

Квазилокальные примесные состояния в одноосно-сжатом *p*-Ge

© А.А. Абрамов, В.Н. Тулупенко[†], Д.А. Фирсов*

Донбасская государственная машиностроительная академия,
84913 Краматорск, Украина

* Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 28 апреля 2000 г. Принята к печати 21 июня 2000 г.)

Теоретически исследованы основные характеристики квазилокальных состояний, возникающих на мелком примесном центре (с экранированным кулоновским потенциалом) в одноосно-сжатом *p*-Ge. Вычислены зависимости положения и ширины квазилокальных примесных состояний от величины давления. Результаты численных расчетов представлены для примеси Ga.

Интерес к исследованию эффектов в одноосно-сжатом дырочном Ge вызван, прежде всего, обнаружением стимулированного излучения при совпадающих [1] и скрещенных [2] направлениях приложенного электрического поля и одноосного давления (ОД). Аналогичные результаты наблюдались в наноструктурах Si/GeSi *p*-типа [3], которые можно рассматривать как одноосно-сжатые в направлении роста из-за несоответствия постоянных решеток Ge и Si. В работе [4] (см. также [2] и [5]) экспериментально показано, что такая генерация излучения обусловлена инверсной заселенностью дырок двух примесных уровней, появляющихся в результате снятия вырождения состояния мелкой акцепторной примеси одноосным давлением. Один из этих уровней при изменении величины давления X продолжает оставаться в запрещенной зоне, другой, при определенном X , попадает в непрерывный спектр и становится, таким образом, квазилокальным. Этот уровень частично заполняется дырками в результате резонансного рассеяния [6], тогда как уровень в запрещенной зоне опустошается в электрическом поле вследствие пробоя. Такая ситуация может привести к внутрицентральной инверсной заселенности дырок и, как следствие, к генерации излучения. Таким образом, для теоретического описания механизма инверсии должны быть известны основные характеристики квазилокальных примесных состояний (КПС) — положение по шкале энергий, уширение уровней и волновые функции — в зависимости от давления. Однако эта задача фактически до сих пор остается нерешенной. Например, положения и волновые функции примесных уровней для кулоновского потенциала могут быть рассчитаны в пределе малых или больших давлений [6,7], причем используемая при этом методика расчета не предполагает явной зависимости рассчитываемых величин от давления. Аналитические зависимости характеристик КПС от давления удалось получить в работах [8,9] в рамках модели потенциала нулевого радиуса (ПНР). Но, как показано в [9], модель ПНР соответствует решениям для кулоновского потенциала при относительно небольших давлениях, соответствующих расщеплению валентных подзон в точке $p = 0$ импульсного пространства $\Delta \leq 20$ мэВ. В то же время

большое количество экспериментальных результатов по исследованию одноосно-деформированного *p*-Ge получено для области давлений, соответствующих значениям Δ вплоть до 60 мэВ. Описать их, как указывалось выше, не представляется возможным из-за отсутствия аналитических зависимостей изменения основных характеристик КПС с давлением, полученных для кулоновского потенциала. Настоящая работа является одной из первых попыток решения данной задачи.

Расчет основных характеристик кулоновских примесных состояний

Рассмотрим уравнение Шредингера, описывающее дырочные состояния на примесном центре:

$$(H_p - E)\Psi_p^i = - \sum_{p'} U_{pp'} \Psi_{p'}^i, \quad (1)$$

где H_p — гамильтониан Латтинжера, E — энергия связи КПС, 4-разрядный столбец Ψ_p^i описывает примесные состояния, $U_{pp'}$ — матричный элемент примесного потенциала в импульсном представлении. Для экранированного кулоновского потенциала

$$U_{pp'} = \frac{\gamma}{V} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2 + p_0^2},$$

$\gamma = e^2 \hbar^2 / (\chi \chi_0)$, V — нормировочный объем, $p_0 = \hbar / r_0$, e — заряд электрона, χ — диэлектрическая проницаемость, χ_0 — электрическая постоянная, r_0 — радиус экранирования Дебая. Используя функцию Грина $g_\varepsilon(p)$ для свободных дырок ($U_{pp'} \equiv 0$) [9,10], уравнение (1) можно записать в виде

$$\Psi_p = - \frac{\gamma}{V} g_\varepsilon(\mathbf{p}) \sum_{p'} \frac{\Psi_{p'}}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2 + p_0^2}, \quad (2)$$

где $\varepsilon = E + i0$. В модели ПНР $p_0 = p_a \approx \hbar / r_a$ (r_a — постоянная кристаллической решетки) фактически совпадает с максимально возможными значениями p и p' и, учитывая $\Psi_p \propto g_\varepsilon(p) \propto p^{-2}$, знаменатель под знаком суммы можно считать не зависящим от p и p' и заменить

[†] E-mail: tvn@laser.donetsk.ua

некоторым постоянным значением. Решение (2) в этом случае дается выражением $\Psi_{\mathbf{p}} = g_{\varepsilon}(\mathbf{p})N$ [9,10], где N — постоянная, представляющая собой 4-разрядный столбец. Для экранированного кулоновского потенциала $p_0 \ll p_a$, и найти решения (2) в общем виде достаточно сложно. Однако, используя тот факт, что положения КПС, рассчитанные в модели ПНР, удовлетворительно совпадают с решениями для кулоновского потенциала (при $\Delta < 20$ мэВ), выберем волновую функцию модели ПНР в качестве нулевого приближения в (2). Для дальнейшего проведения суммирования положим

$$g_{\varepsilon}(p) \approx 1/(\varepsilon_{-p} - E) + 1/(\varepsilon_{+p} - E)$$

и

$$\varepsilon_{\pm p} = \pm \Delta/2 + p^2/(2m_{\pm}^*),$$

где ε_{+p} и ε_{-p} — энергии расщепленных давлением валентных подзон, m_{\pm}^* — усредненная по направлениям эффективная масса дырки в подзонах ε_{\pm} . Обозначим $(p^*)^2 = 2(\Delta/2 + E)m_{-}$. Анализ выражения, получающегося в результате подстановки указанных приближений в (2), показывает, что при $p > 2|p^*|$ значение суммы в (2) не зависит от p , а при $0 < p < 2|p^*|$ результат суммирования представляет собой немонотонную функцию p , максимальные значения которой превышают значение при $p = 2|p^*|$ приблизительно в 2 раза (см. вставку к рис. 1). Таким образом, зависимость суммы в выражении (2) от p при $p > 2|p^*|$ можно пренебречь и заменить p под знаком суммы некоторым постоянным значением, после чего знаменатель будет представлять собой квадратичную функцию относительно p' . Аппроксимировав ее выражением $[\alpha(p')^2 + 1]\beta$, где α и β — параметры задачи, перепишем уравнение (2) для значений $p > 2|p^*|$:

$$\Psi_{\mathbf{p}} = -\frac{\gamma\beta}{V}g_{\varepsilon}(\mathbf{p}) \sum_{\mathbf{p}'} \frac{\Psi_{\mathbf{p}'}}{\alpha(p')^2 + 1}. \quad (3)$$

Полагая (3) справедливым для описания КПС во всей области значений p , получим

$$[1 + \lambda(E)] \sum_{\mathbf{p}'} \frac{\Psi_{\mathbf{p}'}}{\alpha p^2 + 1} = 0, \quad (4)$$

$$\lambda(E) = \frac{\gamma\beta}{V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{g_{\varepsilon}(\mathbf{p})}{\alpha p^2 + 1}.$$

Определяемая соотношением (4) матрица λ оказывается диагональной, и энергия E и ширина Γ вырожденных по спину КПС находятся из уравнения

$$1 + \lambda_{+}(E) = 0, \quad (5)$$

где диагональные элементы $\lambda_{\pm}(\varepsilon)$ матрицы $\lambda(\varepsilon)$ имеют вид

$$\lambda_{\pm}(\varepsilon) = \frac{\gamma\beta}{V} \times \sum_{\mathbf{p}} \frac{\gamma_1 p^2 / 2m \pm P_2(p_z/p) \gamma p^2 / m \pm \Delta/2 - \varepsilon}{(\varepsilon_{+p} - \varepsilon)(\varepsilon_{-p} - \varepsilon)(\alpha p^2 + 1)}. \quad (6)$$

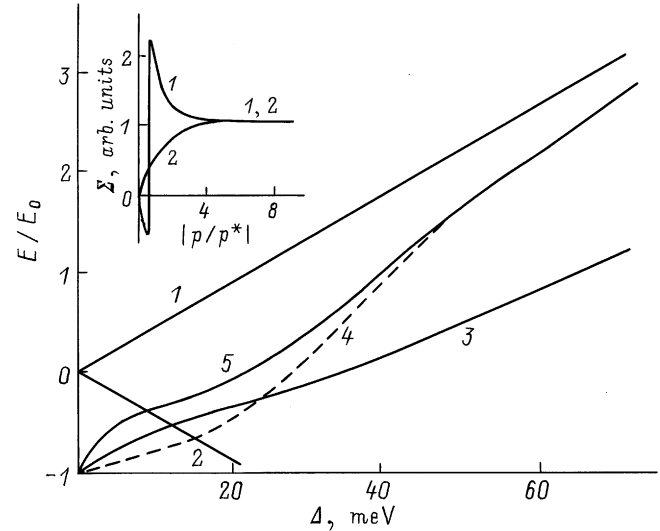


Рис. 1. Положение экстремумов валентных подзон ($1 - \varepsilon_{+p}$, $2 - \varepsilon_{-p}$) и примесного уровня E (3 — модель ПНР, 4 — кулоновский потенциал, 5 — расчет по формулам (5)–(6)) в зависимости от расщепления вершины валентной зоны Δ . На вставке — зависимость суммы в выражении (2) от величины $|p/p^*|$: 1 — уровень E в непрерывном спектре, 2 — уровень E в запрещенной зоне.

В (6) $\gamma_1, \gamma \cong \gamma_{2,3}$ — параметры Латтинжера, m — масса свободного электрона, $P_2(p_z/p) = P_2(x) = 3(3x^2 - 1)/2$. При $p = 0$ величина расщепления вершины валентной зоны $\Delta = \mu X$, где $\mu = 4$ мэВ/кбар и $\mu = 6$ мэВ/кбар для направлений давления вдоль кристаллографических осей [111] и [001] соответственно. Ось z совпадает с направлением давления. Законы дисперсии расщепленных давлением валентных подзон $\varepsilon_{\pm p}$ имеют вид

$$\varepsilon_{\pm p} = \frac{\gamma_1 p^2}{2m} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma p^2}{m}\right)^2 - \frac{\gamma p^2}{m} \Delta P_2\left(\frac{p_z}{p}\right) + \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2}. \quad (7)$$

Методика решения уравнения (5) изложена в работе [9]. Уравнение $1 + \lambda_{-}(\varepsilon) = 0$ определяет положения нижнего по энергии локализованного примесного уровня и здесь не рассматривается.

Используя известные положения КПС для примеси Ga в Ge: $E_0 = -11.5$ мэВ при $\Delta = 0$ и $E_1 \simeq 4.8$ мэВ при $\Delta \approx 50$ мэВ [6], можно вычислить параметры α и β . В итоге для α было получено значение $\alpha = 0.25 \gamma/m_0 E_0$. Величина β не вычислялась, так как она в конечных формулах не участвует. При $\alpha = 0$ уравнение (5) соответствует модели ПНР.

Обсуждение результатов расчета

Рассчитанные положения уровня КПС в зависимости от величины Δ приведены на рис. 1. Там же показаны: зависимость (кривая 3), получающаяся в модели ПНР (расчет по (5) при $\alpha = 0$), и зависимость для кулоновского потенциала (кривая 4), полученная плавным

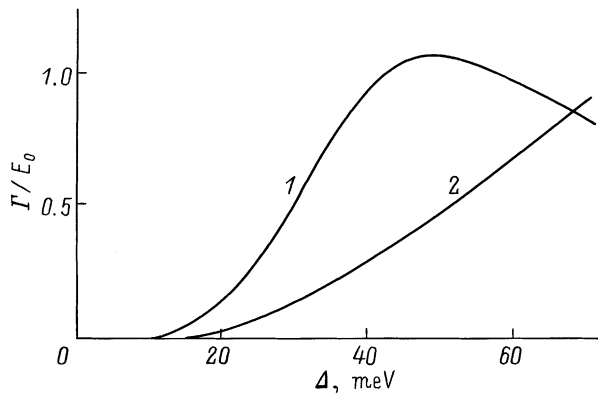


Рис. 2. Зависимости уширения Γ уровня E от величины расщепления валентных подзон Δ , рассчитанные по формулам (5)–(6): 1 — $\alpha = 0.25 \gamma / m_0 E_0$, 2 — $\alpha = 0$ (модель ПНР).

соединением трех точек, соответствующих: 1) глубине залегания уровня при $\Delta = 0$; 2) моменту вхождения в сплошной спектр — $\Delta \approx 16$ мэВ [9]; 3) положению КПС при $\Delta \approx 50$ мэВ [6]. Вторая “точка” достаточно условна, так как расщепление примесного уровня при деформации определено для случая $\Delta \ll E$ [7], причем даже в этом случае трудно оценить точность полученных оценок из-за их сильной зависимости от вида выбранных пробных волновых функций. Отметим хорошее качественное соответствие полученного результата (кривая 5 на рис. 1) случаю примесного центра с кулоновским взаимодействием (штриховая кривая 4) в пределе больших давлений (расщеплений Δ): глубина залегания КПС под дном подзоны ε_{+p} выходит на полку [6]. Расхождение кривых 4 и 5 в области $0 \leq \Delta \leq 50$ мэВ связано с приблизительным характером построения кривой 4 (см. также замечание выше о второй точке), а также с распространением решения (3), полученного для $p > 2|p^*|$, на область значений p от 0 до $2|p^*|$. Тем не менее рассчитанная кривая качественно и полуколичественно описывает энергетическое положение КПС в зависимости от величины Δ . Рассчитанная ширина КПС (рис. 2) принципиально отличается от результата, получаемого в модели ПНР, — она проходит через максимум и затем уменьшается, что может свидетельствовать о стремлении КПС к локализации с ростом давления. Последнее физически понятно, поскольку с увеличением расщепления уровней (давления) увеличивается энергетическое расстояние между КПС и нижней валентной подзоной ε_{-p} и вклад этой подзоны в формирование КПС уменьшается пропорционально $1/(\varepsilon_{+p} - E)$.

Определяемая (3) волновая функция КПС может быть использована при теоретическом исследовании различного рода кинетических и оптических эффектов при одноосных деформациях.

Работа поддержана Министерством образования и науки и Фондом фундаментальных исследований Украины, грант 2.4/970.

Список литературы

- [1] И.В. Алтухов, М.С. Каган, В.П. Синис. Письма ЖЭТФ, **47**, 133 (1988).
- [2] В.М. Бондарь, Л.Е. Воробьев, А.Т. Далакян, В.Н. Тулупенко, Д.А. Фирсов. Письма ЖЭТФ, **70**, 257 (1999).
- [3] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, В.П. Синис, Ш.Дж. Томас, К.Л. Ванг. В сб.: *Материалы совещания “Нанопотоника”* (Н. Новгород, ИФМ РАН, 1999) с. 56.
- [4] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, В.П. Синис. Письма ЖЭТФ, **59**, 455 (1994).
- [5] А.Т. Далакян, В.Н. Тулупенко, Д.А. Фирсов, В.М. Бондарь. Письма ЖЭТФ, **69**, 638 (1999).
- [6] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, М.А. Одноблюдов, В.П. Синис, Е.Г. Чиркова, И.Н. Ясисевич. ЖЭТФ, **115**, 89 (1999).
- [7] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [8] Е.В. Баханова, Ф.Т. Васько. ФТТ, **32**, 86 (1990).
- [9] М.А. Одноблюдов, А.А. Пахомов, В.М. Чистяков, И.Н. Ясисевич. ФТП, **31**, 1180 (1997).
- [10] А.А. Абрамов, Ф.Т. Васько, В.Н. Тулупенко, Д.А. Фирсов. ФТП, **33**, 691 (1999).

Редактор Т.А. Полянская

Quasi-local impurity states in an uniaxially stressed p -Ge

A.A. Abramov, V.N. Tulupenko, D.A. Firsov*

Donbass State Engineering Academy,
84913 Kramatorsk, Ukraine

*St. Petersburg State Technical University,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract Basic characteristics of quasi-local states on shallow impurity centres (with screened Coulomb potential) in an uniaxially stressed p -Ge have been studied theoretically. Positions and broadening of quasi-local impurity states against pressure are calculated. Results of calculations are presented for Ga impurity.