

## КОНСТАНТЫ ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА ГЛУБОКИХ АКЦЕПТОРОВ В МОДЕЛИ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩЕГО ПОТЕНЦИАЛА ЦЕНТРА

И. В. Костин, Е. Б. Осипов, Н. А. Осипова

Череповецкий государственный педагогический институт им. А. В. Луначарского, Череповец, Россия

(Получена 5 апреля 1993 г. Принята к печати 25 мая 1993 г.)

Константы деформационного потенциала, определяющие расщепление вырожденных уровней глубоких акцепторов в условиях внешней деформации, рассчитаны в приближении короткодействующего потенциала центра. Использование разложения волновой функции примесного уровня по блоховским функциям идеального кристалла позволяет выразить примесные константы деформационного потенциала через зонные и через параметры зонной структуры (эффективные массы). Выполнены оценки для полупроводников с предельно малым ( $\Delta = 0$ ) и большим спин-орбитальным расщеплением валентной зоны.

Константа изотропной деформации  $a_T$  для глубоких уровней отличается от зонной. При учете вклада в волновую функцию примесного уровня состояний валентной зоны и подмешивания состояний зоны проводимости отношение  $a_T/a_V < 1$  зависит от параметров зонной структуры и уменьшается по мере углубления уровня в запрещенную зону. Сопоставление с известными значениями констант  $CuGa$ ,  $AgGa$ ,  $AuGa$  в GaAs показало подтверждение этой закономерности.

Расщепление уровней основного состояния мелких акцепторов, имеющих симметрию вершины валентной зоны ( $\Gamma_8$ ) при действии малой внешней деформации, описывается тремя константами деформационного потенциала  $a_T$ ,  $b_T$ ,  $d_T$  [<sup>1</sup>]. Причем константа изотропной деформации  $a_T$  совпадает с зонной, а  $b_T$  и  $d_T$  рассчитываются в приближении эффективного гамильтониана [<sup>1</sup>] с использованием вариационных огибающих волновых функций.

Потенциал глубоких примесных центров резко отличается от кулоновского, характеризуясь мощной сердцевиной, которая формирует не водородоподобный характер поведения волновой функции, а приближающийся к модели потенциала нулевого радиуса. Это подтверждается оптическими измерениями спектральной зависимости сечения фотоионизации [<sup>2, 3</sup>]. Поэтому влияние внешней деформации, затрагивающей протяженную часть волновой функции глубоких примесных состояний, представляется более адекватным рассчитывать в модели короткодействующего потенциала [<sup>3, 4</sup>] с учетом (в необходимых случаях) подмешивания других зон, нежели в кулоновской модели.

Рассмотрим вначале глубокие акцепторы, основной уровень которых имеет симметрию вершины валентной зоны [<sup>3</sup>], в предельных случаях слабого ( $\Delta = 0$ ) и сильного ( $\Delta \rightarrow \infty$ ) спин-орбитального расщепления валентной зоны.

Разложение волновой функции примесного уровня по блоховским функциям идеального кристалла имеет вид

$$\Psi_E^m = \sum_{\mu, n, k} \frac{\Psi_{\mu nk}(r)}{E - E_{nk}} \int \Psi_{\mu nk}^*(r') V(r') \Psi_E^m(r') dr', \quad (1)$$

где  $V(r')$  — потенциал центра,  $\Psi_{\mu nk}$  и  $E_{nk}$  — волновые функции и энергетический спектр в  $n$ -й зоне,  $m$  и  $\mu$  нумеруют вырожденные состояния на центре и в зоне.

Считая потенциал центра короткодействующим и сферически симметричным и обозначая не зависящие от  $k$  отличные от нуля интегралы в (1) через постоянную  $A$  (определяемую условием нормировки), получим коэффициенты разложения  $\Psi_E$  по блоховским функциям в явном виде. Блоховские функции записываются в виде разложения по базисным, соответствующим вершине валентной зоны. Внешняя деформация расщепляет вырожденные состояния центра и смещает их. Считая известными, например из эксперимента, константы, описывающие расщепление исходных базисных состояний экстремума валентной зоны, можно получить выражения для расщепления произвольных  $k$ -состояний в валентных подзонах [1]. А так как волновая функция примесного уровня (1) формируется именно этими состояниями, то соответственно можно выразить и константы, описывающие расщепления примесных состояний через исходные  $a, b, d$ .

В сферическом приближении для валентной зоны со слабым спин-орбитальным расщеплением  $\Delta = 0$  для матричных элементов оператора одноосной деформации ( $p \parallel z$ ), вычисленных на примесных функциях, получим

$$\begin{aligned} \langle X | \hat{H}(\epsilon) | X \rangle &= \langle Y | \hat{H}(\epsilon) | Y \rangle = -\frac{1}{2} \langle Z | \hat{H}(\epsilon) | Z \rangle = \\ &= b_T \epsilon_1 = b \epsilon_1 |A|^2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[ \frac{k^2 - k_x^2}{k^2 (E - E_1(\mathbf{k}))} + \frac{k_x^2}{k^2 (E - E_2(\mathbf{k}))} \right]^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{k_z^2 (k_x^2 + k_y^2)}{k^4} \left[ \frac{1}{E - E_1(\mathbf{k})} - \frac{1}{E - E_2(\mathbf{k})} \right]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $E_1(\mathbf{k})$  и  $E_2(\mathbf{k})$  — энергетический спектр в двухкратно и однократно вырожденной валентных подзонах,  $\epsilon_1 = \epsilon_{zz} - \epsilon_{xx}$  — относительная деформация вдоль оси  $z$ . Непосредственный расчет позволяет выразить отношение  $b_T/b$  через эффективные массы  $m_1$  и  $m_2$  дырок в валентной зоне

$$\frac{b_T}{b} = \frac{1}{5} \frac{7m_1^{3/2} + 2m_2^{3/2} + 12 \frac{m_1 m_2}{\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2}}}{2m_1^{3/2} + m_2^{3/2}}. \quad (3)$$

В предельном случае  $m_1 \gg m_2$   $b_T/b \rightarrow 0.7$ , при  $m_1 = m_2$   $b_T/b = 1$ , что и следует ожидать для уровня, формируемого зонами с одинаковыми эффективными массами. Оценка отношения  $b_T/b$  для Si дает значения 0.80 для  $m_1 = m_j$ ,  $m_2 = m_h$  и 0.88 для  $m_1 = m_h$ ,  $m_2 = m_j$ , которые несколько выше полученных для мелкого кулоновского акцептора [1]  $b_T/b = 0.73$  и 0.84.

Для полупроводников с большим спин-орбитальным расщеплением валентной зоны  $\Delta$  имеем

$$\frac{b_T}{b} = \frac{1}{5} \frac{\int_0^{\infty} k^2 dk \left\{ \frac{1}{(E - E_1)^2} + \frac{1}{(E - E_2)^2} + \frac{8}{(E - E_1)(E - E_2)} \right\}}{\int_0^{\infty} k^2 dk \left\{ \frac{1}{(E - E_1)^2} + \frac{1}{(E - E_2)^2} \right\}}. \quad (4)$$

При этом получим

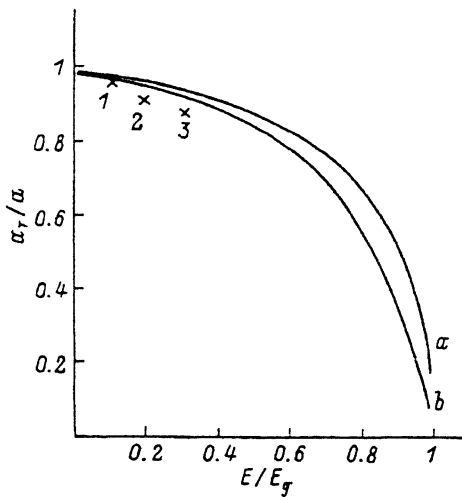


Рис. 1. Расчетная зависимость константы изотропной деформации  $a_T$  от энергии примесного уровня  $E$  для GaAs. Кривая  $a$  соответствует приближению  $\Delta = 0$ ,  $b$  — приближению  $\Delta \rightarrow \infty$ . Точки — экспериментальные данные: 1 — CuGa, 2 — AgGa, 3 — AuGa. Здесь  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $a$  — зонная константа.

$$\frac{b_T}{b} = \frac{1}{5} \frac{m_1^{3/2} + m_2^{3/2} + 16 \frac{m_1 m_2}{\sqrt{m_1} + \sqrt{m_2}}}{m_1^{3/2} + m_2^{3/2}}. \quad (5)$$

Оценка  $b_T/b$  для Ge дает  $b_T/b = 0.49$ . Для GaAs  $b_T/b = 0.57$ , что согласуется со значениями для мелкого акцептора  $b_T/b \sim 0.5 \div 0.6$  [5]. В сферическом приближении для валентной зоны отношения констант примесного центра к зонным, описывающим расщеплением уровней при  $p \parallel [100]$  и  $p \parallel [111]$ , равны, т. е.  $b_T/b = d_T/d$ . Учет несферичности зон, выполненный в приближении  $\Delta \rightarrow \infty$  для параметров Ge, дал результат  $b_T/b = 0.41$ ,  $d_T/d = 0.53$ . Для GaAs  $b_T/b = 0.52$ ,  $d_T/d = 0.57$ .

В приведенных расчетах константа  $a_T$ , описывающая сдвиг акцепторных уровней при изотропной деформации, равна зонной, так как не учитывался вклад в волновую функцию примесного уровня состояний других зон, в частности зоны проводимости. Этот вклад мал для уровней, близких к валентной зоне, однако, для глубоких уровней он становится заметным и должен приводить к отличию  $a_T$  от  $a$ , при этом и константы  $b_T$  и  $d_T$  зависят от положения уровня в запрещенной зоне. В данном случае для нахождения зонного спектра и коэффициентов разложения блоховских амплитуд по базисным использовалась модель Кейна, включающая в состав базисных функций не только состояния вершины валентной зоны, но и дна зоны проводимости. Ре-

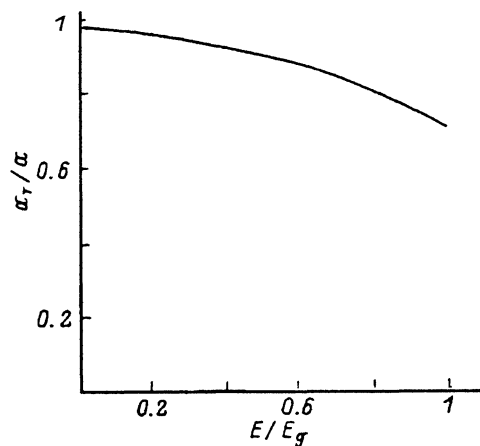


Рис. 2. Расчетная зависимость константы изотропной деформации  $a_T$  от энергии примесного уровня  $E$  для InSb в приближении  $\Delta \rightarrow \infty$ .

результаты расчета константы  $a_T/a$  в приближении  $\Delta = 0$  и  $\Delta \rightarrow \infty$  для полупроводников GaAs и InSb приведены на рис. 1, 2. Расчет показывает уменьшение константы  $a_T$  по мере углубления уровня в запрещенную зону, что подтверждается известными нам экспериментальными данными для глубоких акцепторов замещения  $\text{Cu}_{\text{Ga}}$ ,  $\text{Ag}_{\text{Ga}}$ ,  $\text{Au}_{\text{Ga}}$  в GaAs [6, 7].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, 584, М. (1972).
- [2] G. Lucovsky. Sol. St. Commun., 3, 299 (1965).
- [3] В. И. Перель, И. Н. Ясиевич. ЖЭТФ, 82, 237 (1982).
- [4] Е. В. Баханова. Тез. докл. 14-го Всес. (пекаровского) совещ. по теории полупроводников, 44 (1983).
- [5] R. N. Bhargava, M. I. Nathan. Phys. Rev., 161, 695 (1967).
- [6] Н. С. Аверкиев, З. А. Адамия, Д. И. Аладашвили, Т. К. Аширов, А. А. Гуткин, Е. Б. Осипов, Е. Б. Седов. ФТП, 21, 421 (1987).
- [7] M. E. Pistol, S. Nilsson, L. Samuelson. Phys. Rev. B, 38, 8293 (1988).

Редактор Т. А. Полянская

---