

# Резонансные акцепторные состояния в одноосно-деформированных полупроводниках

© М.А. Одноблюдов, А.А. Пахомов, В.М. Чистяков, И.Н. Ясиевич

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

(Получена 4 марта 1997 г. Принята к печати 15 апреля 1997 г.)

В рамках модели потенциала нулевого радиуса рассмотрены энергии связи и времена жизни резонансных состояний, возникающих в одноосно-деформированном полупроводнике. Результаты могут быть непосредственно использованы для  $A^+$ -состояний, а также для качественного анализа поведения основного состояния кулоновского акцептора в деформированном полупроводнике. Результаты численного расчета представлены для Ge и GeSi. Вычислены силы осцилляторов оптических переходов между резонансным и основным состояниями в деформированном германии.

## 1. Введение

В Ge, Si и в большинстве соединений  $A^{III}B^V$  вершине валентной зоны соответствует представление  $\Gamma_8^+$  или  $\Gamma_8$ . При деформации кристалла четырехкратное вырождение вершины валентной зоны снимается. Соответственно расщепляется и основное состояние акцептора, которое преобразуется по тому же представлению [1]. При определенной деформации один из уровней (двукратно вырожденный) попадает в сплошной спектр валентной зоны и становится квазистационарным (резонансным).

Создание лазера, излучающего в далекой инфракрасной области и работающего на внутрицентровых переходах мелкого акцептора в напряженном Ge [2,3], стимулировало интерес к расчету энергетического положения, волновых функций и времени жизни возникающих в этом случае резонансных состояний. В экспериментах по наблюдению лазерной генерации к одноосно-сжатому кристаллу Ge прикладывались импульсы электрического поля, длительностью от 0.2 до 1 мкс, которые опустошали основное состояние мелкого акцептора в запрещенной зоне и переводили дырки в валентную зону. При некотором давлении ( $P \approx 4$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [111]$ ,  $P \approx 3$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [001]$ ) наблюдалось резкое увеличение интенсивности люминесценции из образца. Наблюдаемое явление связывалось со стимулированными переходами дырок из инверсно-заселенного резонансного состояния, которое возникало в этом случае, в локализованные акцепторные состояния в запрещенной зоне. Стимулированное излучение наблюдалось в интервале давлений от  $P = 4$  кбар до  $P = 12$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [111]$  и от  $P = 3$  кбар до  $P = 8$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [001]$ , верхняя граница по  $P$  соответствует расщеплению вершины валентной зоны 48 мэВ. Для детального анализа эксперимента необходимо умение определять энергию связи и величину расщепления основного акцепторного состояния в этом диапазоне давлений.

К настоящему времени влияние деформации на мелкие акцепторные состояния рассматривалось только в двух предельных случаях [1]: 1) малые деформации, когда расщепление валентной зоны много меньше, чем энергия

связи акцепторного состояния в недеформированном материале, и возможно решение задачи по теории возмущений; 2) большие деформации, когда можно рассматривать каждую из расщепившихся подзон и связанные с ней уровни независимо. При этом вопрос о затухании резонансных состояний вообще не исследовался.

В данной работе мы рассматриваем проблему в рамках модели потенциала нулевого радиуса, когда в недеформированном кристалле существует только один четырехкратно вырожденный локализованный уровень. Эта модель позволяет нам получить аналитические выражения для волновых функций и простые уравнения для определения энергий и времени жизни расщепленных состояний во всем диапазоне давлений. Очевидно, что представленная модель не претендует на высокую точность в количественном описании акцепторных состояний в деформированном полупроводнике, так как потенциал нулевого радиуса есть довольно грубое приближение для реального кулоновского потенциала. Тем не менее, эта модель позволяет получить уравнение для определения времени жизни резонансных акцепторных состояний. Заметим, что эта задача не может быть решена другими существующими методами, например вариационным, поэтому для практического применения деформационно-расщепленных акцепторных состояний в лазерах, излучающих в далекой инфракрасной области, даже качественная информация о резонансных состояниях представляет большой интерес.

## 2. Теоретическая модель

Валентная зона в сферическом приближении и при приложении одноосной деформации описывается гамильтонианом Латтинжера  $4 \times 4$  [4]:

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

где

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

Здесь  $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$ , ось  $Z$  направлена вдоль оси деформации,  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  — параметры Латтинжера. Параметр  $\zeta$  связан с расщеплением вершины валентной зоны в деформированном материале соотношением:

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

где  $b$  — деформационный потенциал,  $X$  — приложенное давление. Для Ge  $b$  равно 6 мэВ/кбар при деформации вдоль оси [001] и при деформации вдоль оси [111] равно 4 мэВ/кбар [1]. При записи (1) была выбрана следующая система базисных блоховских функций:

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

Волновую функцию акцепторного состояния удобно характеризовать значением проекции полного момента на ось  $Z$ :  $M = \pm 1/2, \pm 3/2$ . Введем следующее обозначение для энергии состояний  $M = \pm 1/2, \pm 3/2$ :

$$E^M = \frac{\hbar^2 \alpha_M^2}{2m_0}. \quad (4)$$

В модели короткодействующего потенциала волновая функция акцептора имеет вид [5]

$$\Psi^M(\mathbf{r}) = \frac{A_M}{\sqrt{V}} \sum_{k, m = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}} \hat{G}_{Mm}(E^M, \mathbf{k}, \zeta) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_m, \quad (5)$$

где  $M = \pm 1/2, \pm 3/2$ ,  $u_m$  — блоховские амплитуды, определенные уравнениями (3);

$$\hat{G}_{Mm}(E^M, \mathbf{k}, \zeta) = [\hat{H}(\mathbf{k}, \zeta) - E^M \hat{I}]_{Mm}^{-1} \quad (6)$$

— функция Грина гамильтониана Латтинжера для деформированного материала,  $\hat{I}$  — единичная матрица,  $A_M$  — нормировочная константа. Точный вид матрицы  $\hat{G}_{Mm}(E^M, \mathbf{k})$  и нормировочных констант  $A_M$  приведен в *Приложении I*. Волновая функция акцепторного состояния в недеформированном материале имеет аналогичный (5) вид

$$\tilde{\Psi}^M(\mathbf{r}) = \frac{A_M}{\sqrt{V}} \sum_{k, m = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}} \hat{\tilde{G}}_{Mm}(E, \mathbf{k}, \zeta = 0) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_m; \quad (7)$$

$\hat{\tilde{G}}_{Mm}(E, \mathbf{k}, \zeta = 0)$  — функция Грина гамильтониана Латтинжера в отсутствие деформации (см. *Приложение I*).

Введем энергии ионизации состояний с  $M = \pm 1/2$  и  $\pm 3/2$  в деформированном материале как энергетические расстояния от уровней  $M = \pm 1/2$  и  $\pm 3/2$  до вершин соответствующих подзон:

$$\varepsilon_{b_{\pm 1/2}}(\zeta) = -E_{\pm 1/2} - 0.5E_{\text{def}} \equiv \frac{\hbar^2 \delta_{\pm 1/2}^2}{2m_0} \quad (8)$$

и

$$\varepsilon_{b_{\pm 3/2}}(\zeta) = -E_{\pm 3/2} + 0.5E_{\text{def}} \equiv \frac{\hbar^2 \delta_{\pm 3/2}^2}{2m_0}. \quad (9)$$

Величины  $\delta_M^2$  являются положительными. Соответственно энергию связи акцепторного состояния в недеформированном кристалле, которая рассматривается как известный параметр в модели потенциала нулевого радиуса, представим в аналогичном виде

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0}. \quad (10)$$

Таким образом, задача об уровнях энергии состоит в вычислении  $\delta_{\pm 1/2}^2$  и  $\delta_{\pm 3/2}^2$  как функций  $\kappa^2$  и параметра деформации  $\zeta$ . Уравнения для их вычисления можно получить из граничного условия для огибающих волновых функций при  $|\mathbf{r}| \rightarrow 0$ ;

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} [\langle u_M | \Psi^M \rangle \langle u_M | \tilde{\Psi}^M \rangle] = 0. \quad (11)$$

Здесь скобки  $\langle \rangle$  означают интегрирование по элементарной ячейке. Это условие соответствует предположению, что деформация не изменяет поведения волновых функций внутри радиуса действия потенциала. Подставляя в (11) выражения для волновых функций (5) и (7) с учетом уравнений (8)–(10), получаем уравнения для нахождения  $\delta_M^2$  ( $M = \pm 1/2, \pm 3/2$ )

$$I(\delta_M^2, \kappa^2, \zeta) = 0, \quad (12)$$

где

$$I(\delta_M^2, \kappa^2, \zeta) = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{a_{\pm}(\mathbf{k}, \zeta) - \delta_M^2 \mp \zeta}{A_{\delta} B_{\delta} - D} - \frac{a_{\pm}(\mathbf{k}, \zeta) - \kappa^2 \pm \zeta}{A_{\kappa} B_{\kappa} - D} \right\}, \quad (13)$$

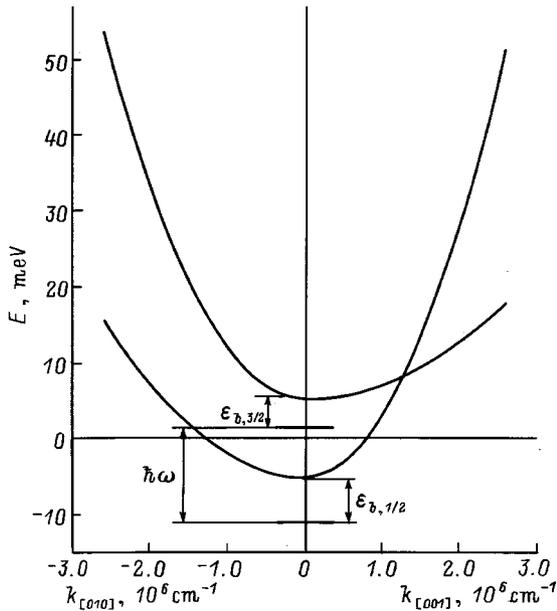
$$A_{\delta} = a_{-}(\mathbf{k}, \zeta) - \delta_M^2 \pm \zeta, \quad B_{\delta} = a_{+}(\mathbf{k}, \zeta) - \delta_M^2 \pm \zeta,$$

$$A_{\kappa} = a_{-}(\mathbf{k}, \zeta) - \kappa^2 - \zeta, \quad B_{\kappa} = a_{+}(\mathbf{k}, \zeta) - \kappa^2 + \zeta,$$

$$D = b(\mathbf{k}) b^*(\mathbf{k}) + c(\mathbf{k}) c^*(\mathbf{k}).$$

Здесь верхний знак относится к случаю  $M = \pm 1/2$ , а нижний — к случаю  $M = \pm 3/2$ , выражения  $a_{\pm}(\mathbf{k}, \zeta)$ ,  $b(\mathbf{k})$ ,  $c(\mathbf{k})$  определены уравнениями (1a) с заменой оператора  $\hat{\mathbf{k}}$  на вектор  $\mathbf{k}$ .

В случае, если деформация вызывается сжатием кристалла,  $\zeta$  положительна, вершина подзоны легких дырок ( $M = \pm 1/2$ ) сдвигается вниз относительно подзоны



**Рис. 1.** Схематическое изображение валентной зоны Ge при одноосной деформации вдоль оси [001].

тяжелых дырок ( $M = \pm 3/2$ ) и спектр становится несимметричным (см. рис. 1). Соответственно расщепляется и акцепторный уровень. При определенной деформации уровень с  $M = \pm 3/2$  выталкивается в сплошной спектр легкой подзоны. При этом состояние становится квазистационарным и энергия приобретает мнимую добавку

$$\varepsilon_{b,\pm 3/2}(\zeta) = -E_{\pm 3/2} - i\frac{\Gamma}{2} + 0.5E_{\text{def}} = \frac{\hbar^2(\delta_{\pm 3/2}^2 - i\delta')}{2m_0},$$

которая связана с временем жизни резонансного состояния соотношением

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} = \frac{m_0}{\hbar\delta'}.$$

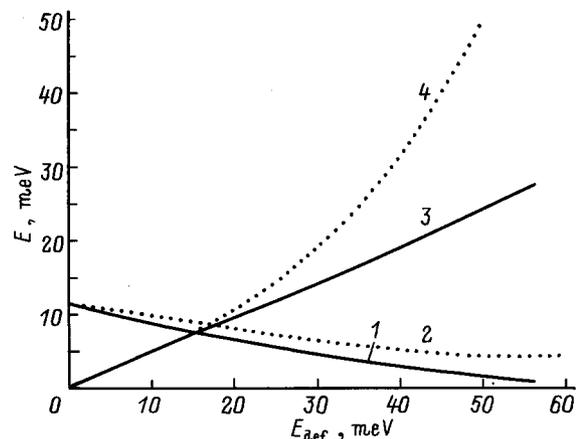
В случае растяжения  $\zeta$  отрицательна и вершина подзоны тяжелых дырок ( $M = \pm 3/2$ ) сдвигается вниз относительно подзоны легких дырок ( $M = \pm 1/2$ ). В этом случае резонансным может стать уровень  $M = \pm 1/2$ . Такая ситуация имеет, например, место при выращивании слоя GeSi между слоями Si.

Подробности решения уравнений (12) для  $M = \pm 1/2, \pm 3/2$  приведены в *Приложении II*.

### 3. Обсуждение результатов численного расчета для Ge и GeSi

В рамках модели потенциала нулевого радиуса формула (5) с учетом (П.1.1)–(П.1.4) определяет волновые функции локализованных и резонансных состояний в деформированном кристалле как функцию энергии соответствующих уровней  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  и  $\varepsilon_{b,\pm 1/2}$ , которые нужно находить на основе численного решения уравнения (12).

Рассмотрим сначала случай акцепторного состояния на примеси Ga в одноосно-сжатом Ge. Процедура решения уравнений (12) описана в *Приложении II*. Энергию связи в недеформированном материале (8) мы взяли равной  $E = 11.3$  мэВ, что соответствует примеси Ga в Ge [6]. На рис. 2 представлены энергия ионизации основного состояния акцепторной примеси ( $M = \pm 1/2$ ) и величина энергии расщепления основного состояния в одноосно-сжатом германии ( $E_{\pm 3/2} - E_{\pm 1/2}$ ) в зависимости от величины расщепления вершины валентной зоны (кривые 1, 3), которая в свою очередь связана с приложенным на кристалл давлением формулой (2). Из рис. 2 видно, что пороговое значение энергии деформационного расщепления вершины валентной зоны, при котором появляется резонансное состояние, равно 15.68 мэВ, что соответствует пороговому значению давления 2.6 кбар для деформации вдоль оси [001] и 3.92 кбар вдоль оси [111]. Это пороговое значение соответствует точке пересечения зависимостей 1 и 3. Для любой другой акцепторной примеси достаточно знать энергию связи в недеформированном материале, чтобы получить пороговое значение энергии деформационного расщепления валентной зоны, так как критическая величина отношения  $E/0.5E_{\text{def}}$  для Ge равна 1.441 и не зависит от энергии связи примесного состояния. Таким образом, пороговая энергия расщепления вершины валентной зоны, при которой появляется резонансное состояние в Ge, есть  $E_{\text{def},kp} = 1.388E$ . Для оценки точности модели потенциалов нулевого радиуса, на основе которой выполнен расчет, на рис. 2 представлены зависимость, аналогичные зависимостям 1 и 3, но выполненные для реального кулоновского потенциала акцепторной примеси (кривые 2, 4). Кривые 2 и 4 в области больших давлений рассчитывались с использованием



**Рис. 2.** Зависимости энергии ионизации  $\varepsilon_{b,\pm 1/2}$  (1, 2) и величины расщепления  $\hbar\omega = \varepsilon_{b,\pm 1/2} - \varepsilon_{b,\pm 3/2} + E_{\text{def}}$  (3, 4) основного состояния мелкой акцепторной примеси Ga от величины деформационного расщепления вершины валентной зоны  $E_{\text{def}}$  в одноосно-сжатом Ge: 1, 3 — для акцепторной примеси в модели короткодействующего потенциала, 2, 4 — для кулоновского акцептора.

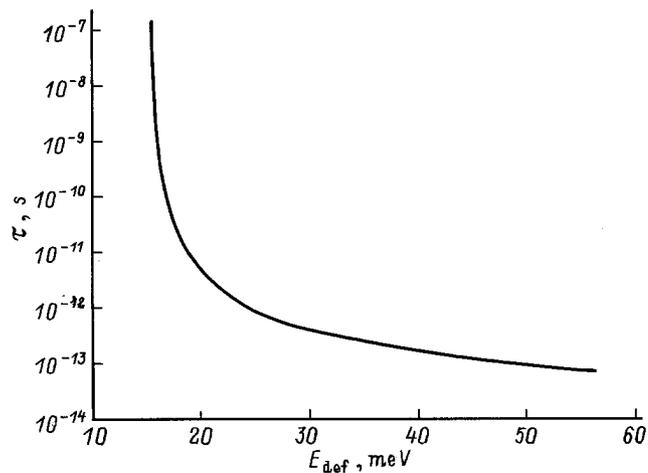


Рис. 3. Зависимость времени жизни  $\tau$  резонансного состояния  $M = \pm 3/2$  на примеси Ga от величины расщепления вершины валентной зоны  $E_{\text{def}}$  в одноосно-сжатом Ge.

формулы (27.18) из книги [1] и аппроксимировались в область малых давлений. Из сравнения кривых 1, 3 и 2, 4 видно, что модель короткодействующего потенциала достаточно хорошо описывает расщепление основного состояния мелкой акцепторной примеси в зависимости от приложенного давления в области таких значений давления, при которых энергия расщепления вершины валентной зоны может превышать величину энергии связи акцепторного состояния в недеформированном кристалле приблизительно в  $2 \div 2.5$  раза.

Как уже говорилось выше, при давлении, соответствующем расщеплению вершины валентной зоны 15.68 мэВ, состояние  $M = \pm 3/2$  попадает в сплошной спектр подзоны легких дырок ( $M = \pm 1/2$ ) и становится квазистационарным. Зависимость времени жизни резонансного состояния от величины расщепления вершины валентной зоны представлена на рис. 3. Можно видеть, что время жизни состояния быстро уменьшается по мере движения резонансного уровня в глубь сплошного спектра подзоны, что соответствует сильному увеличению ширины квазистационарного уровня. О сколько-нибудь заметной локализации дырки можно говорить только при  $|E_{\text{def}} - E_{\text{def},kp}| \leq 0.1$  мэВ, при больших давлениях связанное состояние практически мгновенно распадается, поскольку время жизни  $\tau$  в этом случае становится порядка наносекунд.

При выращивании твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  с небольшим содержанием Ge на подложке Si можно получить достаточно толстые слои  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , которые можно считать трехмерными. Эти слои будут напряжены, так как Si и  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  имеют разные значения постоянной решетки. Напряжение будет иметь характер растяжения ( $\zeta < 0$ ), поэтому основным состоянием будет  $M = \pm 3/2$ , а резонансным  $M = \pm 1/2$ . Величина растяжения меняется в зависимости от состава  $x$ . Зная величину расщепления вершины валентной зоны в деформированном  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  и энергию связи основного состояния

мелкого акцептора на примеси бора в недеформированном  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , мы рассчитали энергию ионизации  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$ , величину расщепления  $\hbar\omega = \varepsilon_{b,\pm 3/2} - \varepsilon_{b,\pm 1/2} + E_{\text{def}}$  основного состояния этой примеси, а также время жизни резонансного состояния  $M = \pm 1/2$  в зависимости от состава  $x$  твердого раствора. Эти зависимости приведены на рис. 4, 5. Используемые в расчете зависимости энергии связи основного акцепторного состояния на примеси В, параметров Латтинжера, а также величины деформированного расщепления вершины валентной зоны от состава  $x$  твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  брались из работ [7,8]. Из рис. 4, 5 видно, что при содержании Ge в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  более 20% четырехкратно вырожденное основное состояние мелкого акцептора расщепляется настолько, что состояние  $M = \pm 1/2$  становится резонансным.

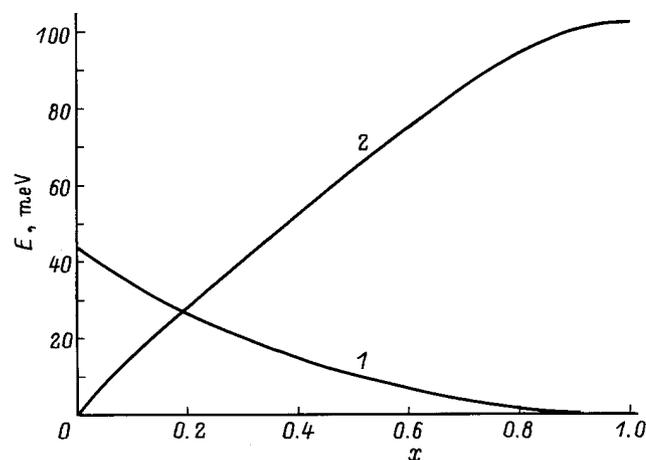


Рис. 4. Зависимости энергии ионизации  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  (1) и величины расщепления  $\hbar\omega = \varepsilon_{b,\pm 3/2} - \varepsilon_{b,\pm 1/2} + E_{\text{def}}$  основного состояния мелкой акцепторной примеси бора от состава  $x$  твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , выращенного на Si.

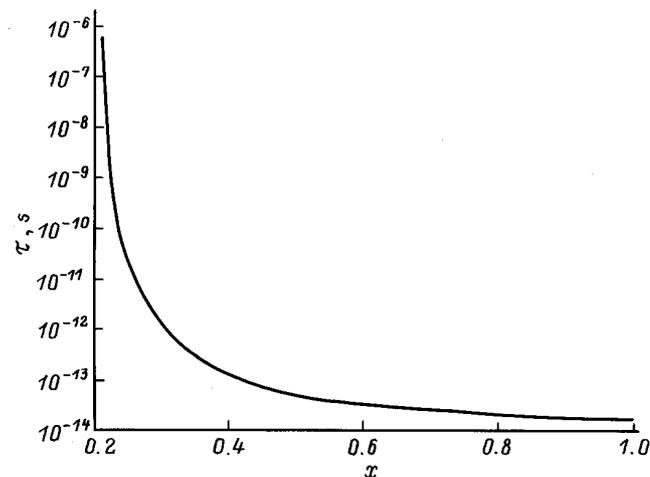


Рис. 5. Зависимость времени жизни  $\tau$  резонансного состояния  $M = \pm 1/2$  на примеси бора от состава  $x$  твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ .

#### 4. Оптические переходы

В кубических полупроводниках переходы между состояниями  $M = \pm 1/2$  и  $M = \pm 3/2$  в дипольном приближении запрещены в силу того, что оба состояния имеют одинаковую четность. Переход становится разрешен, если имеется возмущение, нарушающее четность, например внешнее электрическое поле. Наличие такого поля — необходимое условие работы инфракрасного лазера на внутрицентровых переходах мелкого акцептора [2,3]. Если электрическое поле направлено вдоль оси деформации, выходное излучение будет поляризовано перпендикулярно этому направлению. Пользуясь 2-м порядком теории возмущений, можно получить следующее выражение для силы осциллятора перехода  $3/2 \leftrightarrow 1/2$ :

$$f_{3/2,1/2} = \frac{m_0}{\hbar^2 \gamma_1} (E_{3/2} - E_{1/2}) \sum_{M_f = \pm 1/2} \sum_{M_i = \pm 3/2} \left| \sum_{\eta \mathbf{k}} \frac{\langle \frac{1}{2}, M_i | \mathbf{e} \mathbf{r} | \eta \mathbf{k} \rangle \langle \eta \mathbf{k} | e \mathbf{E} \mathbf{z} | \frac{3}{2}, M_f \rangle}{E_i - \varepsilon_{\eta}(\mathbf{k}) + i\Gamma} \right|^2. \quad (14)$$

Здесь  $\mathcal{E}$  — электрическое поле,  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации. Зависимость силы осциллятора от приложенного давления имеет особенность, которая соответствует определенному значению давления, при котором уровень  $M = \pm 3/2$  совпадает с вершиной подзоны легких дырок. Поведение силы осциллятора в этой области энергий можно получить, если представить (14) в виде

$$f_{3/2,1/2} = \frac{m_0}{\hbar^2 \gamma_1} (E_{3/2} - E_{1/2}) \sum_{M_f = \pm 1/2} \sum_{M_i = \pm 3/2} \left| \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \frac{1}{2}, M_f | \mathbf{e} \mathbf{r} \hat{G}(E_i, \mathbf{k}, \zeta) e \mathbf{E} \mathbf{z} | \frac{3}{2}, M_i \right\rangle \right|^2. \quad (15)$$

Используя равенство (5), получим следующее выражение для матричного элемента:

$$\begin{aligned} & \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \frac{1}{2}, M_f | \mathbf{e} \mathbf{r} \hat{G}(E_{3/2}, \mathbf{k}, \zeta) e \mathbf{E} \mathbf{z} | \frac{3}{2}, M_i \right\rangle \\ &= A_i A_f e \mathcal{E} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \sum_{\alpha\beta} G_{M_f\beta}(E_i, \mathbf{k}, \zeta) \left( \mathbf{e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \right) \\ & \times G_{\beta\alpha}(E_f, \mathbf{k}, \zeta) \frac{\partial}{\partial k_z} G_{\alpha M_i}(E_f, \mathbf{k}, \zeta). \end{aligned} \quad (16)$$

Если уровень с  $M_i = \pm 3/2$  близок к вершине подзоны легких дырок, то  $|\varepsilon_{b,3/2} - E_{\text{def}}| < E_{\text{def}}$  и матричный элемент в равенстве (16) можно вычислить аналитически. Используя выражение для функции Грина гамильтониана Латтинжера (см. Приложение I) при малых  $k$ :  $\varepsilon_1(\mathbf{k}) < E_{\text{def}}$ , получим следующее выражение для силы осциллятора перехода  $M = \pm 3/2 \leftrightarrow M = \pm 1/2$ :

$$f = 1.2 \cdot 10^{-3} [\text{мэВ}]^3 C(E_{\text{def}}, \varepsilon_{b,1/2}, \varepsilon_{b,3/2}) \mathcal{E}^2 \times \frac{\varepsilon_{b,1/2} - \varepsilon_{b,3/2} + E_{\text{def}}}{E_{\text{def}} \varepsilon_{b,1/2}^2} \frac{1}{|\varepsilon_{b,3/2} - E_{\text{def}}|}, \quad (17)$$

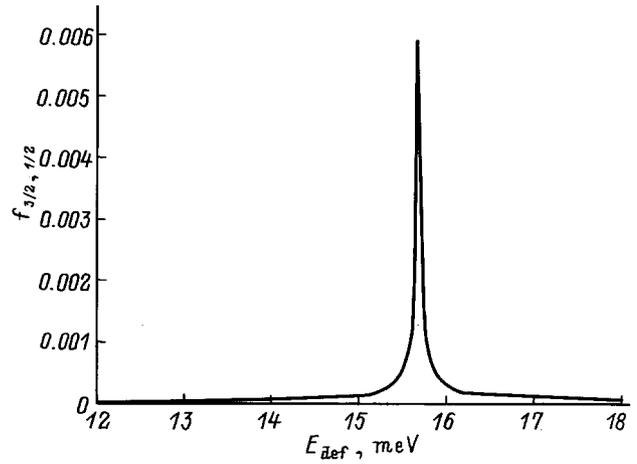


Рис. 6. Зависимость силы осциллятора  $f_{1/2,3/2}$  перехода между деформационно-расщепленными состояниями мелкого акцептора  $M = \pm 3/2 \rightarrow M = \pm 1/2$  на примеси Ga от величины расщепления вершины валентной зоны  $E_{\text{def}}$  в одноосном Ge.

где  $C(E_{\text{def}}, \varepsilon_{b,1/2}, \varepsilon_{b,3/2})$  — безразмерная функция энергий с областью значений порядка 1. Это выражение показывает, что сила осциллятора оптического перехода резко возрастает, когда уровень  $M_i = \pm 3/2$  подходит близко к вершине легкой подзоны. На рис. 6 представлена зависимость силы осциллятора перехода  $M = \pm 3/2 \leftrightarrow M = \pm 1/2$  для акцепторной примеси Ga в Ge от величины расщепления вершины валентной зоны. Зависимость обладает узким максимумом вблизи пороговой величины расщепления, а по мере удаления от критического значения расщепления, величина силы осциллятора быстро падает до значений порядка  $10^{-5}$ . Следует отметить, что полученное выражение справедливо лишь при  $|\varepsilon_{b,3/2} - E_{\text{def}}| \ll E_{\text{def}}$ , т.е. когда расстояние между уровнем  $M_i = \pm 3/2$  и вершиной легкой подзоны много меньше величины расщепления вершины валентной зоны.

#### 5. Заключение

В рамках модели потенциалов нулевого радиуса получено уравнение для нахождения положения уровней энергии основного и резонансного состояний акцептора в деформированном кристалле, что позволило вычислить также время жизни резонансных состояний. Представлены результаты численного расчета для Ge и SiGe. Показано, что данную модель можно использовать и для описания расщепления основного состояния кулоновского акцептора при не слишком больших давлениях. Вычислена сила осциллятора оптического перехода между резонансным и основным состояниями.

Авторы благодарят за частичную поддержку работы Volkswagen-Stiftung и Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 97-02-16820).

Приложение I

В этом приложении мы приводим точный вид матрицы Грина для гамильтониана Латтинжера  $\hat{G}(E^M, \mathbf{k})$  и выражения для нормировочных констант  $A_M$ :

$$\hat{G}(E^M, \mathbf{k}, \zeta) = \left( \hat{H}(\mathbf{k}, \zeta) - E^M \hat{I} \right)^{-1} = \frac{1}{\det \left( \hat{H}(\mathbf{k}, \zeta) - E^M \hat{I} \right)} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} \\ B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44} \end{bmatrix}^T, \quad (П.И.1)$$

где  $B_{Mm}$  — алгебраические дополнения к элементу  $\left( \hat{H}(\mathbf{k}, \zeta) - E^M \hat{I} \right)^{-1}_{Mm}$ ,  $\hat{I}$  — единичная матрица. Окончательно имеем для  $\hat{G}(E^M, \mathbf{k})$ :

$$\hat{G}(E^M, \mathbf{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{(a_- + \alpha_M^2)(a_+ + \alpha_M^2) - bb^* - cc^*} \times \begin{bmatrix} a_- + \alpha_M^2 & -b & -c & 0 \\ -b^* & a_+ + \alpha_M^2 & 0 & -c \\ -c^* & 0 & a_+ + \alpha_M^2 & b \\ 0 & -c^* & b^* & a_- + \alpha_M^2 \end{bmatrix}. \quad (П.И.2)$$

Нормировочные константы  $A_M$  определяются следующими выражениями:

$$A_M^{-2} = \sum_{k,m=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}} \left| \hat{G}(E^M, \mathbf{k})_{Mm} \right|^2, \quad (П.И.3)$$

Окончательно для  $A_M$  имеем

$$A_{\pm 3/2}^{-2} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(a_- + \alpha_{\pm 3/2}^2)^2 + |b|^2 + |c|^2}{\left[ (a_- + \alpha_{\pm 3/2}^2)(a_+ + \alpha_{\pm 3/2}^2) - bb^* - cc^* \right]^2},$$

$$A_{\pm 1/2}^{-2} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{(a_+ + \alpha_{\pm 1/2}^2)^2 + |b|^2 + |c|^2}{\left[ (a_- + \alpha_{\pm 1/2}^2)(a_+ + \alpha_{\pm 1/2}^2) - bb^* - cc^* \right]^2}. \quad (П.И.4)$$

Приложение II

Рассмотрим уравнение, определяющее поведение уровня с  $M = \pm 1/2$ . Дальнейшие выражения приведены для случая сжатия кристалла ( $\zeta > 0$ ). Для вычисления  $I(E_{1/2}, E, \zeta)$  из (12) перейдем к безразмерным переменным

$$\eta = \frac{\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}}{\zeta} \quad \text{и} \quad x = \frac{k_z}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}}. \quad (П.И.1)$$

Тогда (13) преобразуется к виду

$$I(\varepsilon_{b,\pm 1/2}, E, E_{\text{def}}) = \sqrt{\zeta} \int_0^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2 d\eta L_{1/2}(x, \eta), \quad (П.И.2)$$

где

$$L_{1/2}(x, \eta) = \frac{A_{1/2}^+ - 1}{(A_{1/2}^- - 1)(A_{1/2}^+ - 1) - D_1} - \frac{B_+ + 1}{(B_- - 1)(B_+ + 1) - D_1},$$

$$A_{1/2}^- = a_-(\eta, x) - \varepsilon_{b,\pm 1/2}/0.5E_{\text{def}},$$

$$A_{1/2}^+ = a_+(\eta, x) - \varepsilon_{b,\pm 1/2}/0.5E_{\text{def}},$$

$$B_- = a_-(\eta, x) - E/0.5E_{\text{def}},$$

$$B_+ = a_+(\eta, x) - E/0.5E_{\text{def}},$$

$$D_1 = b(\eta, x)b^*(\eta, x) + c(\eta, x)c^*(\eta, x).$$

Уравнение (12) принимает вид

$$I = \sqrt{\zeta} F_{1/2} \left( \frac{\varepsilon_{b,\pm 1/2}}{0.5E_{\text{def}}}, \frac{E}{0.5E_{\text{def}}} \right) = 0 \quad (П.И.3)$$

и определяет  $\varepsilon_{b,\pm 1/2}/0.5E_{\text{def}}$  как функцию  $E/0.5E_{\text{def}}$ .

Отметим, что подынтегральное выражение в (П.И.2) состоит из разности двух членов, которые при  $\eta \rightarrow \infty$  стремятся к одинаковой константе, так что интегралы от них расходятся на бесконечных пределах, однако сама разность при  $\eta \rightarrow \infty$  сходится как  $1/\eta^2$ , и интеграл от разности конечен. Приведем подынтегральное выражение к общему знаменателю; полученная рациональная дробь имеет чисто мнимые полюса, которые есть функции  $x$ . Для вычисления интеграла по  $\eta$  замыкаем контур в верхней полуплоскости, как показано на рис. 7, и применяем теорему о вычетах. Интеграл по  $x$  в конечных пределах легко вычисляется численно. Решая (П.И.3), мы получим зависимость  $\varepsilon_{b\pm 1/2}$  от  $E_{\text{def}}$ .

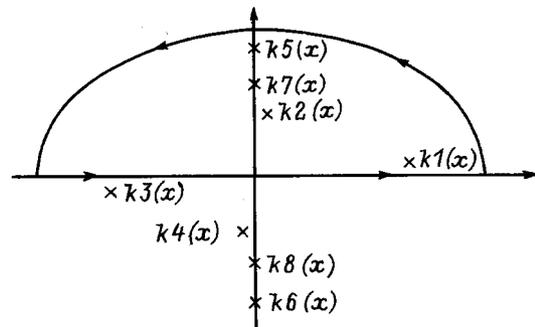
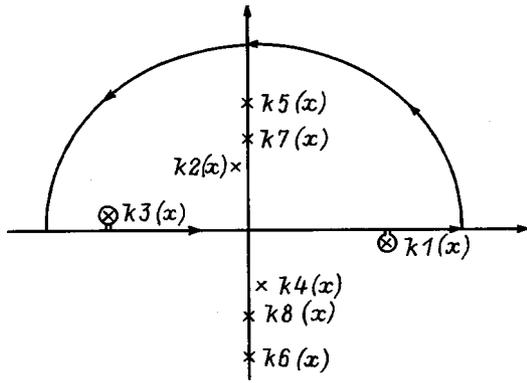


Рис. 7. Схема расположения полюсов подынтегрального выражения и контур интегрирования при вычислении интеграла в уравнениях (П.И.3), (П.И.5) для энергий  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  и  $\varepsilon_{b,\pm 1/2}$ , соответствующих связанным состояниям на акцепторной примеси  $M = \pm 3/2$  и  $M = \pm 1/2$ .



**Рис. 8.** Схема расположения полюсов подынтегрального выражения и контур интегрирования при вычислении интеграла в уравнении (П.И.5) для комплексной энергии  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$ , отвечающей квазистационарным состояниям  $M = \pm 3/2$ .

Рассмотрим теперь уравнение для энергии уровня с  $M = \pm 3/2$ . Совершим с выражением  $I(E_{3/2}, E, \zeta)$  из (13) преобразование (П.И.1). В итоге приходим к выражению для  $I(\varepsilon_{b\pm 3/2}, E, \zeta)$  типа (П.И.2):

$$I(\varepsilon_{b\pm 3/2}, E, E_{\text{def}}) = \sqrt{\zeta} \int_0^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} \eta^2 d\eta L_{3/2}(x, \eta), \quad (\text{П.И.4})$$

где

$$L_{3/2}(x, \eta) = \frac{A_{3/2}^- + 1}{(A_{3/2}^- + 1)(A_{3/2}^+ + 1) - D_1} - \frac{B_- - 1}{(B_- - 1)(B_+ + 1) - D_1},$$

$$A_{3/2}^- = a_-(\eta, x) - \varepsilon_{b,\pm 3/2}/0.5E_{\text{def}},$$

$$A_{3/2}^+ = a_+(\eta, x) - \varepsilon_{b,\pm 3/2}/0.5E_{\text{def}},$$

а величины  $B_-$ ,  $B_+$ ,  $D_1$  определены ранее. В результате уравнение (12) принимает вид

$$I = \sqrt{\zeta} F_{3/2} \left( \frac{\varepsilon_{b,\pm 3/2}}{0.5E_{\text{def}}}, \frac{E}{0.5E_{\text{def}}} \right) = 0. \quad (\text{П.И.5})$$

При величине отношения  $E/0.5E_{\text{def}}$ , большем значения  $(E/0.5E_{\text{def}})_{cr}$ , определяемого параметрами Латтинжера для данного материала, в результате решения уравнения (П.И.5) методом, описанным для случая  $M = \pm 1/2$ , мы получаем значения  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}/0.5E_{\text{def}}$ , соответствующие связанным состояниям с  $M = \pm 3/2$  в запрещенной зоне. При стремлении  $E/0.5E_{\text{def}} \rightarrow (E/0.5E_{\text{def}})_{cr}$ , связанное состояние подходит ко дну подзоны легких дырок и при  $E/0.5E_{\text{def}} < (E/0.5E_{\text{def}})_{cr}$  попадает в сплошной спектр этой подзоны. При этом полюса подынтегрального выражения (П.И.4) становятся вещественными и остаются такими при любом  $x \in [0, 1]$ . В этом случае,

в результате вычисления интеграла, мы получаем комплексную функцию

$$I = U \left( \frac{\varepsilon_{b,\pm 3/2}}{0.5E_{\text{def}}}, \frac{E}{0.5E_{\text{def}}} \right) + iV \left( \frac{\varepsilon_{b,\pm 3/2}}{0.5E_{\text{def}}} \right), \quad (\text{П.И.6})$$

равенство 0 которой возможно только при комплексных значениях  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  и соответственно  $\delta_{\pm 3/2}^2$ . Представим  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  в виде

$$\varepsilon_{b,\pm 3/2}(\zeta) \rightarrow \varepsilon_{b,\pm 3/2}(\zeta) - i\Gamma = -E_{\pm 3/2} - i\Gamma + 0.5E_{\text{def}} = \frac{\hbar^2(\delta_{b,\pm 3/2}^2 - i\delta')}{m_0}. \quad (\text{П.И.7})$$

В результате такой подстановки полюса подынтегрального выражения (П.И.4) становятся комплексными и при вычислении интеграла по  $\eta$  контур следует замыкать как показано на рис. 8. Решая (П.И.5), мы получим зависимости  $\varepsilon_{b,\pm 3/2}$  и  $\Gamma$  от  $E_{\text{def}}$ .

## Список литературы

- [1] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
- [2] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, В.П. Синис. Письма в ЖЭТФ, **59**, 455 (1994).
- [3] I.V. Altukhov, E.G. Chircova, M.S. Kagan, K.A. Korolev, V.P. Sinis, I.N. Yassievich. Phys. St. Sol. (b), **198**, 35 (1996).
- [4] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev., **97**, 869 (1955).
- [5] А.А. Пахомов, И.Н. Яссиевич. ФТП, **27**, 270 (1993).
- [6] Landolt-Bornstein, *New Series, Group III, Semiconductors* (Berlin, 1989) v. 22, subvol. b.
- [7] R. Buczko. Sol. St. Commun., **93**, 367 (1995).
- [8] T. Fromhertz, E. Koppensteiner, M. Helm, G. Bauer, J.F. Nutzel, G. Abstreiter. Phys. Rev. B, **50**, 15, 073 (1994).

Редактор Т.А. Полянская

## Resonance acceptor states in uniaxially strained semiconductors

M.A. Odnoblyudov, A.A. Pakhomov, V.M. Chistyakov, I.N. Yassievich

A.F. Ioffe Physico-technical Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** In the framework of a zero-radius potential model, the energy position and lifetimes of resonance states induced by a shallow acceptor in uniaxially strained semiconductors are considered. They can be applied directly to the case of  $A^+$  states and for a qualitative analysis of the behavior of Coulomb acceptors. The results of numerical calculations for Ge/GeSi are presented. The oscillator forces of optical transitions between resonance and ground states in a stressed Ge are calculated.