектр валентной зоны, который состоит из подзон тяжелых (ε_h) и легких дырок (ε_l), вершины которых разделены по энергии на величину

$$E_{\text{def}} = \frac{\hbar^2 \zeta}{m_0} = bX, \quad (3)$$

где b — деформационный потенциал, X — приложенное давление. Спектр валентной зоны в деформированном

кристалле имеет вид

$$\varepsilon_{l,h}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(-\gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \pm \sqrt{\zeta^2 - 2\gamma\zeta (k_z^2 - k_x^2 - k_y^2) + 4\gamma^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^2} \right). \quad (4)$$

В пределе больших деформаций, удерживая в подкоренном выражении квадратичные по k члены и раскладывая его в ряд по малому параметру $\frac{k_z^2}{\zeta}$, мы получаем спектр валентной зоны, состоящий из двух невзаимодействующих эллипсоидальных подзон:

$$\varepsilon_l(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} ((\gamma_1 + 2\gamma)k_z^2 + (\gamma_1 - \gamma)(k_x^2 + k_y^2) - \zeta),$$

$$\varepsilon_h(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} ((\gamma_1 - 2\gamma)k_z^2 + (\gamma_1 + \gamma)(k_x^2 + k_y^2) + \zeta). \quad (5)$$

Предел больших деформаций соответствует переходу от 4-компонентного базиса (2) к двум 2-компонентным наборам базисных блоховских функций:

$$[u_{+3/2}, u_{-3/2}], \quad (6a)$$

$$[u_{+1/2}, u_{-1/2}], \quad (6b)$$

т.е. исключению из гамильтониана (1) членов, соответствующих взаимодействию состояний с разными значениями проекции спина дырки на ось z .

При наличии в деформированном кристалле потенциала мелкой акцепторной примеси мы будем иметь две серии акцепторных уровней под дном каждой подзоны. Состояния под дном подзоны тяжелых дырок будут резонансными. Волновые функции дырки, локализованной на мелком акцепторе, имеют вид

$$\varphi_{3/2}^l(\mathbf{r}) = f^l(\mathbf{r})u_{3/2}(\mathbf{r}); \quad \varphi_{-3/2}^l(\mathbf{r}) = f^l(\mathbf{r})u_{-3/2}(\mathbf{r});$$

$$\varphi_{1/2}^h(\mathbf{r}) = f^h(\mathbf{r})u_{1/2}(\mathbf{r}); \quad \varphi_{-1/2}^h(\mathbf{r}) = f^h(\mathbf{r})u_{-1/2}(\mathbf{r}); \quad (7)$$

где значки l и h используются для обозначения волновых функций в подзонах легких и тяжелых дырок соответственно. Уравнения эффективной массы для определения волновых функций и уровней энергии мелкого примесного центра, записанные в базисе (6a) для подзоны тяжелых дырок и в базисе (6b) для подзоны легких дырок, имеют вид

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^l} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^l} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2}{\kappa r} + E \right) f^l = 0, \quad (8a)$$

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}^h} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}^h} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{e^2}{\kappa r} + E \right) f^h = 0. \quad (8b)$$

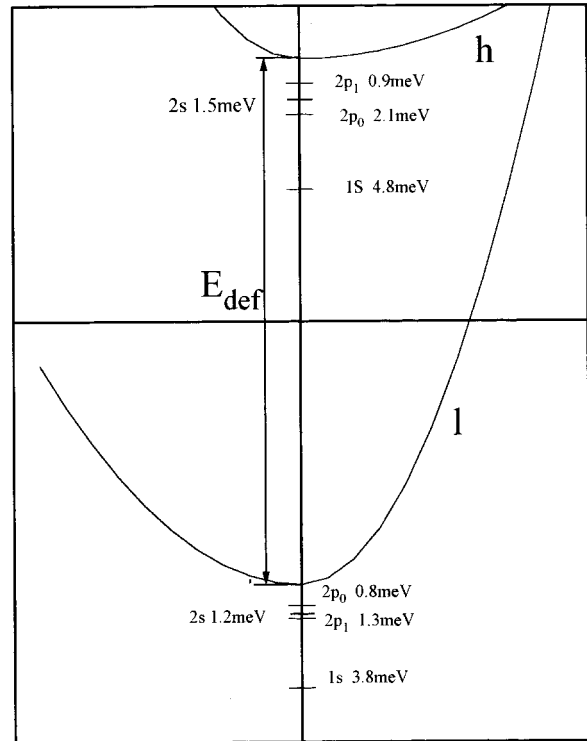


Рис. 1. Схема энергетических уровней мелкой акцепторной примеси в одноосно-сжатом германии. Классификация уровней соответствует пределу больших деформаций.

Введем безразмерный параметр $\eta = m_{\perp}/m_{\parallel}$, безразмерные координаты в единицах боровского радиуса $a_B = \hbar^2 \kappa / m_{\perp} e^2$ и безразмерную энергию в единицах $E_B = m_{\perp} e^4 / 2\hbar^2 \kappa$ (κ — диэлектрическая проницаемость); тогда уравнения (8) переписутся в виде

$$\left(\eta^{l,h} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2}{r} + E \right) f^{l,h} = 0. \quad (9)$$

Без учета внутреннего момента дырки собственные состояния гамильтониана (9) характеризуются проекцией орбитального момента (m) на ось z и четностью (i). Задача нахождения собственных значений гамильтониана (9) рассматривалась в связи с нахождением спектра мелкого донора в Si и Ge [6]. Предел больших деформаций, для которого верны (8a) и (8b), можно ввести соотношением $E_{\text{def}} > E$, т.е. величина деформационного расщепления вершины валентной зоны должна быть больше энергии ионизации примесного центра.

Следуя работе [6], мы вариационным методом считали энергии четырех наинизших локализованных состояний под дном эллипсоидальной зоны, которые мы обозначили как $1s$, $2p_{\pm 1}$, $2p_0$, $2s$, где $1s$ — состояние с $m = 0$, $i = +1$; $2p_{\pm 1}$ — состояния с $m = \pm 1$, $i = -1$; $2p_0$ — состояния с $m = 0$, $i = -1$; $2s$ — состояния с $m = 0$, $i = +1$. Схема расположения этих уровней приведена на рис. 1. При расчете ис-

Таблица 1.

Состояния	Пробные функции: f^l, f^h
	$F(\rho, z) = \exp\left(-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{1/2}\right)$
1s	$CY_{00}(\theta, \varphi)F(\rho, z) = \tilde{C} \exp\left(-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{1/2}\right)$
2p ₀	$CY_{10}(\theta, \varphi)rF(\rho, z) = \tilde{C}z \exp\left(-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{1/2}\right)$
2s	$(C_1Y_{00}(\theta, \varphi) + C_2Y_{20}(\theta, \varphi)r^2)F(\rho, z)$ $= (\tilde{C}_1 + \tilde{C}_2\rho^2 + \tilde{C}_3z^2) \exp\left(-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{1/2}\right)$
2p _{±1}	$CY_{1±1}(\theta, \varphi)rF(\theta, \varphi)$ $= \tilde{C}(x \pm iy) \exp\left(-\left(\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}\right)^{1/2}\right)$

Таблица 2.

Состояния	Энергии локализованных состояний, под дном l-подзоны, мэВ	Энергии резонансных состояний, под дном h-подзоны, мэВ
1s	3.8	4.76
2p _{±1}	1.3	0.9
2s	1.2	1.53
2p ₀	0.8	2

пользовались следующие значения эффективных масс: $m_{||}/m_0 = 0.04$, $m_{\perp}/m_0 = 0.13$ (для подзоны легких дырок), $m_{||}/m_0 = 0.5$, $m_{\perp}/m_0 = 0.05$ (для подзоны тяжелых дырок) и параметров η^l и η^h : $\eta^l = 3.25$, $\eta^h = 0.1$. Эти данные соответствуют пределу больших деформаций для Ge [5]. В расчете использовались вариационные функции, приведенные в табл. 1.

Результаты

В результате расчета спектра мелкого акцептора в пределе больших деформаций в Ge мы получили энергии уровней, представленные в табл. 2. Во второй колонке приведены энергии состояний, локализованных под дном подзоны легких дырок, а в третьей — энергии резонансных состояний под дном подзоны тяжелых дырок. Энергии состояний отсчитываются от вершин соответствующих подзон. Следует помнить, что состояния под дном h-подзоны являются резонансными, и мы рассчитали энергетическое положение резонансных уровней. При учете взаимодействия подзон локализованные в нашем приближении состояния лежат на фоне сплошного спектра l-подзоны и следует ввести взаимодействие этих состояний с состояниями сплошного спектра, т.е. возможность распада. Локальные состояния становятся

квазилокальными. Кроме того, имеется взаимодействие с локализованными состояниями в запрещенной зоне, что приводит к сдвигу положения резонансных уровней. На рис. 2 приведена зависимость положения локализованных и резонансных состояний от давления.

С учетом спина каждое состояние характеризуется проекцией полного момента (орбитального и внутреннего: $M = L_z + J_z$) на ось z. У дырки в l-подзоне проекция внутреннего момента на ось z равна $\pm 1/2$, а в h-подзоне $\pm 3/2$, и найденным уровням энергии в такой классификации соответствуют следующие состояния:

l-подзона	h-подзона
1s → M = ±1/2,	1s → M = ±3/2,
2p _{±1} → M = ±1/2, ±3/2,	2p _{±1} → M = ±1/2, ±5/2,
2s → M = ±1/2,	2s → M = ±3/2,
2p ₀ → M = ±1/2,	2p ₀ → M = ±3/2.

Четырехкратное вырождение по величине проекции полного момента на ось z, соответствующее уровню 2p_{±1}, снимается при учете взаимодействия между h- и l-подзонами.

Таким образом, в работе произведен простой расчет, который дает нам информацию о положении резонансных и локализованных уровней в односно-деформированном Ge в пределе больших деформаций.

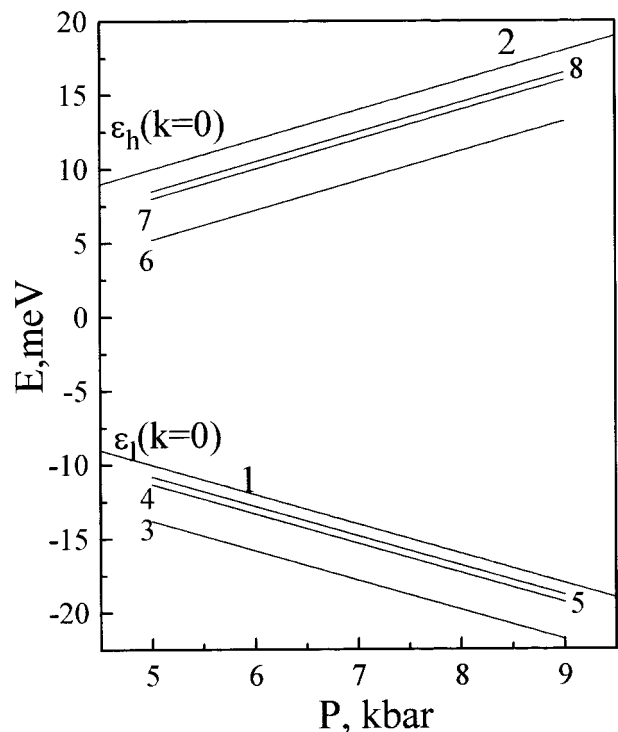


Рис. 2. Зависимость положения уровней мелкой акцепторной примеси в односно-сжатом германии от давления: положения вершин подзон легких (1) и тяжелых (2) дырок; серия локализованных состояний (3 — 1s, 4 — 2p₁, 5 — 2p₀); серия резонансных состояний (6 — 1s_{res}, 7 — 2p_{0res}, 8 — 2s_{res}). За начало отсчета энергии принято положение вершины валентной зоны в ненапряженном полупроводнике.

Ввиду отсутствия расчетных данных по положению резонансных уровней, расчет даже в таком приближении может быть полезен для анализа экспериментальных данных по спектрам мелкой акцепторной примеси в деформированных полупроводниках.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ № 97-02-16820 и № 96-15-96392 и гранта Министерства науки (072) 97-1055.

Список литературы

- [1] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, В.П. Синис, Ф.А. Смирнов. *ЖЭТФ*, **74**, 404 (1992).
- [2] М.А. Одноблюдов, В.А. Чистяков, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **31**, 1180 (1997).
- [3] R. Vuczko. *Nuovo Cimento*, **9D**, 669 (1987).
- [4] J.M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.*, **97**, 869 (1955).
- [5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [6] J.M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.*, **98**, 915 (1955).

Редактор В.В. Чалдышев

Calculation of shallow acceptor energy levels in uniaxially strained germanium

М.А. Odnoblyudov, V.M. Chistyakov

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The energy positions of resonant and localized states of shallow acceptor impurities in uniaxially strained Ge are calculated by variational method in the high stress limit. The dependences of these levels on an applied stress are plotted.