Константы деформационного потенциала глубокого примесного центра в полупроводниках с анизотропной валентной зоной

© Е.Б. Осипов, Н.А. Осипова, М.Е. Мокина, С.Н. Цветкова, С.Д. Канглиев

Череповецкий государственный университет,
162600 Череповец, Россия

(Получена 22 ноября 2006 г. Принята к печати 24 ноября 2006 г.)

Изучено влияние деформации на состояние примесных центров с глубоким Γ_8-уровнем. К анализу расщепления уровней применяется модель короткодействующего потенциала примесного центра. Получены константы деформационного потенциала примесного центра как функции зонных констант и энергия глубокого уровня в случае сферического и несферического приближений для структуры валентной зоны. Численные расчеты констант деформационного потенциала выполнены для глубокого центра в GaAs и Ge.

PACS: 71.55.-i, 71.20.Mq, 71.20.Nr, 81.40.Rs

Расщепление уровней основного состояния мелких акцепторов, имеющих симметрию вершины валентной зоны Γ_8 при действии малой внешней деформации, описывается тремя константами деформационного потенциала a_T, b_T, d_T, причем константа изотропной деформации a_T совпадает с зонной, а b_T и d_T могут быть рассчитаны в приближении эффективного гамильтониана [1].

Влияние внешней деформации, затрагивающей протяженную часть волновой функции глубоких примесных состояний, представляется более адекватным рассчитывать в модели короткодействующего потенциала, в которой был выполнен расчет констант деформационного потенциала центра в сферическом приближении [2].

Расчет констант деформационного потенциала и g-фактора примесных уровней в сферическом приближении в различных полупроводниках был выполнен в работе [3]. В [4] экспериментально определялись константы деформационного потенциала объемной деформации. Данная работа посвящена анализу деформационных характеристик глубоких примесных уровней с учетом гофрировки валентной зоны в полупроводниках с сильным спин-орбитальным расщеплением ($\Delta \to \infty$).

Используем разложение волновой функции примесного уровня по блоховским функциям идеального кристалла [2]:

$$\Psi^E_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}(r) = \sum_k \frac{A_0}{N}\left[\frac{\Psi_{l1k}(r)}{E-E_{lk}}(q_5+iq_6) + \frac{\Psi_{l2k}(r)}{E-E_{lk}}(q_3+iq_4) + \frac{\Psi_{h1k}(r)}{E-E_{hk}}(q_2+E_0)\right],$$

$$\Psi^E_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}(r) = \sum_k \frac{A_0}{N}\left[\frac{\Psi_{l1k}}{E-E_{lk}}(-q_2-E_0) + \frac{\Psi_{h1k}(r)}{E-E_{hk}}(q_5-iq_6) + \frac{\Psi_{h2k}(r)}{E-E_{hk}}(q_3+iq_4)\right], \quad (1)$$

$$\Psi^E_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}(r) = \sum_k \frac{A_0}{N}\left[\frac{\Psi_{l2k}(r)}{E-E_{lk}}(-q_2-E_0) + \frac{\Psi_{h1k}(r)}{E-E_{hk}}(q_3-iq_4) + \frac{\Psi_{h2k}(r)}{E-E_{hk}}(-q_5-iq_6)\right],$$

$$\Psi^E_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}(r) = \sum_k \frac{A_0}{N}\left[\frac{\Psi_{l1k}(r)}{E-E_{lk}}(q_3-iq_4) + \frac{\Psi_{l2k}(r)}{E-E_{lk}}(-q_5+iq_6) + \frac{\Psi_{h2k}(r)}{E-E_{hk}}(q_2+E_0)\right].$$

Здесь $\Psi_{n\mu k}$ — волновые функции дырок в n-й зоне ($n=l$ — зона легких дырок, $n=h$ — зона тяжелых дырок, μ нумерует вырожденные состояния в зоне); E_{nk} — энергетический спектр в n-зоне ($E_{lk}=(q_1-E_0)\hbar^2/2m_0$, $E_{hk}=(q_1+E_0)\hbar^2/2m_0$); $q_1=Ak^2$, $q_2=B\left[k_z^2-\frac{1}{2}(k_x^2+k_y^2)\right]$, $q_3=B\frac{\sqrt{3}}{2}(k_x^2-k_y^2)$, $q_4=Dk_xk_y$, $q_5=Dk_xk_z$, $q_6=Dk_yk_z$; A, B, D — зонные константы; E — энергия примесного уровня, $E_0=\sqrt{q_2^2+q_3^2+q_4^2+q_5^2+q_6^2}$, $N=\sqrt{2E_0(E_0+q_2)}$, A_0 — нормировочный коэффициент. Волновые функции дырок в зонах являются разложением по базисным функциям $\Psi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$, $\Psi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$, $\Psi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}$, $\Psi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}$, характеризующим состояние дырки при $k=0$ с полным моментом импульса $j=3/2$.

Разложение волновой функции примесного уровня по блоховским функциям идеального кристалла позволяет выразить константы деформационного потенциала b_T и d_T, описывающие расщепления примесного уровня, через зонные константы. Для этого необходимо вычислить матричные элементы оператора взаимодействия с деформацией для примесного центра $\hat{H}^{\varepsilon}_{ij}$.

Были рассчитаны матричные элементы $\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$, $\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ и $\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$:

$$\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} = \sum_k \frac{A_0^2}{2E_0^2}\left[\frac{(E_0-q_2)(E_0q_1'-Q)}{(E-E_{lk})^2} + 2\,\frac{(E_0^2q_2'-Qq_2)}{(E-E_{lk})(E-E_{hk})} + \frac{(E_0+q_2)(E_0q_1'+Q)}{(E-E_{hk})^2}\right],$$

$$\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \sum_k \frac{A_0^2}{2E_0^2}\left[\frac{(E_0+q_2)(E_0q_1'-Q)}{(E-E_{lk})^2} - 2\,\frac{(E_0^2q_2'-Qq_2)}{(E-E_{lk})(E-E_{hk})} + \frac{(E_0-q_2)(E_0q_1'+Q)}{(E-E_{hk})^2}\right], \quad (2)$$

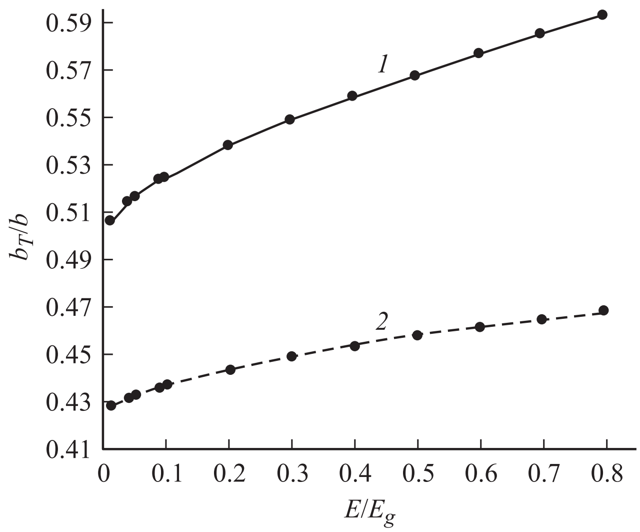

Рис. 1. Зависимость b_T/b от E/E_g для GaAs (*1*) и Ge (*2*).

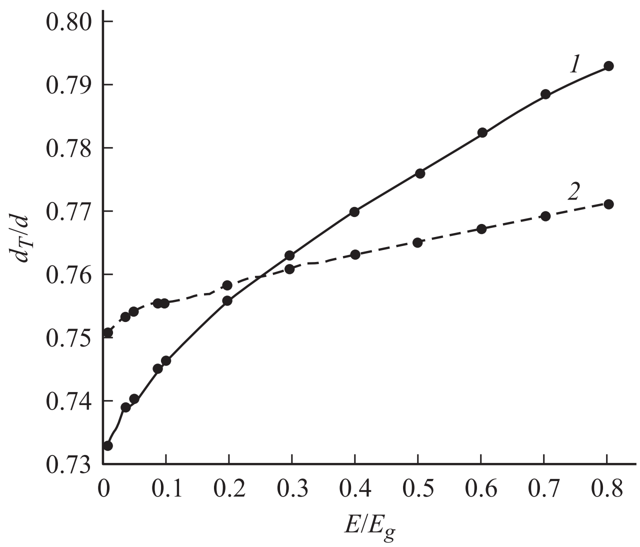

Рис. 2. Зависимость d_T/d от E/E_g для GaAs (*1*) и Ge (*2*).

$$\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} = \sum_k \frac{A_0^2}{2E_0^2}\left[\frac{(q_5 - iq_6)(E_0 q_1' + Q)}{(E - E_{hk})^2}\right.$$

$$\left. + 2\,\frac{E_0^2(q_5' - iq_6') - Q(q_5 - iq_6)}{(E - E_{lk})(E - E_{hk})} - \frac{(q_5 - iq_6)(E_0 q_1' - Q)}{(E - E_{lk})^2}\right].$$

Здесь $q_2' = b\,[\varepsilon_{zz} - (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})/2] = b\varepsilon_1$, $q_3' = b\sqrt{3} \times (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})/2$, $q_4' = d\varepsilon_{xy}$, $q_5' = d\varepsilon_{xz}$, $q_6' = d\varepsilon_{yz}$ — компоненты оператора деформации кристалла; b и d — константы деформационного потенциала кристалла; $Q = q_2 q_2' + q_3 q_3' + q_4 q_4' + q_5 q_5' + q_6 q_6'$. Отношения b_T/b и d_T/d определяются исходя из соотношений

$$\hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} - \hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = 2b_T\varepsilon_1 \quad \text{и} \quad \hat{H}^{\varepsilon}_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} + \hat{H}^{\varepsilon *}_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} = 2d_T\varepsilon_{xz}. \tag{3}$$

Непосредственный расчет в сферическом приближении для матричных элементов оператора одноосной деформации ($\mathbf{p} \parallel [100]$ и $\mathbf{p} \parallel [111]$), вычисленных на примесных функциях, позволяет выразить отношения b_T/b и d_T/d через эффективные массы m_l и m_h легких и тяжелых дырок в валентной зоне в следующем виде:

$$\frac{b_T}{b} = \frac{d_T}{d} = \frac{1}{5}\,\frac{m_l^{3/2} + m_h^{3/2} + 16m_l m_h/(\sqrt{m_l} + \sqrt{m_h})}{m_l^{3/2} + m_h^{3/2}}. \tag{4}$$

Оценка b_T/b и d_T/d для GaAs дает $b_T/b = d_T/d = 0.61$, т.е. в сферическом приближении для валентной зоны отношения констант примесного центра к зонным, описывающим расщепление уровней при одноосной деформации вдоль направлений [100] и [111], равны.

Рассчитаны отношения констант деформационного потенциала примесного центра b_T и d_T к зонным константам деформационного потенциала кристалла b и d в случае несферического приближения:

$$\frac{b_T}{b} = \sum_k \frac{A_0^2}{2E_0^2}\left[\frac{q_2^2}{(E - E_{lk})^2}\right.$$

$$\left. + 2\frac{E_0^2 - q_2^2}{(E - E_{lk})(E - E_{hk})} + \frac{q_2^2}{(E - E_{hk})^2}\right], \tag{5}$$

$$\frac{d_T}{d} = \sum_k \frac{A_0^2}{2E_0^2}\left[\frac{q_5(q_4 + q_5 + q_6)}{(E - E_{lk})^2}\right.$$

$$\left. + 2\,\frac{E_0^2 - q_5(q_4 + q_5 + q_6)}{(E - E_{lk})(E - E_{hk})} + \frac{q_5(q_4 + q_5 + q_6)}{(E - E_{hk})^2}\right]. \tag{6}$$

Данные выражения проинтегрированы в $\mathbf{k}$-пространстве в пределах первой зоны Бриллюэна. По полученным результатам построены зависимости величин b_T/b, d_T/d от отношения энергии примесного центра E к ширине запрещенной зоны E_g (рис. 1, 2).

Учет несферичности зон, выполненный в приближении $\Delta \to \infty$ для параметров Ge для $E = 0.07$ эВ, дает $b_T/b = 0.433$, $d_T/d = 0.753$, для $E = 0.15$ эВ $b_T/b = 0.437$, $d_T/d = 0.755$; для GaAs, для тех же значений энергии соответственно $b_T/b = 0.515$, $d_T/d = 0.74$ и $b_T/b = 0.524$, $d_T/d = 0.746$, что совпадает с экспериментальными данными [5].

Список литературы

[1] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
[2] И.В. Костин, Е.Б. Осипов, Н.А. Осипова. ФТП, **27**, 1743 (1993).
[3] А.В. Малышев, И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТТ, **40**, 1002 (1998).
[4] М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габибов. ФТТ, **46**, 1766 (2004).
[5] Н.С. Аверкиев, З.А. Адамия, Д.И. Аладашвили, Т.К. Аширов, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, В.Е. Седов. ФТП, **21**, 421 (1987).

Редактор Л.В. Шаронова

The deformation potential constants of deep impurity centre in semiconductors with anisotropic valence band

E.B. Osipov, N.A. Osipova, M.E. Mokina, S.N. Tsvetkova, S.D. Kangliev

Cherepovets State University,
162600 Cherepovets, Russia

Abstract The influence of deformation on the ground state of impurity centre with deep Γ_8 level has been considered. The model of short range potential of impurity centre was applied to analysis of level splitting. The impurity centre deformation potential constants have been obtained as functions of the band constants and the deep level energy in the cases of spherical and non-spherical approximations to valence band structure. Numerical calculations of deformation potential constants were done for deep centre in GaAs and Ge.