

УДК 621.315.592

# Примесные резонансные состояния в полупроводниках

## Обзор

© В.Я. Алешкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов\*, И.Н. Яссиевич\*<sup>¶</sup>Институт физики микроструктур Российской академии наук,  
603950 Нижний Новгород, Россия\* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 6 февраля 2008 г. Принята к печати 11 февраля 2008 г.)

Обсуждается современное положение дел в исследованиях локализованных и резонансных примесных состояний в квантово-размерных структурах и напряженных полупроводниках. Рассмотрены также резонансные оптические переходы, обусловленные взаимодействием с оптическими фононами. Проведен анализ различных методик расчета характеристик как донорных, так и акцепторных резонансных и локализованных состояний, а также представлен большой набор экспериментальных данных.

PACS: 71.23.An, 71.70.Fk

### 1. Введение

Примеси в полупроводниках могут являться причиной образования не только локализованных состояний, энергия которых лежит в запрещенной зоне, но и резонансных (или квазистационарных) состояний, энергии которых находятся в разрешенных зонах. От обычных состояний непрерывного спектра резонансные состояния отличаются прежде всего большей амплитудой волновой функции около примесного центра. Резонансные состояния примесей в полупроводниках исследуются уже достаточно давно, и известно довольно большое число их разновидностей. Например, в присутствии квантующего магнитного поля состояния мелкой примеси, сформированные из волновых функций подзон Ландау с большими циклотронными энергиями, попадают в непрерывный спектр более низких подзон и являются резонансными [1]. Другими широко известными примерами резонансных состояний являются примесные состояния в бесщелевых или узкощелевых полупроводниках [2] и состояния глубоких примесей в полупроводниках  $A^{IV}B^{VI}$  [3]. Обычно для появления резонансных примесных состояний необходимо присутствие нескольких близких по энергии подзон, будь то подзоны Ландау, состояния зоны проводимости и валентной зоны в узкощелевых полупроводниках или состояния подзон размерного квантования в квантовых ямах (КЯ). В валентной зоне кремния хорошо известны резонансные состояния мелких акцепторов, обусловленные присутствием спин-отщепленной зоны [4]. Наконец, в германии под воздействием одноосной деформации, которая расщепляет зоны легких и тяжелых дырок, также появляются резонансные состояния акцепторов [5]. Специфическими резонансными состояниями являются резонансные состояния примеси, появляющиеся в результате взаимодействия электронов с оптическими

фононами, для обозначения которых мы будем использовать термин „резонансы Фано“.

В объемных полупроводниках довольно сложно изменить свойства примесных состояний, включая и резонансные. Чаще всего это делают с помощью магнитного поля или деформации. В гетероструктурах с квантовыми ямами значительно проще управлять свойствами как локализованных, так и резонансных состояний, поскольку в этом случае свойства примесных состояний зависят от положения примеси относительно гетерограниц. Таким образом, гетероструктуры представляют возможность управления не только зонным, но и примесным спектрами.

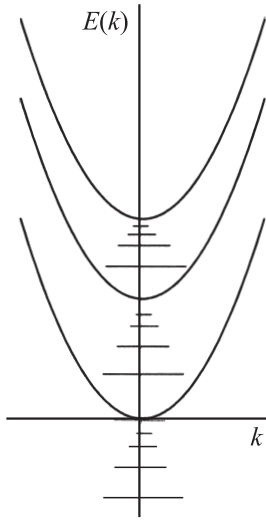
В данном обзоре обсуждается современное положение дел в исследованиях локализованных и резонансных состояний мелких примесей в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами (разд. 2), состояний мелких акцепторов в деформированном германии (разд. 3) и резонансных состояний, формируемых с участием оптических фононов (разд. 4).

### 2. Донорные резонансные состояния в полупроводниковых квантовых структурах

Рассмотрим состояния мелкого донора, расположенного в квантовой яме, в которой имеется несколько уровней размерного квантования. Примесные состояния возникают под каждой подзоной размерного квантования. Примесные уровни изображены горизонтальными линиями на рис. 1.

Примесные состояния под возбужденными зонами могут попадать в непрерывный спектр нижележащих подзон. В этом случае из-за взаимодействия локализованных состояний и состояний непрерывного спектра волновые функции таких примесных состояний представляют собой суперпозицию волновых функций тех и других.

<sup>¶</sup> E-mail: Irina.Yassievich@mail.ioffe.ru



**Рис. 1.** Схема расположения подзон размерного квантования и донорных уровней в квантовой яме.

Или, иначе говоря, локализованное состояние становится квазистационарным, поскольку у него появляется конечное время жизни. Взаимодействие локализованных состояний и состояний непрерывного спектра обусловлено кулоновским потенциалом донора, если это не запрещено симметрией. Например, если донор располагается точно в центре квантовой ямы, то локализованные состояния, принадлежащие второй подзоне размерного квантования, не взаимодействуют с состояниями непрерывного спектра, принадлежащими первой подзоне размерного квантования, поскольку состояния этих подзон имеют разную четность относительно отражения в плоскости, проходящей через середину квантовой ямы. Если донор несколько смещен от середины квантовой ямы, то взаимодействие возникает и примесные уровни, принадлежащие второй подзоне, становятся резонансными.

## 2.1. Симметрия донорных состояний в гетероструктурах

Здесь и далее в разд. 2.1–2.3 мы будем рассматривать доноры в полупроводниках  $A^{III}B^V$ , дно зоны проводимости в которых расположено в центре зоны Бриллюэна. В приближении эффективной массы в объемном прямозонном полупроводнике с параболическим законом дисперсии в зоне проводимости состояния донора характеризуются тремя атомными квантовыми числами: главным квантовым числом  $n$ , числом  $l$ , соответствующим полному моменту, и азимутальным числом  $m$ , соответствующим проекции момента на ось  $z$ . Симметрия состояний донора в КЯ рассмотрена в работах [6,7]. Если в гамильтониане, кроме сферически симметричного кулоновского потенциала, возникает еще потенциал прямоугольной КЯ, то симметрия задачи понижается и описывается группой  $D_{\infty h}$ , если примесь находится в центре КЯ, и группой  $C_{\infty v}$ , если примесь находится

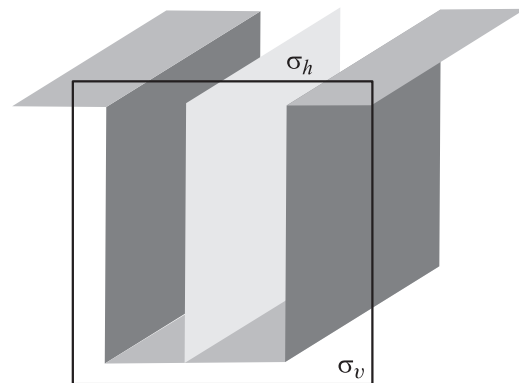
в произвольном положении. В результате понижения симметрии при помещении донора в КЯ может частично сняться вырождение донорных уровней. Для донора в квантовой яме сохраняется проекция полного момента на нормаль к плоскости квантовой ямы, которую мы выберем за ось  $z$ . Состояния, отличающиеся только знаком этой проекции, обладают одинаковой энергией.

Отметим, что операция поворота и отражения от плоскости, проходящей через ось поворота, некоммутативны (если это не ось 2-го порядка), поэтому состояния с определенной проекцией момента не обладают определенной четностью относительно отражения в плоскости, проходящей через ось вращения. Если донор расположен в середине квантовой ямы и квантовая яма симметрична, то добавляется еще один интеграл движения — четность относительно отражения в плоскости  $\sigma_h$ , проходящей через середину квантовой ямы, где находится донор (рис. 2). Можно проследить закономерность, подзонам какой четности будут соответствовать уровни объемного донора. Для этого нужно обратить внимание на то, что сферические функции  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  обладают различной четностью при отражении относительно плоскости  $\sigma_h$  (перпендикулярной  $z$ -оси, от которой отсчитывается угол  $\theta$ ) [8].

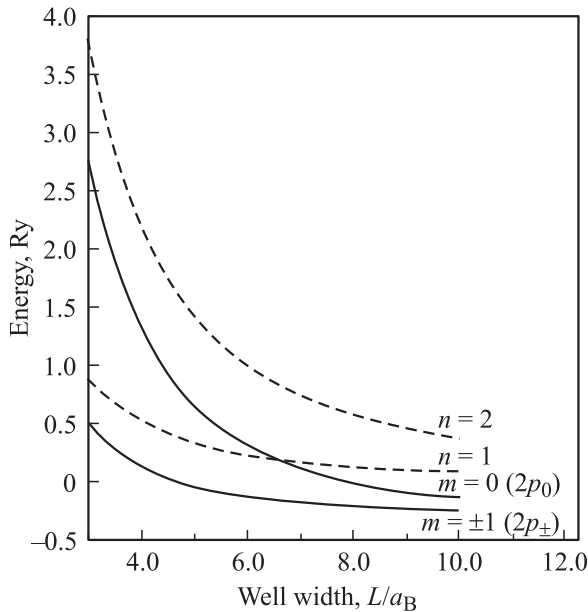
Если разность квантовых чисел  $l - m$  четная, то сферическая функция переходит в саму себя при замене  $\theta$  на  $\theta - \pi$  (угол  $\phi$  при отражении от  $\sigma_h$  не меняется), если же разность  $l - m$  нечетная, то  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$  будет менять знак. Это свойство очевидно из следующего выражения для  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ :

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \frac{e^{im\phi}}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l+m)!}} \sin^{-m} \theta \times \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\cos^2 \theta - 1)^l. \quad (1)$$

Таким образом, четным подзонам будут соответствовать состояния донора, у которых сферические функции характеризуются четной разностью  $l - m$ , а нечетным —



**Рис. 2.** Схема квантовой ямы. Разным тоном выделены гетерограницы и плоскости симметрии  $\sigma_h$  (светло-серая) и  $\sigma_v$  („прозрачная“).



**Рис. 3.** Энергии возбужденных состояний донора в квантовой яме с  $m = 0, \pm 1$  (аналогичные  $2p_0$  и  $2p_{\pm}$  в объеме) в зависимости от ширины квантовой ямы  $L$ . Штриховыми линиями показаны зависимости энергии дна первой ( $n = 1$ ) и второй ( $n = 2$ ) подзон размерного квантования от ширины квантовой ямы. Энергия измерена в эффективных Ридбергах ( $Ry = 5.8$  мэВ), длина — в боровских радиусах ( $a_B = 98.7 \text{ \AA}$ ). Гетероструктура GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Рисунок взят из работы [9].

нечетной разностью. Это значит, что состояния, произошедшие из объемных  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p_{\pm}$  и т.д., будут относиться к четным подзонам, а  $2p_0$ ,  $3d$  ( $m = \pm 1$ ) и т.п. — к нечетным подзонам. В том случае, если донор расположен не в центре КЯ, нельзя говорить, что донорное состояние обладает определенной четностью относительно отражения от плоскости  $\sigma_h$ .

Для иллюстрации вышесказанного приведем пример расчета спектра уровней мелкого донора и подзон размерного квантования в КЯ при расположении легирующего слоя в центре КЯ, выполненный в работе Грина и Байяя [9]. В этой работе для гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.8</sub>As с КЯ вариационным методом вычислялись волновые функции основного и возбужденных донорных состояний. Результаты расчетов приведены на рис. 3. Видно, что при уменьшении ширины КЯ вырожденные по энергии уровни  $2s$ ,  $2p_{\pm}$  остаются под первой подзоной, а уровень  $2p_0$  оказывается привязанным ко второй подзоне размерного квантования. Таким образом, когда расстояние между уровнями размерного квантования становится сначала равным, а потом больше, чем энергия связи возбужденного состояния донора, привязанного ко второй подзоне размерного квантования, это примесное состояние выходит в область непрерывного спектра первой подзоны.

Несколькими годами позже в работе Хелма [10] было исследовано поведение донорных уровней в сверхрешет-

ках при различных ширинах КЯ и барьеров, а также отмечено, что уровень  $2p_0$  (в работе [10] эти состояния обозначаются  $2p_z$ ) выходит в непрерывный спектр первой подзоны в достаточно узких КЯ, когда ширина КЯ меньше нескольких боровских радиусов  $a_B$ . Здесь также вариационным методом был вычислен спектр энергий мелкого донора в сверхрешетках GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Несмотря на то что в работе рассматривались сверхрешетки, широкие КЯ и барьеры (например, сверхрешетки с барьерами шириной  $50 \text{ \AA}$  и КЯ более  $300 \text{ \AA}$ ) приводят к слабому перекрытию волновых функций, поэтому такая система качественно описывает и одиночную КЯ, легированную мелкими донорами. Кроме того, в этой работе проведено экспериментальное исследование резонансных состояний в сверхрешетках, о результатах эксперимента подробнее сказано в разд. 2.5.

Таким образом, качественные заключения о поведении уровней донора в КЯ, сделанные из соображений симметрии, подтверждаются расчетами в работах [7,9,10] и экспериментальными наблюдениями в работе [10]. Учет спин-орбитального взаимодействия и непараболичности спектра понижает симметрию гамильтониана. Например, если квантовая яма выращена на плоскости  $[001]$ , то симметрия понижается с  $C_{\infty v}$  до  $C_{2v}$  для произвольно расположенного донора и с  $D_{\infty h}$  до  $D_{2h}$  для донора в центре квантовой ямы. В этом случае проекция полного момента на ось  $z$  не сохраняется.

## 2.2. Результаты расчетов локализованных состояний мелких доноров в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами

Состояния мелких примесей в квантовых ямах исследовались с начала 80-х годов прошлого века. Наличие пространственного ограничения волновой функции электрона в КЯ, по масштабу локализации сравнимого с характерной длиной волны де Бройля для электрона, сильно влияет на спектр состояний мелких примесей. Гамильтониан, описывающий донор в КЯ, в приближении эффективной массы в общем виде можно записать как

$$\hat{H} = E(\hat{\mathbf{p}}) + V_{\text{QW}}(z) + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где потенциал  $V_{\text{QW}}(z)$  задает профиль КЯ,  $V_{\text{imp}}(\mathbf{r})$  — потенциал примеси,  $E(\hat{\mathbf{p}})$  — закон дисперсии электронов в зоне проводимости. Теперь рассмотрим, каким образом каждое из этих слагаемых записывается в явном виде при учете или пренебрежении теми или иными эффектами. Закон дисперсии в простейшем случае полагается изотропным и параболическим в плоскости квантовой ямы  $E(\hat{\mathbf{p}}) = (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2)/2\mu$  [6], где  $\mu$  — эффективная масса электрона в зоне проводимости. Однако для повышения точности расчетов для узких и глубоких КЯ иногда учитывают непараболичность зоны проводимости. Для этого учитывают зависимость эффективной массы электрона от энергии. Для объемного материала GaAs Браунном и Ресслером в работе [11] при помощи  $k\rho$ -метода в

14-зонной модели было получено следующее выражение для дисперсии зоны проводимости:

$$E(k) = \hbar^2 k^2 / 2\mu + \alpha_0 k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \pm \gamma_0 \sqrt{k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) - 9k_x^2 k_y^2 k_z^2}, \quad (3)$$

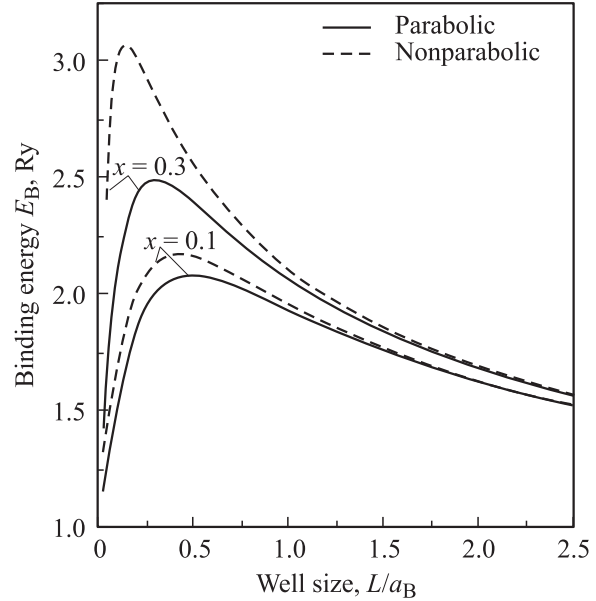
где масса в  $\Gamma$ -точке считается равной  $m = 0.0665m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона),  $\alpha_0 = -1.969 \times 10^{-29}$  эВ·см<sup>4</sup>, слагаемое, пропорциональное  $\beta_0$  ( $\beta_0 = -2.306 \cdot 10^{-29}$  эВ·см<sup>4</sup>), описывает анизотропию зоны проводимости, а пропорциональное  $\gamma_0$  ( $\gamma_0 = -2.8 \cdot 10^{-23}$  эВ·см<sup>3</sup>) — влияние спинового расщепления из-за неинвариантности гамильтониана по отношению к преобразованию инверсии в GaAs. Оси  $x$ ,  $y$ ,  $z$  направлены вдоль кристаллографических осей [100], [010] и [001] соответственно. В работе [12] получена формула для эффективной массы в том случае, когда отлична от нуля только компонента волнового вектора  $k_z$  (в этом случае два последних слагаемых в (3) равны нулю):

$$\frac{\mu}{m_0} = (0.0665 + 0.0436E + 0.236E^2 - 0.147E^3 + \dots), \quad (4)$$

где  $E$  — энергия электрона, выраженная в эВ, отсчитанная от дна зоны проводимости. Эта формула часто используется и при расчете электронных состояний в КЯ. В работе [13] с помощью формулы (4) для эффективной массы проведены расчеты энергии ионизации донора в КЯ гетероструктур GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As при различных  $x$  и ширинах КЯ. Авторы сравнивают зависимости энергии связи различных донорных уровней от ширины КЯ с учетом непараболичности и без нее. Энергии связи основного состояния донора в КЯ (аналог  $1s$ -состояния в объеме) и трех возбужденных (аналогичных  $2s$ ,  $2p_{\pm}$  и  $2p_0$ ) были вычислены вариационным методом, донор располагался точно в центре КЯ. Результаты вычислений с учетом и без учета непараболичности приведены на рис. 4.

При уменьшении ширины КЯ энергия ионизации донорного состояния сначала увеличивается из-за все более сильной локализации волновой функции электрона в  $z$ -направлении. Но при дальнейшем уменьшении ширины КЯ волновая функция начинает „вылезать“ в барьеры, поэтому энергия ионизации уменьшается. Из рис. 4 видно, что для основного состояния донора учет непараболичности становится значимым при ширине КЯ меньше боровского радиуса в GaAs и при  $x > 0.3$ . Для возбужденных донорных состояний поправка, вносимая учетом непараболичности в величину энергии ионизации, составляет менее 4% [13]. Причем для состояния  $2p_0$ , которое при ширине КЯ менее 650 Å выходит в непрерывный спектр первой подзоны размерного квантования (разд. 2.1), эта величина вообще пренебрежимо мала.

Вернемся к обсуждению гамильтониана (2). Квантовая яма обычно считается прямоугольной, поэтому



**Рис. 4.** Зависимости энергии связи основного состояния донора в квантовой яме GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As (для  $x = 0.1$  и  $x = 0.3$ ) от ширины квантовой ямы ( $L$ ), выраженной в боровских радиусах, без учета непараболичности (сплошные линии) и при учете непараболичности (штриховые линии). Энергия связи приведена в эффективных Ридбергах,  $Ry = 5.8$  мэВ (данные взяты из работы [13]).

потенциал  $V_{QW}(z)$  имеет вид

$$V_{QW}(z) = 0, \quad z \in (-d/2, d/2),$$

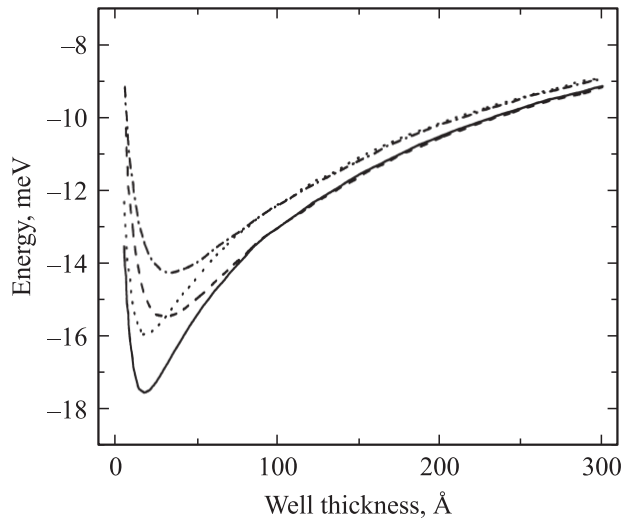
$$V_{QW}(z) = U_0, \quad z \in [d/2, \infty) \cap z \in (-\infty, -d/2].$$

Величина  $U_0$  задается разрывом зон проводимости материалов ямы и барьера. Что касается потенциала примеси  $V_{imp}(\mathbf{r})$ , в некоторых работах учитывается поляризация гетерограницы заряженным ионом примеси [6], в этом случае потенциал примеси имеет вид

$$V_{imp}(r) =$$

$$= \begin{cases} -\frac{(1+\beta)e^2}{\kappa} \left( \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_{imp})^2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_n^+)^2}} \right), & z < 0, \\ -\frac{e^2}{\kappa} \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_{imp})^2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{\beta^n}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_n^+)^2}} + \frac{\beta^n}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_n^-)^2}} \right) \right], & 0 < z < d, \\ -\frac{(1+\beta)e^2}{\kappa} \left( \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_{imp})^2}} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{\rho^2 + (z-z_n^-)^2}} \right), & z > d, \end{cases} \quad (5)$$

где  $z_{imp}$  — координата примеси;  $\beta = (\kappa - \kappa_b)/(\kappa + \kappa_b)$ ;  $\kappa$ ,  $\kappa_b$  — низкочастотные диэлектрические проницаемости



**Рис. 5.** Зависимости энергии основного донорного уровня в квантовой яме GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As от ее ширины, вычисленные в случаях  $\kappa \neq \kappa_b$  и  $\mu_{\text{GaAs}} \neq \mu_{\text{AlGaAs}}$  (сплошная линия),  $\kappa = \kappa_b$  и  $\mu_{\text{GaAs}} \neq \mu_{\text{AlGaAs}}$  (штриховая),  $\kappa \neq \kappa_b$  и  $\mu_{\text{GaAs}} = \mu_{\text{AlGaAs}}$  (пунктирная),  $\kappa = \kappa_b$  и  $\mu_{\text{GaAs}} = \mu_{\text{AlGaAs}}$  (штрихпунктирная). Рисунок взят из работы [6].

квантовой ямы и барьера соответственно,

$$z_n^\pm = \begin{cases} z_{\text{imp}} \pm nd, & \text{для четных } n, \\ -z_{\text{imp}} \pm nd, & \text{для нечетных } n. \end{cases}$$

Однако при небольшом содержании Al в твердом растворе Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As эффектом поляризации гетерограницы можно пренебречь из-за малой разницы диэлектрических проницаемостей материалов квантовой ямы и барьера (например, GaAs/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As). Тогда потенциал взаимодействия с ионом донора записывается просто:

$$V_{\text{imp}}(\rho, z) = -\frac{e^2}{\kappa\sqrt{\rho^2 + (z - z_{\text{imp}})^2}}. \quad (6)$$

Следует отметить, что поляризационные слагаемые в (5) написаны без учета пространственной дисперсии, которая важна в том случае, если электрон находится близко к гетерогранице. Как следствие, в (5) имеются нефизические бесконечности потенциала на гетерограницах. Поэтому пользоваться (5) надо с осторожностью.

В работе [6] исследовано влияние разницы диэлектрических проницаемостей ямы и барьера на энергию ионизации донора в КЯ гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As в зависимости от ширины КЯ. Кроме того, еще рассмотрено, как влияет отличие эффективной массы в яме и в барьере на энергию ионизации донора. При этом считалось, что донор находится в центре КЯ. Результаты этих расчетов приведены на рис. 5. Видно, что учет скачка эффективной массы и диэлектрической проницаемости сильнее всего сказывается в случае глубоких и узких ям. Причем большую поправку вносит именно скачок диэлектрической проницаемости,

а разница эффективных масс сказывается только в КЯ уже 90 Å.

Кроме того, в работе [6] исследовано, как зависит энергия ионизации основного состояния донора от положения донора в КЯ, с учетом и без учета различных значений диэлектрической проницаемости  $\kappa$  КЯ и барьера. Результаты вычислений приведены в таблице.

При удалении примеси от центра уменьшается энергия связи, а абсолютное значение поправки остается неизменным (см. таблицу), поэтому ее относительное значение растет. Из приведенных здесь результатов можно сделать вывод, в каких случаях необходим учет непараболических поправок и поляризации гетерограницы и когда этими эффектами можно пренебречь для упрощения расчетов. Отметим, что изменение энергии ионизации основного состояния донора в зависимости от его положения в КЯ рассматривалась ранее в работе Бастарда [14]. Вычисления донорных волновых функций проводились вариационным методом для бесконечно глубокой КЯ GaAs/AlGaAs шириной от 0 до 10 боровских радиусов. При этом автор использовал приближение эффективной массы в сферически симметричной зоне с параболическим законом дисперсии и пренебрегал индуцированными зарядами на гетерогранице.

Отдельно следует остановиться на различных математических методах, применяемых для нахождения волновых функций и энергетического спектра состояний мелких доноров как резонансных, так и локализованных. Уравнение Шредингера (2) в случае примеси в КЯ не имеет аналитического решения. Приближенно его решают с помощью вариационных методов двух типов: прямого вариационного метода и метода Релея–Ритца (метода разложения в ряд по базису функций). С помощью прямого вариационного метода были рассчитаны волновые функции и значения энергии в работах [9,10,13–15]. Для расчета основного ( $1s$ ) и локализованных возбужденных ( $2p_\pm$ ) состояний донора пробные волновые функции выбираются ограниченными в пространстве. Однако для состояния  $2p_0$  пробную функцию нужно выбирать осторожно, так как, начиная с некоторой ширины КЯ, этот уровень становится резонансным. В результате такие пробные функции выбираются в виде произведения волновой функции

$\Delta z_{\text{imp}}, \text{Å}$	$E_{\text{ion}}, \text{мэВ} (\kappa = \kappa_b)$	$E_{\text{ion}}, \text{мэВ} (\kappa \neq \kappa_b)$	$\Delta E_{\text{ion}}/E_{\text{ion}}, \%$
0	12.26	12.19	5.3
20	11.19	11.83	5.7
40	8.98	9.62	7.1
50	7.97	8.60	7.9

*Примечание.* В первой колонке таблицы указано смещение иона донора от центра квантовой ямы (ширина квантовой ямы 100 Å,  $x = 0.3$ ), во второй — энергия ионизации донора без учета скачка диэлектрической проницаемости ( $\kappa = \kappa_b$ ), в третьей — тоже энергия ионизации донора в квантовой яме, но с учетом разницы диэлектрических проницаемостей, в четвертой — относительная разница значений 3-й и 2-й колонок (из работы [6]).

2-й подзоны (в которой волновая функция нечетная) и линейной комбинации гауссовых или экспоненциальных орбиталей [9,10]. Но такая пробная функция из-за своей ортогональности к волновой функции первой подзоны не дает возможности рассматривать несимметричный случай (когда примесь смещена из центра КЯ либо симметрия ямы нарушена каким-то другим способом). Поэтому долгое время случай произвольного расположения примеси в КЯ оставался не рассмотренным.

Почти одновременно с прямым вариационным методом для расчета примесных состояний в КЯ стал применяться метод Релея–Ритца [6,16,17], ранее также применявшийся для объемных материалов Ge и Si [18,19]. Метод Релея–Ритца заключается в разложении искомой волновой функции в ряд по (вообще говоря, бесконечному) базису ортонормированных функций (в общем случае ортонормированность — не необходимое свойство базисных функций), вариационными параметрами при этом являются коэффициенты разложения. Это позволяет свести решение уравнения Шредингера к решению системы линейных уравнений или, что то же самое, к диагонализации матрицы. В некоторых работах используется синтез этих методов [15,19].

Точность метода Релея–Ритца зависит от выбора базисных функций и размерности диагонализуемой матрицы. Метод Релея–Ритца в отличие от прямого вариационного метода часто применялся для расчета донорных состояний и при положении донора вне центра квантовой ямы. В работе [6] исследовались состояния донора в КЯ GaAs/AlGaAs и разложение донорных волновых функций проводилось по базису  $e^{im\varphi}\rho^{|m|}e^{-\alpha_j\rho}f_n(z)$  (где  $\hbar m$  — проекция момента импульса на ось  $z$ , а  $f_n(z)$  — волновая функция  $n$ -й подзоны размерного квантования). Соотношения между коэффициентами  $\alpha_j$ , которые не были варьируемыми параметрами, выбирались заранее и соответствовали геометрической прогрессии такой, что  $\alpha_j/\alpha_{j-1} = 1.6$  и среднее геометрическое  $\alpha_j = 1.5a_B$ . Разложение по таким функциям позволило авторам уменьшить число членов ряда до 10. В работе [17] проводится разложение искомой волновой функции по гауссовым орбиталам. В работе [16] на примере расчета состояний мелких акцепторов предложено проводить разложение по двумерным плоским волнам — собственным функциям задачи в квантовой яме без учета потенциала примеси. Волновая функция при этом для фиксированного значения  $m$  ищется в виде

$$\Psi_m(\rho, z) = \sum_{n, \mathbf{k}} C_n^m(\mathbf{k}) f_n(z) \frac{\exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho})}{\sqrt{S}}, \quad (7)$$

где  $n$  — номер подзоны размерного квантования,  $C_n^m$  — коэффициенты разложения,  $f_n(z)$  — волновые функции подзон в КЯ. В выражении (7) шаг по  $k$  выбирается много меньше характерного масштаба локализации волновой функции в  $k$ -пространстве. При этом, кроме суммирования по состояниям непрерывного спектра в КЯ, нужно также суммировать по состояниям непрерывного

спектра над КЯ (надбарьерные состояния). В работе [6] исследовался вклад надбарьерных состояний в энергию донорных состояний. Авторы пришли к выводу, что их учет необходим только для узких КЯ ( $d < 30 \text{ \AA}$ ).

### 2.3. Резонансные донорные состояния

Возможны два подхода к описанию резонансных состояний. Во-первых, можно говорить о состоянии, возникшем в момент времени  $t = 0$  и расплывающемся с течением времени. Если вероятность ухода из состояния в единицу времени невелика по сравнению с характерной частотой внутреннего движения (хорошо определенный резонанс), тогда эта вероятность может быть вычислена по теории возмущений. Поправка к энергии резонансного состояния, вычисленная по теории возмущений, комплексна. Ее действительная часть обусловлена сдвигом уровня, а мнимая — конечной шириной резонансного уровня, связанной с временем жизни ( $\Gamma = \hbar/\tau$ ) [20]. В первом приближении теории возмущений частота переходов определяется матричным элементом оператора возмущения. Вероятность ухода электрона может быть вычислена с помощью золотого правила Ферми.

Этот подход реализован в работе Приестера с соавт. [15], где рассматривались резонансные состояния доноров, принадлежащие третьей подзоне размерного квантования, в бесконечно глубокой КЯ и считалось, что примесь расположена в центре КЯ. Волновая функция резонансного состояния, принадлежащего  $n$ -й подзоне, была представлена в виде

$$\psi(r) = Ne^{-\alpha_n\rho} \sin \left[ n\pi \left( \frac{z}{L} + \frac{1}{2} \right) \right],$$

где  $N$  — нормировочный множитель,  $\alpha_n$  — вариационный параметр,  $L$  — ширина КЯ. В работе вводится мнимая поправка к энергии резонансного состояния, которую называют шириной резонансного уровня с энергией  $E_R$  и вычисляют, используя золотое правило Ферми:

$$\Gamma = \pi \sum_{\alpha} |V_{0,\alpha}|^2 \delta(E_R - E_{\alpha}), \quad (8)$$

где  $V$  — потенциал примеси, индексы 0 и  $\alpha$  обозначают невозмущенные состояния примеси и двумерного непрерывного спектра подзоны размерного квантования. Как справедливо замечают авторы, в такой задаче из соображений симметрии возможны переходы только из резонансных состояний под третьей подзоной в непрерывный спектр первой подзоны, и вероятность таких переходов вычислена в статье ( $\Gamma \approx 0.05E_{\text{ioniz}}$  при  $L = 150\text{--}200 \text{ \AA}$ ). Кроме уширения резонансного уровня рассматривается его смещение, вызванное также замещением состояний разных подзон.

Другой подход состоит в решении стационарного уравнения Шредингера. Локализованное донорное состояние описывает волновая функция, экспоненциаль-

но спадающая при удалении от примесного центра. Волновая функция резонансного состояния содержит локализованную и распространяющуюся вдоль слоя КЯ части, так как электрон с заданной энергией находится одновременно в локализованном состоянии и в состоянии непрерывного спектра. Такой подход осуществлен, например, в работах [19,21–23]. В работе [19] рассматривались резонансные состояния акцепторов в одноосно-сжатом *p*-Ge. В работе [22] вычислялся спектр и волновые функции состояний мелких доноров в КЯ (в том числе и резонансных). Вычислено время жизни электрона в резонансном состоянии с учетом процессов рассеяния на оптических фононах. В работе [21], вышедшей чуть позже в 2005 г., также выполнены расчеты энергий и волновых функций резонансных состояний мелких доноров в КЯ.

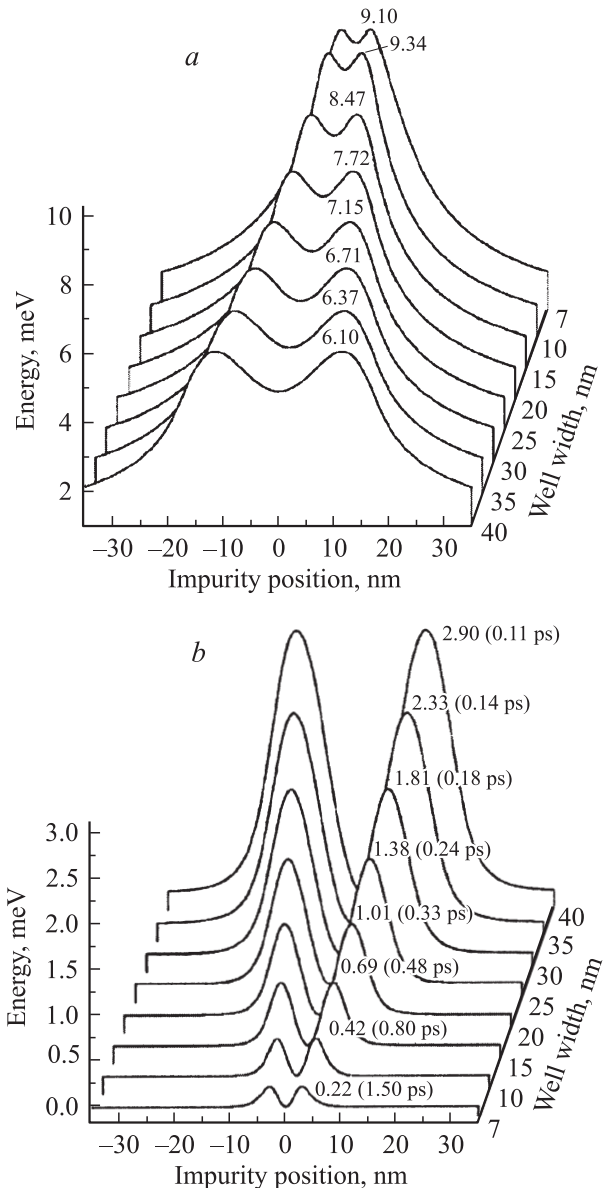
В работе [23] рассмотрены резонансные и локализованные состояния водородоподобной примеси, занимающей произвольное положение в КЯ. Так как система цилиндрически симметрична, проекция оператора момента импульса на ось *z* ( $L_z$ ) коммутирует с гамильтонианом и собственные значения  $L_z$  ( $\hbar m$ ) — хорошие квантовые числа. Волновые функции для фиксированного *m* ищутся в виде

$$\psi_m(z, \rho) = \exp(im\varphi)\rho^{|m|} \sum_{n,l} C_{n,l}^m \exp(-\alpha_l \rho^2) f_n(z). \quad (9)$$

При этом учитывались вклады от различных подзон с номером *n*. Коэффициенты  $C_{n,l}^m$  — линейные вариационные параметры, а  $\alpha_l$  — нелинейные вариационные параметры. При фиксированных параметрах  $\alpha_l$  решение уравнения Шредингера, куда подставляется волновая функция (9), сводится к диагонализации матрицы размерности  $(n \times l) \times (n \times l)$ . Затем, изменяя нелинейные параметры, можно добиться уменьшения собственных значений энергии.

Рассмотрим теперь факторы, влияющие на время жизни резонансного состояния. Как было уже отмечено выше, время жизни электрона на резонансном уровне, принадлежащем второй подзоне, стремится к бесконечности, когда примесь находится в центре КЯ, т.е. состояние становится локализованным. При малых смещениях донора от центра КЯ ширина резонансного уровня  $2p_0$  зависит от смещения донора квадратично. В том случае, когда примесь находится в области, где вероятность нахождения электрона второй подзоны максимальна, ширина резонансного уровня  $2p_0$  достигает максимума, а затем, по мере удаления примеси от этой области, спадает.

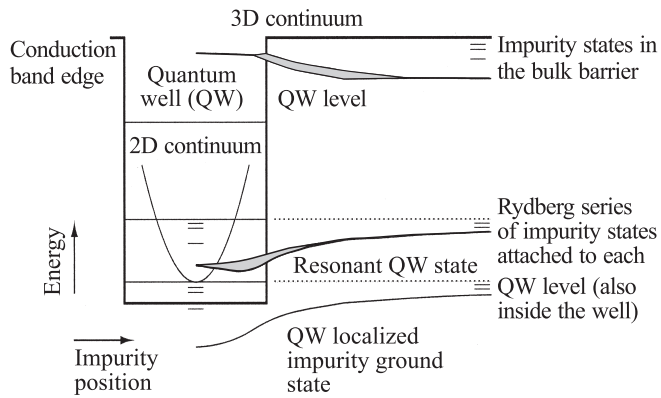
В работе [23] построены зависимости энергии ионизации, ширины и смещения резонансного уровня, принадлежащего второй подзоне размерного квантования, в зависимости от ширины КЯ и положения примеси в ней. Ширина резонансного уровня и его смещение вычислялись по теории возмущений. Получено, что ширина резонансного уровня является немонотонной



**Рис. 6.** Зависимости энергии ионизации (а) и ширины нижнего резонансного уровня (б) от положения примеси в квантовой яме гетероструктуры  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$  при различных ширинах квантовой ямы (из работы [23]). Значения энергии в мэВ указаны цифрами около кривых.

функцией положения примеси, максимальное значение этой величины изменяется от 0.22 мэВ при ширине КЯ 70 Å до 2.9 мэВ при ширине КЯ 400 Å (для гетероструктуры  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ ). Отметим, что максимальная ширина резонансного уровня увеличивается с ростом ширины квантовой ямы (рис. 6).

Причиной возникновения резонансных состояний могут быть не только примеси, находящиеся непосредственно в КЯ. В работах [24–26] исследованы резонансные состояния, появляющиеся в КЯ благодаря наличию мелких примесей в барьере, и изучен вопрос о поведении примесных состояний при изменении расстояния



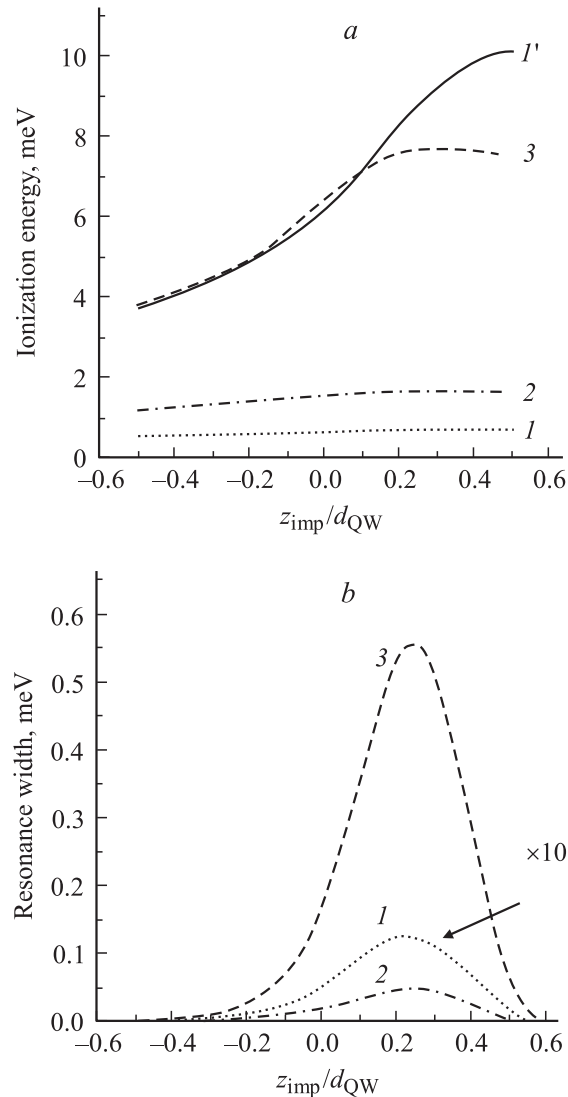
**Рис. 7.** Эволюция спектра состояний, навoдимых мелким дoнoром, при изменении расстояния между примесным центром и квантовой ямой. Уширенная линия показывает уширение примесного уровня, связанное с формированием резонансного состояния.

между ямой и примесным центром. На рис. 7 показано поведение примесных состояний при изменении положения донора. Состояния под нижней зоной размерного квантования формируют серию локализованных состояний, энергия связи которых уменьшается и стремится к энергии первого уровня размерного квантования при удалении донора от центра ямы. Серии резонансных состояний появляются также под каждой зоной размерного квантования и сходятся к соответствующей подзоне при удалении донора. Однако если яма такая узкая, что существует только один уровень размерного квантования, то резонансные состояния прикреплены к краю непрерывного спектра. В работе [24] подробно исследован именно такой случай для кулоновского центра, а также для потенциала нулевого радиуса. Резонансное состояние формируется из состояний квазидвумерного непрерывного спектра в подзоне размерного квантования и состояния примеси в барьере. При этом носители заряда, рассеивающиеся на потенциале заряженной примеси, имеют вероятность быть захваченными в „локализованную часть“ резонансного состояния и затем вернуться в подзону благодаря явлению автоионизации („нелокализованной части“ резонансного состояния). В работе [24] был вычислен спектр и плотность донорных состояний в КЯ, а также частоты рассеяния с участием резонансных состояний.

В 2005 г. опубликована работа, посвященная аналитическому исследованию резонансных состояний мелких доноров в узких ( $< 30 \text{ \AA}$ ) КЯ [27]. Авторы используют адиабатическое многоподзонное приближение, т.е. считают, что движение электрона вдоль и поперек КЯ разделено адиабатически, и учитывают вклад от 3 подзон размерного квантования в формирование донорных уровней. Квантовая яма при этом считается бесконечно глубокой, поляризация гетерограниц не учитывается. Эти приближения дают авторам возможность получить аналитические выражения для спектра коэффициента

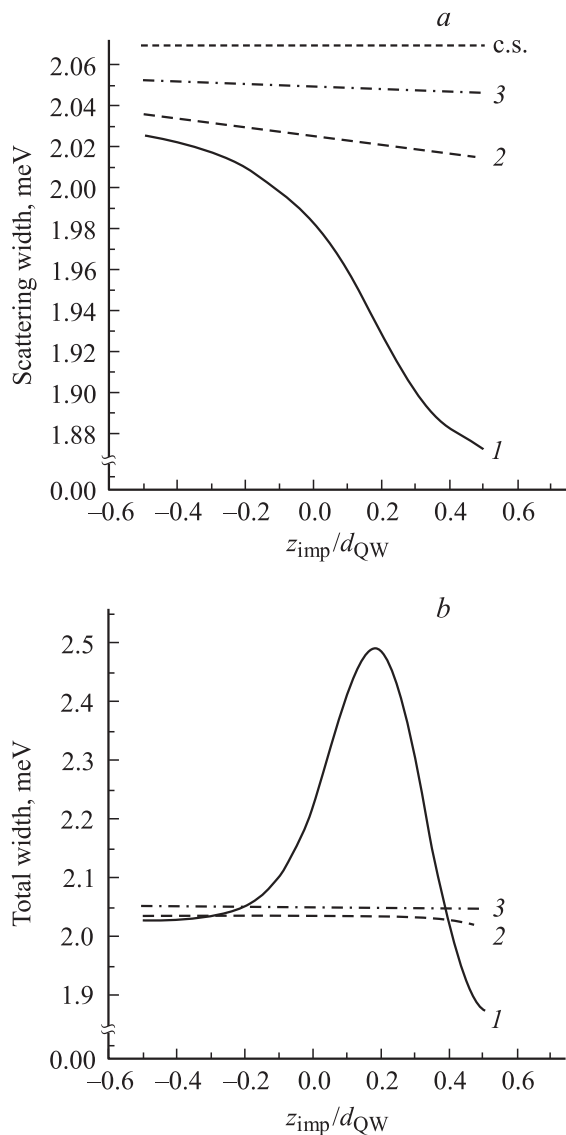
поглощения света при переходах электрона из основного состояния в резонансное. Кроме того, полученные в результате решения уравнения Шредингера собственные значения энергии были комплексными и мнимая часть соответствовала уширению резонансного уровня. Никакие другие процессы, ограничивающие время жизни электрона в резонансном состоянии, кроме резонансного ухода, авторами не рассматриваются.

В нескольких работах рассматривались резонансные состояния мелких доноров в двойных туннельно-связанных квантовых ямах. Например, в работе [7] рассмотрена система из двух туннельно-связанных квантовых ям



**Рис. 8.** Зависимость энергии ионизации от положения примеси в квантовой яме ( $150 \text{ \AA}$ ) гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (a). Основное состояние донора ( $I'$ ), резонансные состояния, принадлежащие 2-й подзоне: первое ( $I$ ), второе ( $2$ ), третье ( $3$ ). Проекция момента импульса на нормаль к плоскости гетероструктуры равна нулю. Ширина резонансных уровней ( $I-3$ ) в зависимости от положения примеси в квантовой яме (b). Для наглядности ширина третьего резонансного уровня ( $3$ ) увеличена в 10 раз (из работы [22]).





**Рис. 9.** Зависимости „фононной“ ширины резонансных уровней от положения примеси в квантовой яме ( $150 \text{ \AA}$ ) гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (a). Обозначения: 1 — ширина первого резонансного уровня (принадлежащего 2-й подзоне), 2 — второго, 3 — третьего, c.s. — уширение состояний непрерывного спектра на дне 2-й подзоны. Суммарная ширина резонансных уровней в зависимости от положения примеси в квантовой яме (b). Учтено резонансное уширение и рассеяние на РО-фононах. Цифры (1, 2, 3) соответствуют номеру уровня на рис. a. Данные из работы [22].

GaAs/AlGaAs различной ширины с произвольным положением  $\delta$ -легированного донорами слоя в этих ямах. Исследована зависимость энергии ионизации состояний  $1s$  и  $2p_0$  от положения примеси. Энергия ионизации состояния  $1s$  имеет максимум, когда донор находится вблизи центра широкой КЯ, энергия связи состояния  $2p_0$  — когда донор находится вблизи центра узкой КЯ. Кроме того, исследовалось уширение резонансного уровня  $2p_0$  при различных ширинах узкой КЯ и положениях донора.

Следует отметить, что полная ширина резонансного уровня определяется не только уходом электрона из резонансного состояния за счет смешивания подзон кулоновским потенциалом примеси. Другим важным механизмом уширения резонансных уровней доноров является взаимодействие с фононами. При низких температурах основную роль в рассеянии играют процессы спонтанного испускания фононов. Для не слишком широких квантовых ям, в которых энергетический зазор между нижним резонансным уровнем, принадлежащем второй подзоне, и дном первой подзоны превышает энергию оптического фонона (РО), основным механизмом рассеяния является испускание оптических фононов. Взаимодействие электронов с акустическими фононами заметно более слабое, как показывают оценки, сделанные в работе [28].

Процессы рассеяния на оптических фононах для электронов в резонансных состояниях учитывались в работе [22]. В этой работе показано, что в нешироких КЯ время жизни резонансных донорных состояний в основном определяется процессом рассеяния на оптических фононах, если этот процесс разрешен законом сохранения энергии. Например, время жизни резонансных состояний в КЯ GaAs/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As (шириной  $150 \text{ \AA}$  и меньше) определяется взаимодействием электронов с оптическими фононами. На рис. 8, a приведены рассчитанные зависимости энергии ионизации основного и нескольких резонансных состояний, принадлежащих 2-й подзоне размерного квантования, от положения примеси в квантовой яме гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.2</sub>Ga<sub>0.8</sub>As. Проекция момента импульса на нормаль к плоскости квантовой ямы для этих состояний была выбрана равной нулю. На рис. 8, b приведены зависимости „кулоновской“ ширины этих состояний от положения примеси. На рис. 9, a и b приведены „фононные“ и полные ширины резонансных уровней в зависимости от положения примеси в этой структуре. Из рисунка видно, что фононная ширина уровня более чем в 4 раза превосходит кулоновскую ширину.

#### 2.4. Донорные состояния в гетероструктурах Si/GeSi

В работе [26] теоретически изучены резонансные и локальные донорные состояния в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe. Вычисления проведены для структур, селективно легированных Р. Селективно легированные гетероструктуры Si/GeSi представляют интерес для создания новых оптических приборов для дальнего инфракрасного и терагерцового диапазонов, так как Ge и Si — неполярные полупроводники с низким внутренним поглощением в данном диапазоне. Учитывая также возможность интегрирования таких устройств в кремниевую технологию, были начаты работы по экспериментальному исследованию легированных структур Si/GeSi и созданию детекторов и эмиттеров на их основе (см. ссылки в [26]).

Зона проводимости в объемном кремнии имеет шесть эквивалентных долин в точках

$$\pm \mathbf{k}_{0z} = (0, 0, \pm 0.85)k_x, \quad \pm \mathbf{k}_{0y} = (0, \pm 0.85, 0)k_x$$

$$\text{и } \pm \mathbf{k}_{0x} = (\pm 0.85, 0, 0)k_x,$$

где  $k_x = 2\pi/a$  ( $a = 0.543$  нм — постоянная кристаллической решетки). Спектр электронов в каждой из долин сильно анизотропен: масса для движения вдоль оси долины  $m_{\parallel} = 0.916m_0$ , а в перпендикулярном направлении  $m_{\perp} = 0.19m_0$ . Структуры с электронными кремниевыми квантовыми ямами выращиваются на релаксированных подложках SiGe, обычно ориентированных вдоль [001]. В силу различия постоянной решетки для Si и раствора SiGe в слое квантовой ямы возникает напряжение. Напряжение и квантование электронного спектра приводит к тому, что только две долины с минимумами в точках  $\pm \mathbf{k}_{0z}$  остаются внизу и электроны располагаются именно в них.

В [26] вычисление положения примесных уровней и их ширины для резонансных состояний произведены с использованием разложения полного гамильтониана по базису собственных функций гамильтониана пустой ямы

$$|q\mathbf{k}\rangle = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\phi_q(z)/2\pi, \quad (10)$$

где  $q$  нумерует уровни ямы, а  $\mathbf{k}$  — волновой двумерный вектор. Волновые функции полного гамильтониана искались в виде

$$\psi(\rho, z, \varphi) = \exp(-im\varphi)\Sigma_q\phi_q \int_0^{\infty} kdkC_{qm}(k)J_m(k\rho), \quad (11)$$

где  $J_m(k\rho)$  — функция Бесселя. Для дискретизации спектра всю систему помещали в большой ящик. Диагонализация матрицы дает возможность найти все собственные состояния полного гамильтониана. Соответствующие собственные вектора определяют волновые функции состояний.

Если примесь находится в центре ямы, то система инвариантна относительно преобразования  $z \rightarrow -z$  и каждое состояние или четное, или нечетное. Нечетные состояния помечены значком  $u$  (рис. 10). При сдвиге примеси или приложении внешнего электрического поля симметрия нарушается и хорошими квантовыми числами остаются только  $m$  и энергия  $E$ . Всегда возможно проследить, откуда появляется данное состояние, возвращаясь к симметричному положению. Поэтому обозначение  $u$  сохранено, даже когда симметрия нарушена. Именно из первого состояния  $\Sigma_u$ , соответствующего  $m = 0$ , и формируется нижнее резонансное состояние под второй зоной размерного квантования в узких ямах, которому уделено особое внимание в работе. Другие подобные состояния обозначены как состояния  $\Sigma_u^*$ .

Для классификации состояний для каждого состояния  $i$  с энергией  $E_i$  найдены величины, которые

определяют суммарный относительный вклад состояния базиса  $q$  в состояние  $i$ :

$$d_q(E_i) = 2\pi \int_0^{\infty} dk |D_q^{(i)}(k)|^2, \quad (12)$$

где нормированные на дискретный шаг коэффициенты  $D_q^{(i)}(k)$  определяются выражением

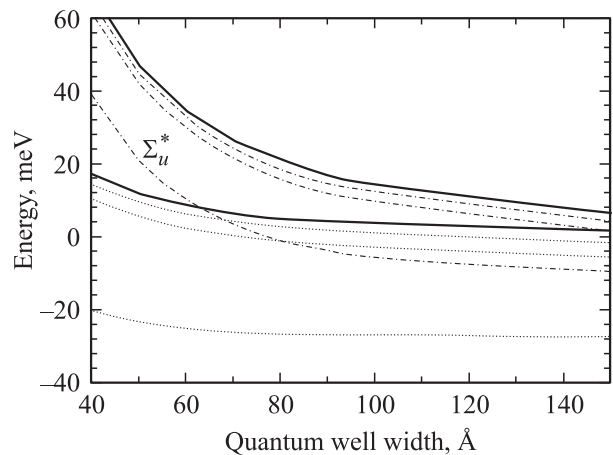
$$D_q^{(i)}(k) = \sqrt{k}C_q^{(i)}/\sqrt{2\pi\Delta k}. \quad (13)$$

Изучение поведения величин  $d_q(E_i)$  позволило выделить три типа состояний:

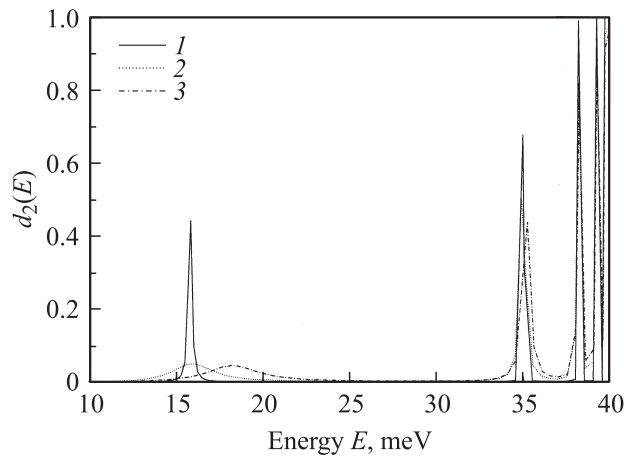
- 1) локализованные состояния, для которых имеется вклад только вышележащих зон размерного квантования, т.е.  $d_q(E_i)$  отлично от нуля только для  $E_q > E_i$ ;
- 2) непрерывные состояния, имеющие вклад только от нижележащих зон, т.е. при  $E_q < E_i$ ;
- 3) резонансные состояния, которые имеют вклад как от вышележащих, так и от нижележащих зон.

Изучено, как ведут себя примесные локализованные и резонансные состояния при сдвиге кулоновского центра к краям ямы, при помещении примеси в барьер и под влиянием внешнего электрического поля. На рис. 10 представлено энергетическое положение основного и нескольких возбужденных состояний в зависимости от ширины ямы. Примесь лежит в центре ямы  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . Видно, что для ям с шириной меньше 6 нм состояние  $\Sigma_u$  входит в непрерывный спектр. На рис. 11 показано уширение резонансных состояний при сдвиге примеси из центра ямы, а именно вклад  $d_2(E_i)$  в резонансные состояния  $\Sigma_u$  и  $\Sigma_u^*$  под 2-й подзоной размерного квантования.

В работе [26] изучено также влияние короткодействующей части донорного потенциала. Найдены энергетическое расщепление и сдвиг нижнего двухкратно



**Рис. 10.** Энергетическое положение основного и нескольких возбужденных состояний примесных уровней для различных ширин ям. Примесь находится в центре ямы  $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ . Сплошные линии показывают положение двух нижних подзон размерного квантования.



**Рис. 11.** Вклад 2-й подзоны  $d_2(E)$  в собственные состояния в интервале энергий от 1-й ( $E = 10$  мэВ) до 2-й ( $E = 40$  мэВ) подзон размерного квантования. Ширина квантовой ямы  $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}/\text{Si}/\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$  составляет  $a = 50$  Å. Три кривые соответствуют различным смещениям  $z_0$  примеси от центра ямы  $z_0/a$ : 1 — 0.05, 2 — 0.25, 3 — 0.45. В центре ямы  $z_0 = 0$ .

вырожденного кулоновского состояния в зависимости от ширины ямы и положения донора.

На основе полученных результатов вычислен спектр примесного поглощения при различной поляризации излучения.

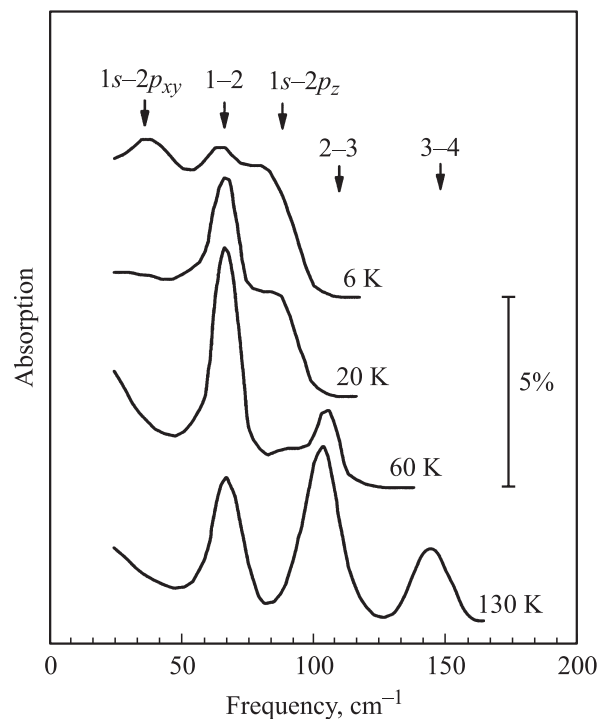
## 2.5. Экспериментальные исследования резонансных состояний доноров в гетероструктурах с квантовыми ямами

К сожалению, экспериментальных исследований резонансных состояний мелких доноров в гетероструктурах с квантовыми ямами на данный момент проведено очень мало по сравнению с исследованиями локализованных состояний мелких примесей в КЯ. В работе [10] было исследовано примесное поглощение в сверхрешетке  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  с квантовыми ямами, толщина которых изменялась от 230 до 400 Å, разделенными барьерами толщиной от 11 до 50 Å. Структуры были однородно легированы донорами с концентрацией от  $1.5 \cdot 10^{15}$  до  $8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . На рис. 12 приведены измеренные в [10] спектры примесного поглощения в структуре с ямами 400 Å и барьерами 50 Å. Цифрами 1–2, 2–3, 3–4 обозначены соответствующие межподзонные переходы (1–4 номера подзон). Отметим, что в этой структуре состояние  $2p_0$  (в [10] используется обозначение этого состояния как  $2p_z$ ) находится в непрерывном спектре нижней подзоны. Из рисунка хорошо видно уменьшение примесного поглощения ( $1s-2p_{xy}$ ,  $1s-2p_z$ ) с ростом температуры и увеличение межподзонного поглощения.

Ширина пиков примесного поглощения обусловлена в основном разбросом положения доноров в сверхрешетке и рассеянием на акустических фононах. Рассеяние на оптических фононах в исследуемых образцах было запре-

щено, так как расстояние между минизонами было меньше энергии оптического фонона. Величина поглощения определялась из измеренных спектров пропускания.

В работе [29] с помощью резонансного рамановского рассеяния исследовались гетероструктуры с КЯ  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , легированные Si, с различной шириной КЯ и немного отличающейся долей Al в барьере. Образцы были выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с ориентацией (001) и состояли из 30 периодов слоев  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  шириной 125 Å и GaAs (КЯ) шириной  $L = 238$  Å ( $x = 0.23$  в барьере) и  $L = 460$  Å ( $x = 0.24$  в барьере). КЯ содержали слой шириной примерно  $L/3$ , легированный Si с концентрацией  $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Частота лазерного излучения соответствовала энергии  $E_g + \Delta$  в GaAs (1.882 эВ). Исследовались зависимости амплитуды пиков от температуры образца и мощности накачки. На спектрах рамановского рассеяния видны 4 пика, объединенные в 2 пары. Верхний пик в каждой паре связан с переходами из основного состояния донора под 1-й подзоной в резонансное состояние под вышележащей подзоной. Гашение этих пиков при повышении температуры подтверждает предположение об их примесном происхождении. Нижний пик в каждой паре соответствует переходам между 1-й и вышележащими подзонами размерного квантования. Положение нижних пиков в каждой паре как раз соответствует расстоянию между подзонами размерного квантования в гетероструктуре  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.24}\text{Ga}_{0.76}\text{As}$  с КЯ



**Рис. 12.** Спектры примесного поглощения из сверхрешетки  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  с квантовыми ямами шириной 400 Å и барьерами шириной 50 Å при нескольких температурах. Сверхрешетка легирована донорами (из работы [10]).

шириной 460 Å (7 и 21 мэВ). Расстояние между двумя пиками в паре около 3 мэВ.

Недавно при исследовании спектров спонтанной эмиссии в терагерцовом диапазоне в структурах GaAs/AlGaAs *n*-типа с квантовыми ямами были обнаружены линии, которые определяются внутрицентровыми переходами между нижним резонансным состоянием под 1-й подзоной размерного квантования и локальными состояниями [30,31]. Измерения проводились в условиях внешнего электрического поля, приложенного вдоль структуры из 200 слоев, в которой квантовые ямы GaAs шириной 30 нм разделялись барьерами Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>As 7 нм. Модулированное легирование было проведено слоями Si 10 нм в центре ям. При этом поверхностная плотность примеси в каждом слое составляла около 10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>.

Этим список известных нам экспериментальных исследований резонансных донорных состояний исчерпывается.

### 3. Акцепторные резонансные состояния

#### 3.1. Резонансные состояния в одноосно сжатом германии *p*-типа

Перейдем теперь к рассмотрению резонансных акцепторных состояний на примере резонансных состояний, возникающих при приложении одноосной деформации к полупроводнику со структурой цинковой обманки (GaAs, Ge, Si). В таких полупроводниках в отсутствие деформации вершина валентной зоны четырехкратно вырождена, соответственно также вырождено и основное акцепторное состояние (см., например, [32]). При приложении деформации вершина валентной зоны расщепляется на 2 двукратно вырожденные подзоны, при этом снимается четырехкратное вырождение акцепторных уровней. В пределе достаточно больших давлений одна серия уровней попадает в сплошной спектр и формирует резонансные состояния (рис. 13). В этой ситуации становятся возможными эффективные оптические переходы между резонансными и локализованными состояниями одной и той же примеси.

Практический интерес к этой системе обусловлен тем, что при приложении электрического поля выше порога примесного пробоя практически все дырки оказываются в валентной зоне. В этих условиях за счет заселения резонансных состояний возможно формирование внутрицентральной инверсии, которая и является основой для генерации излучения в терагерцовом диапазоне [33–35].

Резонансные акцепторные состояния в деформированных полупроводниках изучались в рамках модели потенциала нулевого радиуса [36], а для кулоновского потенциала — с использованием подхода Дирака [37]. Численный метод рассмотрения резонансных состояний, основанный на дискретизации непрерывного спектра, был использован в работах [19,38].

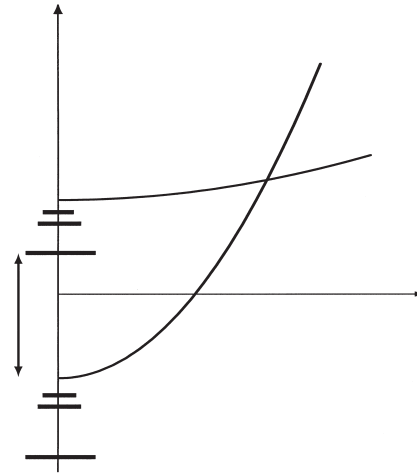


Рис. 13. Валентная зона Ge, сжатого в направлении приложенного давления, в пределе большого давления. Указаны резонансные и локальные акцепторные уровни.

Использование метода Дирака требует выделения гамильтониана нулевого приближения, в котором можно получить затравочные локализованные состояния на фоне сплошного спектра [39], что обычно трудно сделать при непосредственном применении. В работе [37] в качестве гамильтониана нулевого приближения использовалась диагональная часть гамильтониана Латтинджера, а его недиагональная часть рассматривалась как возмущение, приводящее к распаду локализованных состояний. Однако такой подход хорош для локализованных состояний, обусловленных отщепившейся зоной, но для непрерывного спектра справедлив только при малых квазиимпульсах.

Особый интерес представляет метод для расчета как параметров резонансных состояний, так и вероятности резонансного рассеяния и вероятности захвата на резонансное состояние. Он основан на использовании метода конфигурационного взаимодействия, впервые предложенного Фано для рассмотрения автоионизации атома гелия [40]. Для состояний континуума и затравочного локализованного состояния используются, следуя Фано, два разных гамильтониана нулевого приближения. А волновые функции строятся, как это принято в общей теории рассеяния, следуя методу Дирака [39]. Далее мы приведем более подробное изложение метода конфигурационного взаимодействия на примере акцепторных резонансных состояний в одноосно-деформированном германии при давлении вдоль осей [001] и [111], следуя работам [37,41].

**3.1.1. Основные методы расчета энергий и волновых функций акцепторных резонансных состояний.** Одноосная деформация по оси [001] приводит к расщеплению четырехкратно вырожденной вершины валентной зоны на два двукратно вырожденных

уровня, разделенных энергетическим зазором:

$$E_{\text{def}} = \alpha P, \quad (14)$$

где деформационный потенциал  $\alpha$  для германия, сжатого вдоль оси [001], равен 6 и 4 мэВ/кбар при давлении  $P$  вдоль оси [111].

Энергетический спектр при этом состоит из двух подзон, состояния в которых будем характеризовать значениями проекций полного момента  $M$  в точке  $\Gamma$ , и в цилиндрическом приближении определяется формулами

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \gamma_1 k^2 \pm \sqrt{\xi^2 - 2\gamma\xi(3k_z^2 - k^2) + 4\gamma^2 k^4} \right], \quad (15)$$

где параметр  $\gamma$  в цилиндрическом приближении выбирается согласно формуле  $\gamma = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$ . Для расчета использовались следующие значения параметров Латтинджера для германия  $\gamma_1 = 13.38$ ,  $\gamma_2 = 4.24$ ,  $\gamma_3 = 5.69$ . Знак „+“ в (15) относится к верхней подзоне ( $M = \pm 3/2$ ), а „-“ — к нижней ( $M = \pm 1/2$ ) (рис. 13).

Аналогично расщепляются и четырехкратно вырожденные основное и возбужденные акцепторные состояния. Состояния с проекцией полного момента на ось давления, равной  $\pm 3/2$ , следуют за отщепленной подзоной тяжелых дырок, тогда как состояния с проекцией момента  $\pm 1/2$  следуют за подзоной легких дырок. При величине давления, при которой расщепление зон существенно превышает характерную энергию связи примесного центра, под каждой подзоной формируются „лестницы“ двукратно вырожденных акцепторных состояний. При этом состояния, соответствующие подзоне тяжелых дырок ( $M = \pm 3/2$ ), оказываются в области сплошного спектра подзоны легких дырок, в результате чего происходит гибридизация их волновых функций и формируются резонансные состояния. В случае потенциала нулевого радиуса в отсутствие давления существует единственное четырехкратно вырожденное акцепторное состояние, и резонансное состояние возникает из локального состояния, отщепленного от основного. В случае же кулоновского потенциала примеси, ввиду наличия бесконечного числа возбужденных состояний, при изменении давления возникает антипересечение состояний с одинаковой симметрией, что существенно осложняет изучение вопроса о происхождении нижнего резонансного состояния в этом случае.

Существует несколько методик для расчета энергии связи и других характеристик резонансных состояний.

В рамках модели потенциала нулевого радиуса [36] расщепление основного состояния мелкого акцептора и энергии расщепленных состояний определялись из условия, что значение волновой функции на примесном центре не зависит от внешнего возмущения, в данном случае давления. При этом волновая функция примесного состояния в данной модели является функцией Грина матричного гамильтониана Латтинджера. Такой подход дал возможность изучить зависимость энергий расщепленных состояний от давления (рис. 14), а также

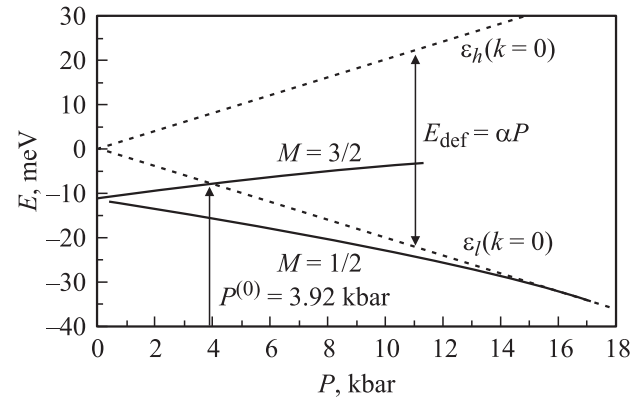


Рис. 14. Зависимости величины расщепления вершины валентной зоны Ge (пунктирные линии) и основного состояния мелкого акцепторного центра (сплошные линии) от приложенного вдоль оси [111] давления в рамках модели потенциала нулевого радиуса.

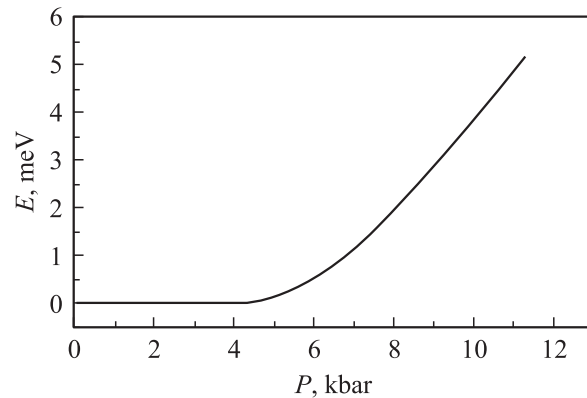
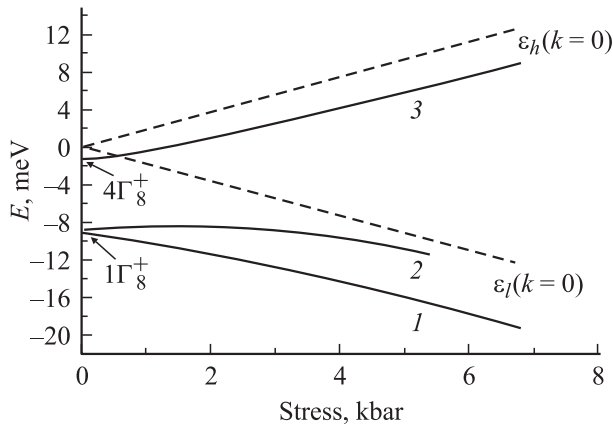


Рис. 15. Зависимость полуширины квазистационарного состояния от приложенного вдоль оси [111] давления, рассчитанная в рамках модели потенциала нулевого радиуса.

определить пороговое значение давления, при котором отщепленное состояние входит в сплошной спектр и становится резонансным. Было показано, что для короткодействующего характера потенциала примеси энергия резонансного уровня при увеличении давления асимптотически приближается к половине энергии расщепления подзон легких и тяжелых дырок. Модель также дала возможность определить зависимость ширины резонансного состояния  $\Gamma$  от энергии резонанса (рис. 15) и показать, что на пороге возникновения резонансного состояния, при малых энергиях резонанса,  $\Gamma \propto E_0^{5/2}$ .

Задача о поведении уровней при деформации кристалла в случае кулоновского центра сильно усложняется в силу расталкивания при пересечении уровней одинаковой симметрии. Подробное изучение поведения локальных уровней акцепторов в Ge и Si при приложении одноосного давления проведено в рамках вариационного метода в работе [42].



**Рис. 16.** Зависимости от давления энергий расщепленных подзон тяжелых ( $\varepsilon_h$ ) и легких ( $\varepsilon_l$ ) дырок (штриховые линии), а также состояний, отщепленных от основного  $1\Gamma_8^+$  (1, 2), а также от возбужденного  $4\Gamma_8^+$  (3) состояния (сплошные линии). При давлениях, бoльших  $\sim 0.8$  кбар, состояние  $4\Gamma_8^+$  становится резонансным.

Численный метод расчета энергии примесных локальных и резонансных состояний был развит в работах [19,38]. Метод основан на разложении функции примесного состояния по базису гамильтониана Латтинджера в отсутствие примеси. При этом использовался экранированный кулоновский потенциал для ограничения числа акцепторных состояний кулоновской примеси. В работе были получены зависимости энергии акцепторных состояний от давления, а также изучен важный вопрос о происхождении основного резонансного состояния и показано, что это состояние происходит из состояния отщепленного от локального состояния  $4\Gamma_8^+$  (рис. 16).

### 3.1.2. Метод конфигурационного взаимодействия

Для анализа кинетических явлений, связанных с резонансными состояниями, существенным фактором является информация о волновых функциях состояний, позволяющая рассчитать амплитуды рассеяния как потенциального, так и резонансного. Для нахождения волновых функций резонансных состояний был развит метод конфигурационного взаимодействия, основанный на методе Дирака. В работах [37,41] решение уравнения Шредингера с гамильтонианом, включающим примесный потенциал, искалось, как это обычно принято в теории рассеяния, в виде

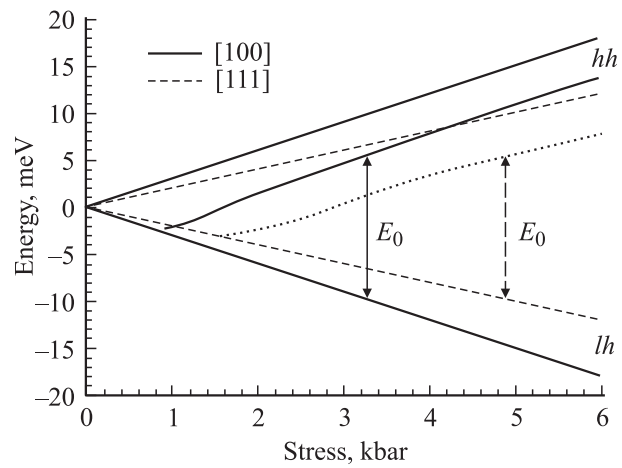
$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+1/2} = \psi_{\mathbf{k}}^{+1/2} + \alpha_{\mathbf{k}}^{+1/2,+3/2} \varphi^{+3/2}(\mathbf{r}) + a_{\mathbf{k}}^{+1/2,-3/2} \varphi^{-3/2}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{+1/2,+1/2}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\gamma} \psi_{\mathbf{k}'}^{+1/2} + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{+1/2,-1/2}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\gamma} \psi_{\mathbf{k}'}^{-1/2}. \quad (16)$$

Волновая функция  $\Psi_{\mathbf{k}}^{+1/2}$  описывает рассеяние частицы, находящейся вдали от центра в состоянии  $\psi_{\mathbf{k}}^{+1/2}$ , которое

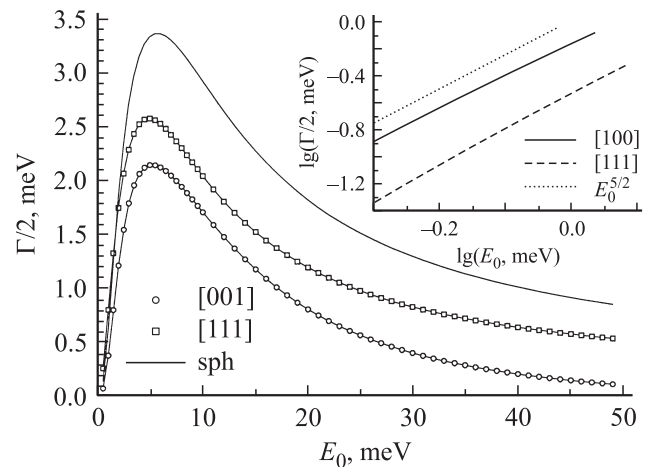
сопровождается переходами в состояния  $\psi_{\mathbf{k}'}^{\pm 1/2}$ , а также захватом в состояния  $\varphi^{\pm 3/2}(\mathbf{r})$ . При этом коэффициенты  $\alpha_{\mathbf{k}}^{+1/2,\pm 3/2}$  имеют смысл коэффициентов захвата в резонансное состояние, а  $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pm 1/2,\pm 1/2}$  являются амплитудами рассеяния. Аналогично рассматривается рассеяние частицы из начального состояния  $\psi_{\mathbf{k}}^{-1/2}$ .

Волновые функции затравочного дважды вырожденного локализованного состояния  $\varphi^{\pm 3/2}$  обычно находятся вариационным методом [36].

В качестве начального приближения для волновых функций непрерывного спектра  $\psi_{\mathbf{k}'}^{\pm 1/2}$  выбираются собственные функции свободного гамильтониана Латтинджера с учетом давления.



**Рис. 17.** Энергетическая диаграмма зависимостей расщепления подзон легких ( $lh$ ) и тяжелых дырок ( $hh$ ), а также положения резонансного уровня в зависимости от приложенного давления. Направления давления: [001] — сплошная кривая, [111] — пунктирная.



**Рис. 18.** Зависимости полуширины резонансного уровня  $E_0$  от его положения в цилиндрическом (точки) и сферическом (сплошная линия) приближениях для двух направлений приложенного давления: [001] и [111]. На вставке показана пропорциональность величине  $E_0^{5/2}$  полученных зависимостей полуширины при малых давлениях.

Решение уравнения Шредингера приводит к следующим выражениям для коэффициентов захвата  $a_k^{+1/2, \pm 3/2}$ :

$$a_k^{+1/2, +3/2} = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\varepsilon_k - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2} A_k^{+1/2, +3/2},$$

$$a_k^{+1/2, -3/2} = \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\varepsilon_k - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2} A_k^{+1/2, -3/2}. \quad (17)$$

Резонансный характер захвата и рассеяния обусловлен присутствием знаменателя  $\varepsilon_k - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2$  в коэффициентах захвата (17). Коэффициенты  $A_k^{+1/2, \pm 3/2}$  определяют амплитуду и угловую зависимость коэффициентов захвата и являются плавными функциями энергии. Их явный вид, так же как и выражения, определяющие сдвиг уровня и его ширину, приведены в работах [35,41].

Видно, что в результате конфигурационного взаимодействия энергетический уровень затравочного локализованного состояния сдвигается на величину  $\Delta E$  и приобретает ширину  $\Gamma/2$ , что соответствует конечному времени жизни частицы в этом квазилокализованном состоянии. Величины  $\Delta E$  и  $\Gamma/2$  зависят от энергии  $\varepsilon_k$ , поэтому положение резонанса  $E_0$  естественно определять как энергию, при которой вещественная часть резонансного знаменателя равна нулю:

$$E_0 - E_i - \Delta E(E_0) = 0. \quad (18)$$

Тогда полуширина резонанса определяется как значение  $\Gamma/2$ , вычисленное при резонансной энергии  $E_0$ . Результаты расчета положения резонанса и его полуширины для *p*-Ge при давлении вдоль осей [001] и [111] приведены на рис. 17, 18. Отметим, что метод дает заниженное значение порогового давления, при котором образуется основное резонансное состояние, по отношению к более точному расчету [19].

График, приведенный на вставке к рис. 18, демонстрирует, что при малых энергиях резонанса ( $E_0 \ll E_{\text{def}}$ ) зависимость  $\Gamma(E_0)$  имеет характер  $\Gamma \propto E_0^{5/2}$  в соответствии с методом потенциала нулевого радиуса.

**3.1.3. Вероятности захвата дырок в резонансное состояние и упругое резонансное рассеяние.** Представление волновой функции в виде (16) позволяет получить выражения для вероятности упругого резонансного рассеяния носителей  $W_{kk'}^{+1/2}$  и вероятности захвата на примесь  $W_{kr}^{+1/2}$ , которые связаны с коэффициентами захвата  $\alpha_k^{+1/2, \pm 3/2}$  и с амплитудами рассеяния  $t_{kk'}^{+1/2, \pm 1/2}$  соотношениями [37]:

$$W_{kr}^{+1/2} = \left| \alpha_k^{+1/2, +3/2} \right|^2 + \left| \alpha_k^{+1/2, -3/2} \right|^2, \quad (19)$$

$$W_{kk'}^{+1/2} = \frac{2\pi}{\hbar} \left( \left| t_{kk'}^{+1/2, +1/2} \right|^2 + \left| t_{kk'}^{+1/2, -1/2} \right|^2 \right) \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}). \quad (20)$$

Отметим, что упругий характер резонансного рассеяния имеет место в случае, если за время жизни  $\hbar/\Gamma$  в резонансном состоянии не происходит сбой фазы, т.е. имеет место захват и последующий когерентный выброс. В противоположном случае резонансное рассеяние приобретает неупругий характер и  $\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'})$  в (20) заменяется на лоренцовский множитель [33,37].

Рассматривая рассеяние частицы, находящейся в состоянии  $\psi_k^{-1/2}$ , легко показать, что  $W_{kk'}^{+1/2} = W_{kk'}^{-1/2}$  и  $W_{kr}^{+1/2} = W_{kr}^{-1/2}$ . Соответственно равны друг другу и функции распределения дырок  $f_k^{\pm 1/2}$ , которые следует находить, решая кинетическое уравнение с учетом упругого резонансного рассеяния.

Выражение для заселенности резонансного состояния  $f_r$  было получено в [37] и определяется формулой

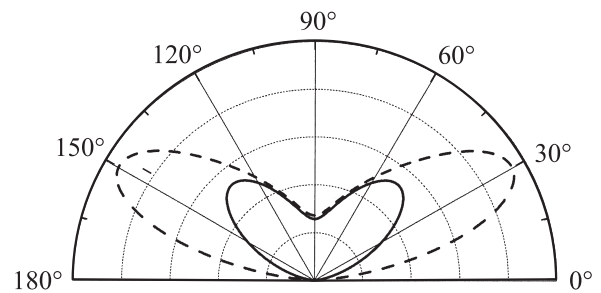
$$f_r = \sum_k W_{kr}^{+1/2} f_k^{+1/2} + \sum_k W_{kr}^{-1/2} f_k^{-1/2}, \quad (21)$$

где  $f_k^{\pm}$  является функцией распределения дырок в непрерывном спектре валентной зоны в присутствии электрического поля, рассчитанной с учетом упругого резонансного рассеяния. Вычисление этой функции проводилось в работе [35], где было показано, что возможно получение инверсной заселенности, и было показано, что на внутрицентровых переходах резонансно-локальные состояния коэффициент усиления терагерцового излучения может достигать 1.

Вероятность захвата (19) удобно представить в форме, аналогичной простой изотропной модели Брейта–Вигнера [43,44], выделяя резонансный множитель и безразмерный множитель  $w(\theta, \varepsilon_k)$ , дающий угловую зависимость. В силу резонансного характера процесса захвата этот множитель можно вычислять при значении энергии дырки  $\varepsilon_k = E_0$ :

$$W_{kr}^{+1/2} = \frac{v_0}{V} \frac{E_0^2}{(\varepsilon_k - E_0)^2 + \Gamma^2/4} w(\theta, E_0), \quad (22)$$

где  $w(\theta, E_0)$  представляет собой угловую зависимость вероятности захвата от угла  $\theta$  между волновым вектором налетающей частицы и направлением давления.



**Рис. 19.** Угловая зависимость коэффициента  $w(\theta, E_0)$  в вероятности захвата (22). Угол  $\theta$  — между волновым вектором  $\mathbf{k}$  и направлением давления [001] (осью  $z$ ). Сплошная линия соответствует давлению 2 кбар, штриховая — 4 кбар. Цилиндрическое приближение.

Результаты численного расчета  $w(\theta, E_0)$  для германия, сжатого вдоль оси [001], как функции угла  $\theta$  представлены на рис. 19.

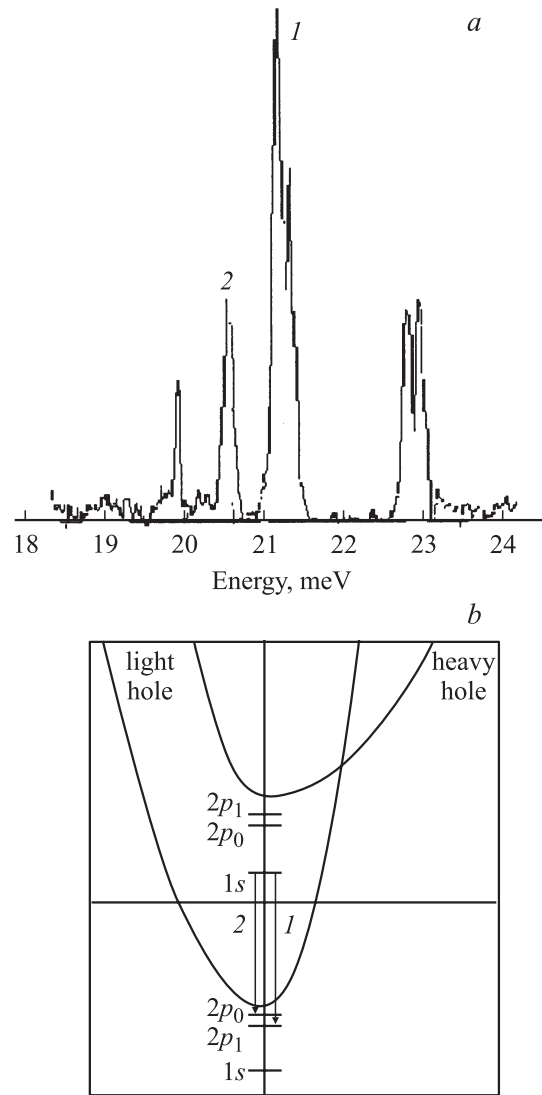
Видно, что частицы, движущиеся вдоль оси  $z$ , имеют нулевые вероятности захвата. Этот результат можно получить, не прибегая к расчетам, а из анализа выражений для  $W_{kr}$ . Это связано с тем, что рассматриваемый захват происходит, если состояния подзоны легких дырок содержат примесь состояний подзоны тяжелых дырок. В случае же, когда волновой вектор частицы направлен вдоль оси  $z$ , состояния в обеих подзонах являются „чистыми“, т.е. содержат вклады только своих подзон. При этом перпендикулярная компонента волнового вектора, а также недиагональные элементы гамильтониана Латтинджера обращаются в нуль и собственные функции гамильтониана Латтинджера принимают вид

$$\psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}/\sqrt{V}u_{\pm 1/2}.$$

Таким образом, частица, находящаяся в состоянии  $\psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}$ , не взаимодействует с затравочными локализованными состояниями, в которых единственной отличной от нуля компонентной является огибающая при блоховских функциях  $u_{\pm 1/2}$ , и захвата в него не происходит. Вероятность захвата растет при увеличении компоненты волнового вектора частицы, перпендикулярной к направлению давления. Если частицы движутся в электрическом поле, направленном вдоль оси давления, в отсутствие всякого рассеяния (стриминговый режим), то функция распределения частиц вытянута вдоль направления поля и при достижении ими резонансной энергии вероятность захватиться в резонансное состояние крайне мала. Это приводит к уменьшению заселенности центра. Напротив, при диффузионном режиме, который характеризуется широким угловым распределением частиц, вероятность захвата для большинства частиц увеличивается, что ведет к увеличению заселенности центра. Вероятность заполнения резонансного состояния примесного центра при диффузионном режиме рассматривалась в работах [34,35,45].

### 3.2. Экспериментальные результаты

Одним из наиболее выдающихся экспериментальных результатов по наблюдению резонансных акцепторных состояний является цикл работ по изучению стимулированного излучения терагерцового диапазона из одноосно-деформированного германия в присутствии внешнего электрического поля [5,46]. В этих работах было установлено, что при приложении электрического поля выше порога примесного пробоя практически все дырки оказываются в валентной зоне. В этих условиях за счет заселения резонансных состояний посредством резонансного рассеяния возможно формирование внутрицентральной инверсии, которая и является основой для генерации терагерцового излучения. Типичный спектр терагерцового излучения показан на рис. 20 вместе с

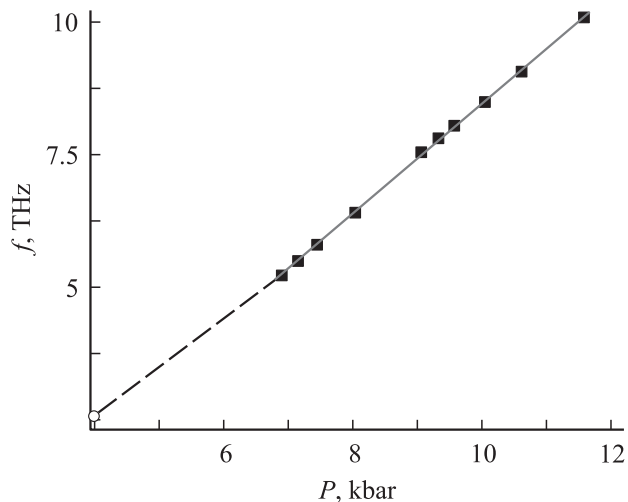


**Рис. 20.** Спектр стимулированного излучения из одноосно-деформированного Ge при  $T = 4$  К и величине давления 6.28 кбар, приложенного вдоль оси [111], полученный в работе [5] (a), и схема акцепторных уровней с оптическими переходами, ответственными за стимулированное излучение (b).

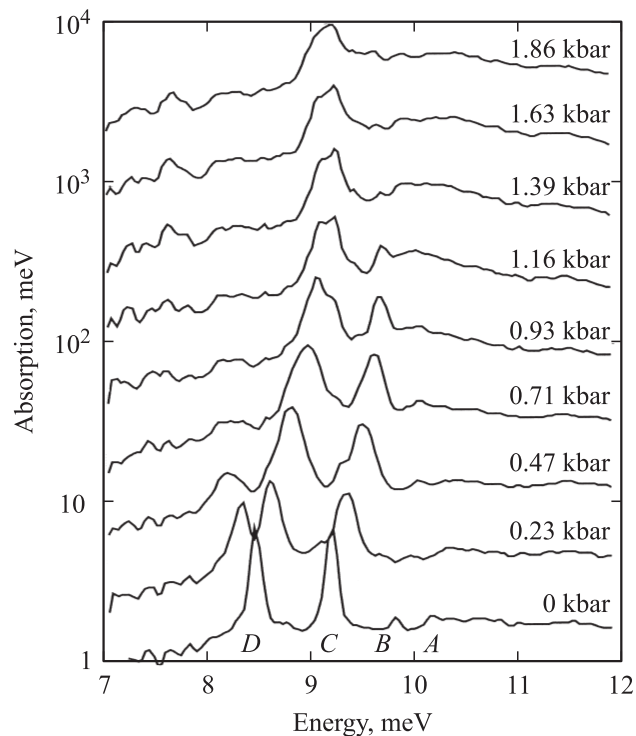
оптическими переходами, ответственными за генерацию. Пик с энергией квантов 23 мэВ соответствует переходу из 1s-резонансного в 1s-локальное состояние. Такой переход запрещен по соображениям симметрии, однако экспериментальный спектр измерялся в присутствии сильного электрического поля, которое делает переход разрешенным. Частота генерации изменялась при приложении давления более чем в 4 раза без заметного изменения мощности (рис. 21). При этом генерация была осуществлена как в импульсном, так и в непрерывном режиме [46].

Спектры поглощения и фотопроводимости примесных центров Ga в одноосно-сжатом германии были получены в работе Покровского [47] (рис. 22). Наблюдаемые линии поглощения C и D соответствуют переходам в третьи и





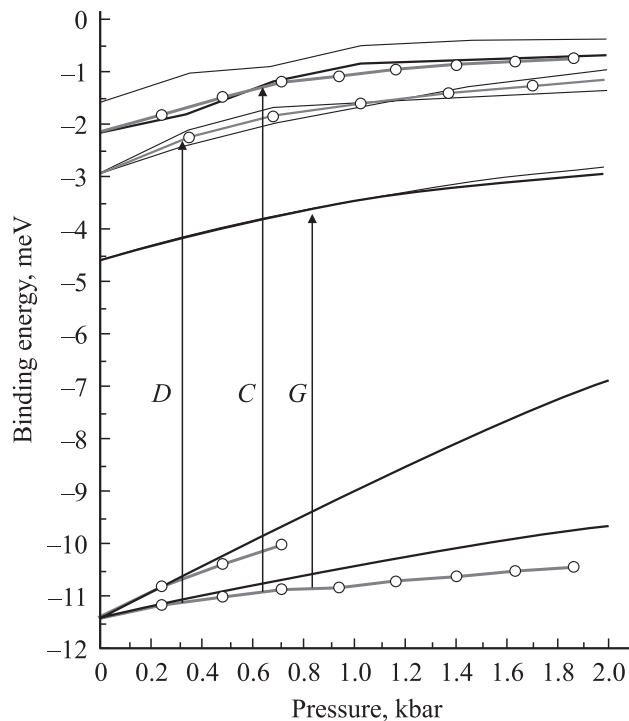
**Рис. 21.** Зависимость частоты стимулированного излучения *p*-Ge от давления; нижняя точка (светлый круг) соответствует непрерывному режиму.



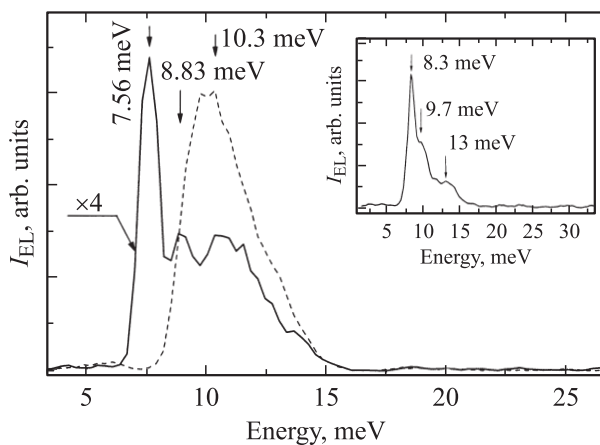
**Рис. 22.** Спектры поглощения мелкого акцептора в одноосно-сжатом Ge, измеренные в работе [47].

второе возбужденные состояния. Для линии *D* наблюдается при малом давлении расщепление, обусловленное переходом во второе возбужденное состояние из состояния, появившегося в результате расщепления основного уровня акцептора. Сравнение экспериментально измеренных зависимостей от давления положений линий *C* и *D* в спектрах поглощения с результатами расчета, выполненного Козловым [48], энергий акцепторных состояний приведено на рис. 23.

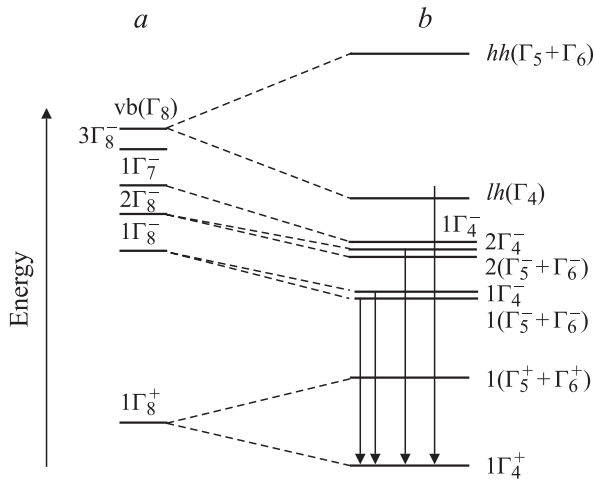
Спектр спонтанной терагерцовой электролюминесценции и ее поляризация в условиях вблизи порога пробоя мелкого акцептора Ga в германии были изучены в работах [49,50] (рис. 24). В спектре наблюдались



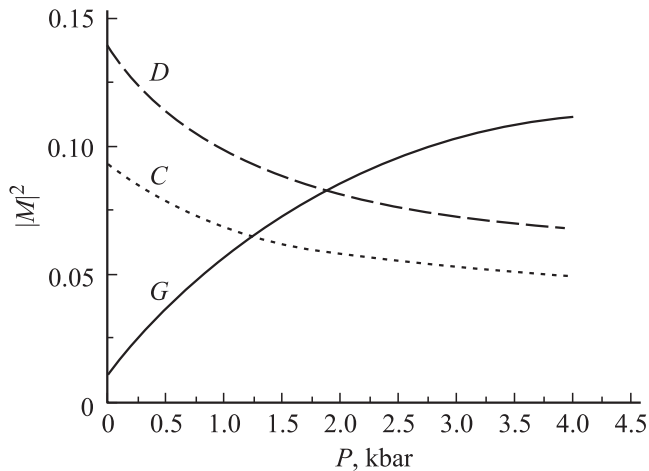
**Рис. 23.** Зависимости от давления энергий связи локальных акцепторных состояний в одноосно-сжатом Ge. Указаны переходы, соответствующие оптическим переходам, ответственным за линии *D* и *C* в экспериментальных спектрах поглощения [47], и переход *G* в первое возбужденное состояние.



**Рис. 24.** Спектры терагерцовой электролюминесценции *p*-Ge(Ga), одноосно-деформированного в направлении [111].  $T = 5$  К. Величина электрического поля  $E = 5.2$  В/см. Спектральное разрешение 0.6 мэВ. Сплошная кривая — спектр излучения, измеренный в геометрии  $\mathbf{e} \perp \mathbf{P}$ , пунктир — спектр, измеренный в геометрии  $\mathbf{e} \parallel \mathbf{P}$ . Величина давления составляет  $P = 3 \pm 0.3$  кбар (см. текст). На вставке — спектр терагерцовой электролюминесценции из недеформированного *p*-Ge(Ga), измеренный вблизи порога примесного пробоя.



**Рис. 25.** Схематическая картина основного и нескольких возбужденных состояний мелкого акцептора в Ge: *a* — в отсутствие деформации; *b* — в случае одноосной деформации по направлению [111]. Показаны только нечетные возбужденные состояния, поскольку только такие состояния проявляются в оптических переходах. Обозначения *hh* и *lh* соответствуют подзонам тяжелых и легких дырок соответственно. Стрелками показаны оптические переходы, ответственные за наблюдаемое терагерцовое излучение.



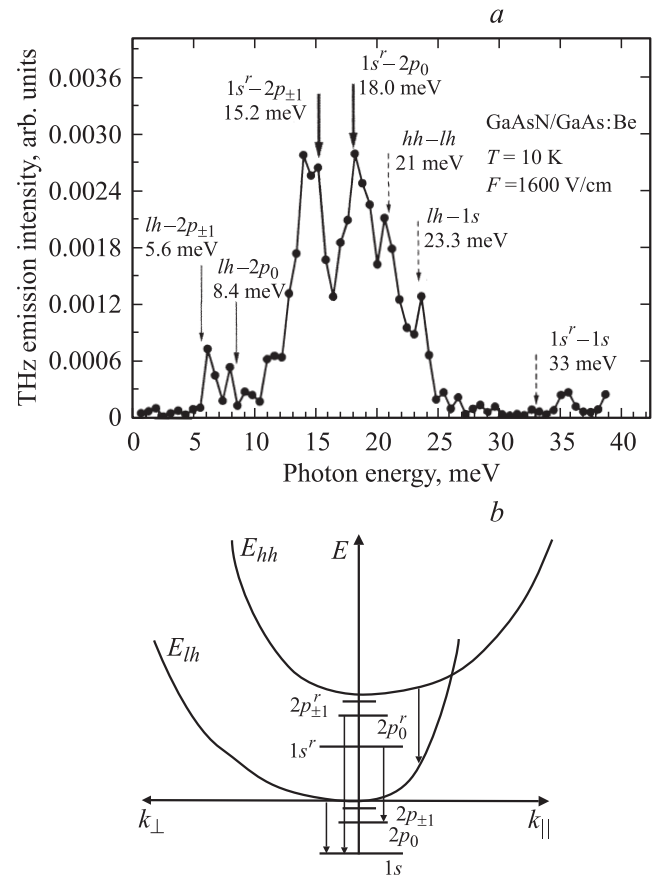
**Рис. 26.** Зависимости матричных элементов оптических переходов между возбужденными и основным примесными состояниями от давления.

узкие линии излучения, соответствующие оптическим переходам неравновесных дырок в основное состояние примесного центра из возбужденных состояний примеси. Эти линии были по-разному поляризованы по отношению к оси давления, и степень линейной поляризации достигала 93% на основной линии излучения, наблюдаемой в геометрии  $\mathbf{e} \perp \mathbf{P}$ . Это дало возможность идентифицировать, каким оптическим переходам соответствуют наблюдаемые линии (рис. 25). Было обнаружено, что, хотя линия, соответствующая переходу между 1-м возбужденным и основным состояниями (линия G

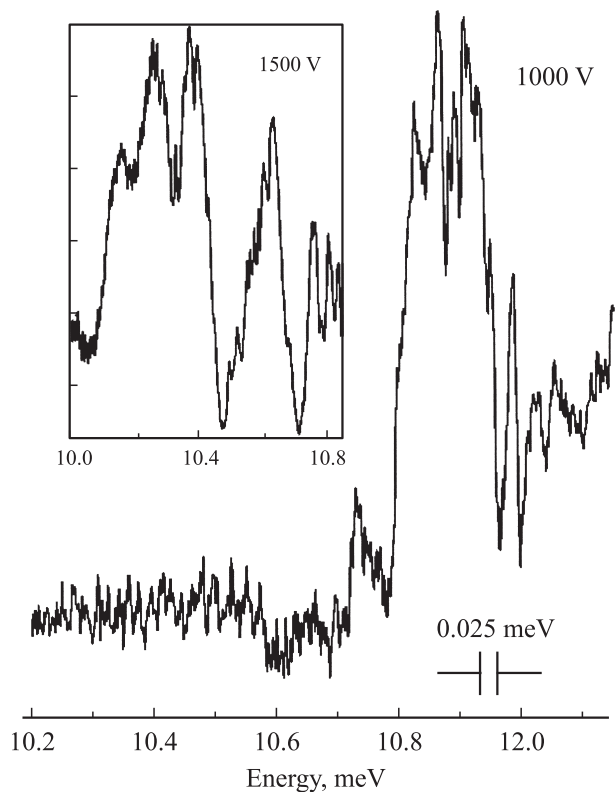
на рис. 23), отсутствует в спектре поглощения при малом давлении (рис. 22), именно она доминирует при давлении порядка 3 кбар в спектре излучения. Как показал Козлов [48], этот эффект связан с зависимостью сил осцилляторов оптических переходов от давления. При давлениях выше 0.8 кбар в спектре излучения начинают преобладать переходы из нижнего состояния, что можно объяснить изменением в соотношении между матричными элементами дипольного перехода (рис. 26).

Резонансные акцепторные состояния реализуются также в структурах, где акцепторные состояния расщепляются при совместном действии упругих напряжений, возникающих в результате рассогласования параметров решетки между материалами, составляющими структуру, и эффектов размерного квантования.

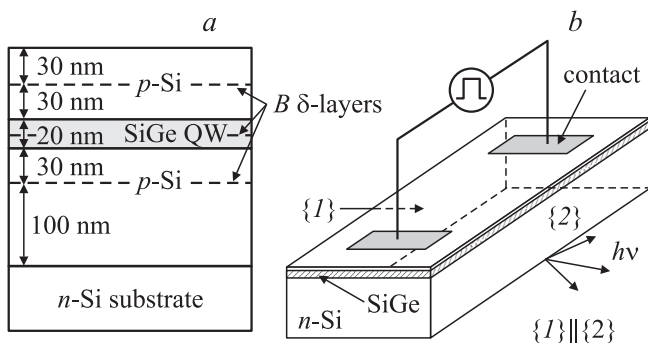
В работе [51] наблюдалось терагерцовое излучение из напряженных многослойных структур GaAsN:В/GaAs в присутствии внешнего электрического поля в условиях примесного пробоя. В спектре излучения наблюдались линии, соответствующие спонтанным оптическим пере-



**Рис. 27.** Спектр терагерцовой электролюминесценции из напряженной *p*-GaAsN/GaAs-структуры при  $E = 1600$  В/см (*a*). Стрелками показаны соответствующие оптические переходы и их рассчитанные энергии. Рассчитанная энергетическая диаграмма резонансных и локальных состояний акцепторной примеси бериллия в напряженной структуре *p*-GaAsN/GaAs (*b*). Подзоны тяжелых (*hh*) и легких (*lh*) дырок показаны схематически.



**Рис. 28.** Спектр стимулированной терагерцовой эмиссии при напряжении 1000 В. На вставке продемонстрированы дополнительные линии, возникающие в спектре при напряжении 1500 В.



**Рис. 29.** Структура SiGe/Si-лазера на резонансных состояниях (a) и схема эксперимента (b).

ходам между резонансными и локальными примесными состояниями акцепторной примеси (рис. 27, a). Был также произведен расчет спектра мелкой акцепторной примеси бериллия в сверхрешетке GaAsN/GaAs, который позволил идентифицировать линии спектра излучения (рис. 27, b).

Кванто-размерные структуры Si/SiGe/Si, в которых спектр валентной зоны аналогичен деформированному германию, очень привлекательны для создания лазеров на резонансных состояниях из-за хороших тепловых свойств, слабого поглощения в терагерцовой области

частот, относительно простой и дешевой технологии, а также возможной интеграции с кремниевой электроникой. Первой такой структурой, где наблюдалась терагерцовая генерация за счет оптических переходов между резонансными и локальными примесными состояниями, была структура с квантовой ямой,  $\delta$ -легированной бором.

На рис. 28 приведен спектр генерации, которая наблюдалась из структуры Si/SiGe/Si *p*-типа, выращенной молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке *n*-Si. Слои Si и SiGe легировались  $\delta$ -слоями бора (рис. 29). Электрическое поле прикладывалось вдоль структуры. Детальный анализ механизма и режимов генерации для структур этого типа представлены в работах [52–54].

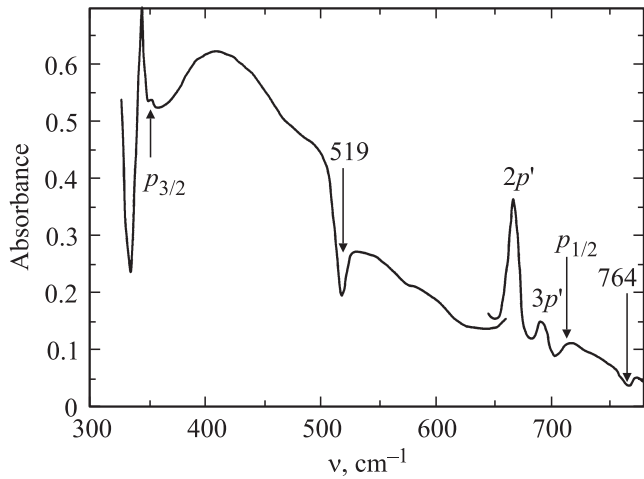
Подробный обзор экспериментальных и теоретических исследований по генерации терагерцового излучения на оптических переходах между резонансными и локальными состояниями акцепторов можно найти в работе [55].

#### 4. Резонансы Фано, обусловленные электрон-фононным взаимодействием

В этом разделе мы обсудим специфические резонансные примесные состояния, которые возникают благодаря взаимодействию электронов с оптическими фононами.

Впервые особенность, связанная с такого рода резонансами, была обнаружена в спектрах примесного поглощения кремния, легированного бором, в работе [56] еще до теоретической работы Фано [40]. Она проявлялась как провал в спектре поглощения при энергиях фотонов, близких к энергии оптического фонона. Отметим, что среди акцепторов в кремнии только бор имеет энергию ионизации, меньшую энергии оптического фонона.

Первая попытка описать эти особенности в спектрах примесного поглощения *p*-Si с помощью теории Фано была предпринята в работе Воткинса и Фаулера [57]. Авторы этой работы связали появление провалов в спектрах поглощения кремния, легированного бором, с резонансами Брейта–Вигнера–Фано (далее мы будем пользоваться термином резонанс Фано) между дырочным континуумом и таким состоянием, когда дырка находится в основном состоянии акцептора, но в системе присутствует еще испущенный оптический фонон. На рис. 30 приведен спектр примесного поглощения кремния, легированного бором, взятый из работы [57]. Из спектра хорошо виден провал около  $519 \text{ см}^{-1}$ . Авторы этой работы отметили, что энергия системы, когда дырка находится в основном состоянии акцептора и имеется оптический фонон (состояние дискретного спектра), соответствует энергии дырки в непрерывном спектре при отсутствии фонона (состояние непрерывного спектра). Ситуация, когда дискретный уровень взаимодействует с континуумом состояний, анализировалась в работе



**Рис. 30.** Спектр примесного поглощения для кремния, легированного бором, с концентрацией  $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  при температуре 20.4 К (из работы [57]). Символами  $2p'$  и  $3p'$  обозначены переходы дырок из основного состояния в  $2p$ - и  $3p$ -состояния спин-отщепленной зоны. Граница переходов в непрерывный спектр зоны  $\Gamma_8$  обозначена  $p_{3/2}$ , а в зону  $\Gamma_6$  —  $p_{1/2}$ .

Фано [40]. В этой работе был найден спектр вероятности дипольных переходов для случая, когда состояние дискретного спектра попадает в континуум. Поэтому результаты работы Фано можно непосредственно применять для описания наблюдаемых спектров.

Кроме того, в работе [57] были обнаружены дополнительные провалы в спектре примесного поглощения в Si:B ( $764 \text{ см}^{-1}$ ), Si:Al ( $962 \text{ см}^{-1}$ ) и Si:Ga ( $989 \text{ см}^{-1}$ ). Авторы отметили, что положение в спектре этих провалов с высокой точностью соответствует сумме энергии оптического фонона и энергии перехода  $1s_{3/2} - 2p_{3/2}$ . В этом случае роль резонансного состояния играет состояние дырки на одном из возбужденных уровней акцептора + оптический фонон.

Впоследствии резонансы Фано, соответствующие возбужденным состояниям акцепторов в кремнии, исследовались в спектрах фотопроводимости в работе [58]. Интересно отметить, что особенности в спектрах фотопроводимости имеют место даже в том случае, когда возбужденное состояние дырки является состоянием  $s$ -типа [59,60], прямые переходы из основного состояния акцептора в которые запрещены.

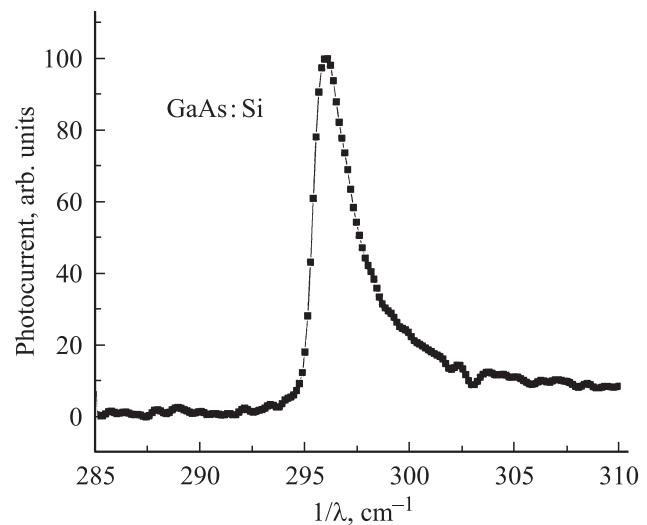
Резонансы Фано были обнаружены и в спектрах фотопроводимости в кремнии, легированном мелкими (P, Sb) [61] и глубокими донорами (S, Se, Te) [62]. В этих спектрах резонансы проявлялись также в виде провалов, однако они в отличие от  $p$ -Si были обусловлены не оптическими, а междолинными фононами. Поскольку таких фононов несколько, наблюдается серия резонансных провалов, связанных не только с основным состоянием донора, но и с возбужденными состояниями.

Удивительным экспериментальным фактом является обнаружение резонанса Фано в спектрах поглощения

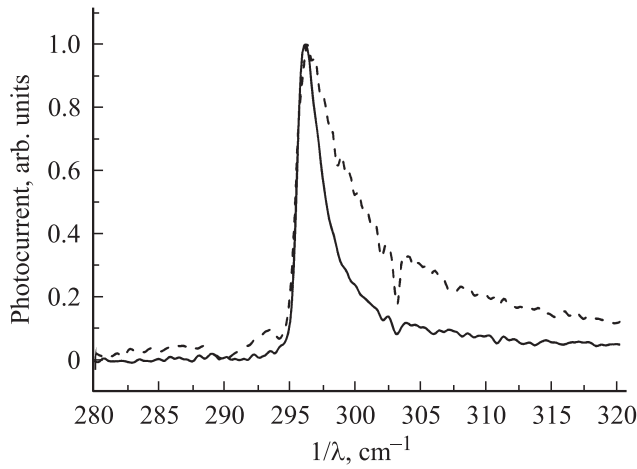
образцов сильно легированного  $p$ -Si (концентрации акцепторов изменялись в пределах от  $10^{18}$  до  $10^{20} \text{ см}^{-3}$ ) при комнатных температурах [63,64].

Резонансы Фано наблюдались в спектрах фотопроводимости также и полярных полупроводников. В работе [65] они были обнаружены в GaAs и InP, легированных мелкими донорами. Особенность этих материалов в том, что взаимодействие электронов происходит с полярными оптическими фононами. В отличие от кремния резонансы Фано проявляются в этих материалах как узкие пики в спектрах фотопроводимости (рис. 31). Резонансы Фано в  $n$ -GaAs, легированном кремнием, исследовались также в работе [66]. Следует отметить, что формы резонансных пиков в  $n$ -GaAs в работах [65] и [66] несколько отличаются друг от друга, что, вероятно, связано с фазовыми ошибками при фурье-преобразовании спектра в фурье-спектрометре. Отметим, что резонансы Фано наблюдались также в GaAs, легированном Mn [67], который является глубоким акцептором.

В работах [68,69] наблюдались особенности в спектрах примесной фотопроводимости (рис. 32), обусловленные резонансом Фано, в гетероструктурах GaAs/In<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.9</sub>As<sub>0.8</sub>P<sub>0.2</sub> с квантовыми ямами, легированных мелкими донорами (Si). Было обнаружено, что разброс в положении примеси слабо сказывается на ширине резонанса Фано, хотя и заметно уширяет линии, соответствующие переходам из основного состояния в возбужденные (например,  $1s - 2p$ ). В этих работах было показано, что ширина резонанса Фано увеличивается с уменьшением ширины квантовой ямы, что обусловлено уменьшением времени жизни резонансного состояния при уменьшении ширины квантовой ямы. Происходит это из-за увеличения силы взаимодействия электронов с оптическими фононами по мере уменьшения ширины квантовой ямы. Интересной, но пока еще не реали-



**Рис. 31.** Спектр примесного фототока арсенида галлия, легированного кремнием, в окрестности энергии оптического фонона (из работы [66]).



**Рис. 32.** Спектр примесного фототока объемного  $n$ -GaAs (сплошная линия) и гетероструктуры  $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}_{0.8}\text{P}_{0.2}/\text{GaAs}$  с квантовыми ямами  $90 \text{ \AA}$  (штриховая линия). Рисунок взят из работы [69].

зованной, является возможность исследования спектра оптических фононов в напряженных квантовых ямах с помощью измерения положения резонанса Фано. Данный метод позволяет обеспечить пространственное разрешение порядка боровского радиуса примеси, тогда как при комбинационном рассеянии пространственное разрешение определяется глубиной проникновения света. Как правило, глубина проникновения света более чем на порядок превосходит боровский радиус примеси. Кроме того, по ширине пика резонанса Фано можно судить о силе взаимодействия электронов с фононами в квантовой яме.

Обсудим теперь теоретические работы, посвященные описанию наблюдаемых особенностей в спектрах примесного поглощения и примесной фотопроводимости, обусловленные резонансами Фано. Как уже отмечалось выше, Воткинс и Фаулер [57] первыми применили теорию Фано для описания резонансов Фано в кремнии, легированном акцепторами. Однако в этой работе не была найдена правильная стационарная волновая функция дырки с энергией, близкой к резонансной. Кроме того, в то время еще не была создана теория для количественного описания волновых функций акцептора как в дискретном, так и непрерывном спектре.

В работе [70] была предпринята попытка создать общую теорию для описания резонансов Фано, обусловленных взаимодействием электронов с фононами. К сожалению, авторы не пытались объяснить или описать конкретные экспериментальные результаты, поэтому ими был выбран гамильтониан, не соответствующий экспериментально реализуемой ситуации. В выбранном гамильтониане отсутствовало важное слагаемое, описывающее взаимодействие электрона, находящегося в основном состоянии примеси, с оптическими фононами. Поэтому эта теория носит иллюстративный характер и не способна описать наблюдаемые спектры.

Наиболее простым случаем для описания является резонанс Фано в  $n$ -GaAs, поскольку волновые функции мелкого донора в этом материале хорошо известны. Однако попытка описания наблюдаемого резонанса Фано в спектре фотопроводимости  $n$ -GaAs и  $n$ -InP, предпринятая в работе [65], не является последовательной и верной. Авторы работ [66,69] добились неплохого согласования теории и эксперимента для  $n$ -GaAs, однако их подход является внутренне непоследовательным, поскольку они искусственно использовали теорию возмущений 2-го порядка.<sup>1</sup> Таким образом, можно утверждать, что последовательное количественное описание наблюдаемых резонансов Фано в спектрах поглощения и фотопроводимости полупроводников отсутствует в настоящее время.

В заключение этой части приведем важные моменты теории резонанса Фано для доноров в GaAs. Гамильтониан электрона, взаимодействующего с примесным атомом и продольными оптическими фононами, можно записать в виде

$$H = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\kappa_0 r} + \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}}^+ + V^*(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\omega_0 (b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + 1/2), \quad (23)$$

где

$$V(\mathbf{q}) = \frac{ie}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{V\bar{\kappa}}},$$

$\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{r}$  — операторы импульса и радиус-вектора электрона;  $\mu$  — масса электрона,  $\bar{\kappa} = \kappa_0\kappa_{\infty}/(\kappa_0 - \kappa_{\infty})$ ;  $\kappa_0$ ,  $\kappa_{\infty}$  — диэлектрические проницаемости кристалла на нулевой частоте и частоте, большей частоты оптического фонона  $\omega_0$ ;  $b_{\mathbf{q}}^+$ ,  $b_{\mathbf{q}}$  — операторы рождения и уничтожения продольного оптического фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$ ,  $V$  — объем кристалла.

Рассмотрим процесс поглощения фотона электроном, находящимся в основном состоянии донора. Пусть проекция углового момента фотона на ось  $z$  равна 1 (здесь и далее мы измеряем момент в единицах  $\hbar$ ). После поглощения фотона электрон оказывается в состоянии, в котором полный момент и его проекция на ось  $z$  равны 1. Для правильного нахождения вероятности поглощения фотона с энергией, близкой к энергии оптического фонона, необходимо учесть подмешивание к волновым функциям электрона в непрерывном спектре волновой функции состояния, в котором имеется один оптический фонон, а электрон находится в основном состоянии донора. Обозначим через  $|\varphi_{\mathbf{q}}\rangle$  волновую функцию этого состояния, а через  $E_{\varphi}$  его энергию. Отметим, что такое состояние является квазистационарным или резонансным, поскольку за счет электрон-фононного взаимодействия электрон может поглотить фонон и перейти в состояние непрерывного спектра.

<sup>1</sup> Авторы этого обзора выражают благодарность проф. А.М. Сатанину за указание этого факта.

Обозначим через  $|\psi(E)\rangle$  волновую функцию электрона с энергией  $E$ , имеющего полный момент и его проекцию на ось  $z$  равными 1. Эти состояния могут принадлежать как непрерывному, так и дискретному спектру. Будем полагать, что эти состояния нормированы следующим образом:  $\langle\psi(E)|\psi(E')\rangle = \delta(E - E')$ . Используя теорию Фано для случая взаимодействия одного континуума с несколькими резонансными состояниями (разд. 5 работы [40]), можно найти выражение волновой функции стационарного состояния с энергией  $E$ :

$$\Psi(E) = \sum_{\mathbf{q}} \left( a_{\mathbf{q}}(E) |\varphi_{\mathbf{q}}\rangle + \int b_{\mathbf{q}}(E, E') |\psi(E')\rangle dE' \right), \quad (24)$$

где

$$a_{\mathbf{q}}(E) = -\frac{V_{\mathbf{q}}^*(E)}{E - E_{\phi}} \cos(\Delta(E)), \quad (25)$$

$$b_{\mathbf{q}}(E, E') = -\left( \frac{V_{\mathbf{q}}(E')V_{\mathbf{q}}^*(E)}{(E - E')(E - E_{\phi})} + \delta(E - E') \right) \times \cos(\Delta(E)), \quad (26)$$

$$\text{tg}(\Delta(E)) = -\pi \sum_{\mathbf{q}} \frac{|V_{\mathbf{q}}(E)|^2}{E - E_{\phi}}, \quad (27)$$

$$V_{\mathbf{q}}(E) = \langle\varphi_{\mathbf{q}}|V(q) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r})|\psi(E)\rangle. \quad (28)$$

Интегрирование по  $E'$  в выражении (24) включает в себя и состояния дискретного спектра. Из (24) видно, что вблизи  $E = E_{\phi}$  волновая функция непрерывного спектра сильно изменяется из-за подмешивания к ней состояний  $|\varphi_{\mathbf{q}}\rangle$  и  $\psi(E')$  с другой энергией ( $E' \neq E$ ). Это обстоятельство является причиной появления особенности в спектре поглощения, когда конечное состояние электрона оказывается в этой области. Используя (24), можно найти матричный элемент дипольного перехода электрона из основного состояния  $|i\rangle$  в  $\Psi(E)$ :

$$\begin{aligned} \langle\Psi(E)|V_{\text{ph}}|i\rangle &= \sum_{\mathbf{q}} \int dE' b_{\mathbf{q}}^*(E, E') \langle\psi(E')|V_{\text{ph}}|i\rangle \\ &= \frac{V_{\text{ph}}(E)}{\sqrt{(E - E_{\phi})^2 + \Gamma(E)^2/4}} \\ &\times \left[ P \int dE' \frac{V_{\text{ph}}(E') \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(E) V_{\mathbf{q}}^*(E')}{V_{\text{ph}}(E)(E - E')} + (E - E_{\phi}) \right]. \quad (29) \end{aligned}$$

В формуле (29) используется обозначение

$$V_{\text{ph}}(E) = \langle\psi(E)|V_{\text{ph}}|i\rangle, \quad \Gamma(E) = 2\pi \sum_{\mathbf{q}} |V_{\mathbf{q}}|^2,$$

а символ  $P$  означает вычисление интеграла в смысле главного значения. В (29) можно из интеграла явно выделить области непрерывного и дискретного спектров.

Тогда (29) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \langle\Psi(E)|V_{\text{ph}}|i\rangle &= \frac{V_{\text{ph}}(E) \left[ P \int_0^{\infty} dE' \frac{V_{\text{ph}}(E') \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(E) V_{\mathbf{q}}^*(E')}{V_{\text{ph}}(E)(E - E')} + (E - E_{\phi}) \right]}{\sqrt{(E - E_{\phi})^2 + \Gamma(E)^2/4}} \\ &+ \frac{1}{\sqrt{(E - E_{\phi})^2 + \Gamma(E)^2/4}} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{\langle\psi_n|V_{\text{ph}}|i\rangle \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(E) V_{\mathbf{q}}^*(E_n)}{E - E_n}. \quad (30) \end{aligned}$$

В формуле (30)  $n$  обозначает главное квантовое число, а  $\psi_n$  волновую функцию состояния дискретного спектра с орбитальным и магнитным числом, равным 1, и энергией  $E_n$ . Вблизи резонанса, когда энергия конечного состояния близка к  $E_{\phi}$ , зависимость квадрата модуля матричного элемента перехода можно записать в виде [40]

$$|\langle\Psi(E)|V_{\text{ph}}|i\rangle|^2 = |V_{\text{ph}}(E_{\phi})|^2 \frac{|Q + \varepsilon|^2}{1 + \varepsilon^2}, \quad (31)$$

где  $\varepsilon = 2(E - E_{\phi})/\Gamma(E_{\phi})$  — безразмерная энергия, а безразмерный параметр  $Q$  (в работе Фано [40] для его обозначения используется символ  $q$ , который мы использовали для обозначения волнового вектора фонона) определяется выражением

$$\begin{aligned} Q &= \frac{2}{\Gamma(E_{\phi})V_{\text{ph}}(E_{\phi})} \left[ P \int_0^{\infty} dE' \frac{V_{\text{ph}}(E') \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(E_{\phi}) V_{\mathbf{q}}^*(E')}{(E_{\phi} - E')} \right. \\ &\left. + \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\langle\psi_n|V_{\text{ph}}|i\rangle V_{\mathbf{q}}(E_{\phi}) V_{\mathbf{q}}^*(E_n)}{E_{\phi} - E_n} \right]. \quad (32) \end{aligned}$$

Из (31) видно, что зависимость от энергии вероятности перехода вблизи резонанса определяется однопараметрической функцией

$$f(\varepsilon) = \frac{|Q + \varepsilon|^2}{1 + \varepsilon^2}.$$

Для водородоподобного донора  $Q$  является действительной положительной величиной, и выражение для нее может быть получено в квадратурах (необходимые для этого интегралы можно найти в работе [71]). Отметим также, что в этом случае  $Q$  не зависит от силы электрон-фононного взаимодействия и полностью определяется отношением энергии продольного оптического фонона к энергии ионизации донора. На рис. 33 изображены зависимости  $f(\varepsilon)$  для различных значений  $Q$ .

Для корректного нахождения спектров примесного поглощения и фотопроводимости в полярных полупроводниках в окрестности энергии оптического фонона важно принять во внимание зависимости коэффициента отражения и поглощения от энергии, поскольку в этой

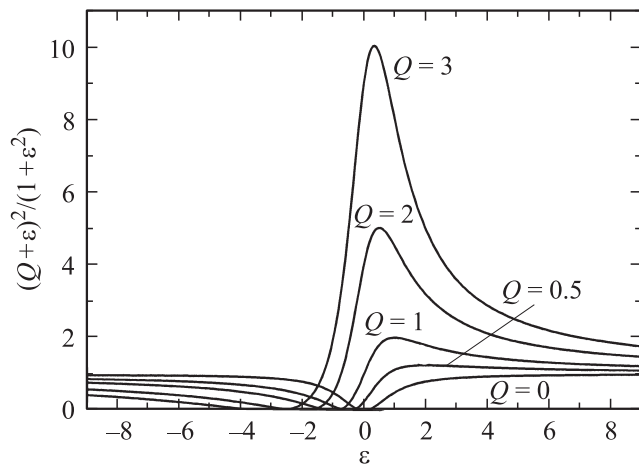


Рис. 33. Зависимости  $f(\varepsilon)$  для различных значений  $Q$  [40], указанных на рисунке.

области они быстро изменяются и могут оказать влияние на наблюдаемые спектры (подробное обсуждение этого вопроса можно найти в работах [66,69]). Например, для спектра фототока можно написать следующее выражение [69]:

$$J(\omega) = BI(\omega) \frac{W(\omega)}{|\mathcal{E}|^2} [1 - R(\omega)] \int_0^d \exp[-\eta(\omega)x] dx, \quad (33)$$

где  $B$  некоторая, не зависящая от частоты постоянная,  $I(\omega)$  — интенсивность падающего света,  $W(\omega)$  — вероятность перехода под действием электромагнитной волны с амплитудой  $\mathcal{E}$ ,  $R(\omega)$  — коэффициент отражения,  $d$  — толщина легированного слоя,  $\eta(\omega)$  — коэффициент решеточного поглощения. Зависимости  $R(\omega)$ ,  $\eta(\omega)$  вблизи энергии оптического фонона хорошо известны (см., например, [72]). Из-за резкого спада коэффициента отражения с ростом частоты при энергиях чуть больше энергии оптического фонона эти факторы приводят к более резкому спаду фототока на длинноволновом краю резонанса [66].

## 5. Заключение

В обзоре представлено современное положение дел в исследованиях локализованных и резонансных состояний мелких примесей в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами, состояний мелких акцепторов в деформированном германии и резонансных состояний, формируемых с участием оптических фононов (резонансов Фано). Проведенные исследования показывают возможность создания нового когерентного источника терагерцового излучения — лазера на резонансных состояниях.

Данный обзор авторы посвящают памяти В.И. Переля, который был инициатором его написания и принимал

живое участие во всем цикле теоретических работ, связанных с изучением примесных резонансных состояний и проводимых авторами обзора.

Авторы также выражают благодарность А.А. Андронову и Б.А. Андрееву за многочисленные полезные обсуждения данной работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 07-02-00549, 05-02-17341, 07-02-00315, 06-02-90082-ННФ-а), программы РАН и президиума РАН, поддержке ведущих научных школ, фондом Династия (грант для Л.В. Гавриленко и М.А. Оदनблюдова).

## Список литературы

- [1] В.Г. Голубев, В.И. Иванов-Омский, А.В. Осугин, Р.П. Сейсян, Ал.Л. Эфрос, Т.В. Язева. ФТП, **22**, 1416 (1988).
- [2] И.М. Цидильковский. УФН, **162**, 63 (1992).
- [3] В.И., Кайданов, Ю.И. Равич. УФН, **145**, 51 (1985).
- [4] A.K. Ramdas, S. Rodriguez. Rep. Progr. Phys., **44**, 100 (1981).
- [5] И.В. Алтухов, М.С. Каган, К.А. Королев, М.А. Оदनблюдов, В.П. Синис, Е.Г. Чиркова, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ, **115**, 89 (1999).
- [6] S. Fraizzoli, F. Bassani, R. Buczko. Phys. Rev. B, **41**, 5096 (1990).
- [7] S.T. Yen. Phys. Rev. B, **68**, 165 331 (2003).
- [8] Д.А. Варшавович, А.Н. Москалев, Д.К. Херсонский. *Квантовая теория углового момента* (М., Наука, 1975) гл. 5, с. 118.
- [9] R.L. Green, K.K. Bajai. Phys. Rev. B, **31**, 4006 (1985).
- [10] M. Helm, F.M. Peeters, F. DeRosa, E. Colas, J.P. Harbison, L.T. Florez. Phys. Rev. B, **43**, 13 983 (1991).
- [11] M. Braun, U. Rossler. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **18**, 3365 (1985).
- [12] R.M. Kolbas. PhD thesis (University of Illinois, Urbana-Champaign, 1979) unpublished; B.A. Vojak, W.D. Laidig, N. Holonyak, jr., M.D. Camras, J.J. Coleman, P.D. Dapkus. J. Appl. Phys., **52**, 621 (1981).
- [13] S. Chaudhuri, K.K. Bajaj. Phys. Rev. B, **29**, 1803 (1984).
- [14] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 4714 (1981).
- [15] C. Priester, G. Allan, M. Lanoo. Phys. Rev. B, **29**, 3408 (1984).
- [16] J.P. Locher, J. Singh. Phys. Rev. B, **41**, 3695 (1990).
- [17] C. Mailhot, Y.-C. Chang, C. McGill. Phys. Rev. B, **26**, 4449 (1982).
- [18] R.A. Faulkner. Phys. Rev., **184**, 713 (1969).
- [19] В.Я. Алешкин, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов. ЖЭТФ, **120**, 1495 (2001).
- [20] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М., Наука, 1971) гл. 7.
- [21] Н.А. Бекин. ФТП, **39**, 463 (2005).
- [22] В.Я. Алешкин, Л.В. Гавриленко. ЖЭТФ, **125**, 1340 (2004).
- [23] S.T. Yen. Phys. Rev. B, **66**, 075 340 (2002).
- [24] A. Blom, M.A. Oदनблюдов, I.N. Yassievich, K.A. Chao. Phys. Rev. B, **65**, 155 302 (2002).
- [25] I.N. Yassievich, A. Blom, A.A. Prokofiev, M.A. Oदनблюдов, K.A. Chao. Physica B, **308–310**, 1129 (2001).
- [26] A. Blom, M.A. Oदनблюдов, I.N. Yassievich, K.A. Chao. Phys. Rev. B, **68**, 65 338 (2003).

- [27] B.S. Monozon, P. Schmelcher. *Phys. Rev. B*, **71**, 085 302 (2005).
- [28] V.Ya. Aleshkin, L.V. Gavrilenko. *Proc. 12th Int. Symp.* (Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia, July 25–30, 2004) P. 103.
- [29] T.A. Perry, R. Merlin, B.V. Shanabrook. *J. Comas. Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2623 (1985).
- [30] L.E. Vorobjev, D.A. Firsov, V.A. Shalygin, V.Yu. Panevin, A.N. Safronov, V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, A.Yu. Egorov, A.V. Andrianov, A.O. Zakhar'in, S.D. Ganichev, S.N. Danilov, D.V. Kozlov. *Acta Physica Polon. A*, **113**, 925 (2008).
- [31] Л.Е. Воробьев и др. *Тез. докл. VIII Росс. конф. по физике полупроводников* (Екатеринбург, 2007) с. 340.
- [32] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1974).
- [33] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, M.S. Kagan, Yu.M. Galperin, K.A. Chao. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 644 (1999).
- [34] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, M.S. Kagan et al. *Phys. Rev. B*, **62**, 15 291 (2000).
- [35] M.A. Odnoblyudov, A.A. Prokofiev, I.N. Yassievich, K.A. Chao. *Phys. Rev. B*, **70**, 115 209 (2004).
- [36] М.А. Однблюдов, В.М. Чистяков, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **31**, 1180 (1997).
- [37] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, V.M. Chistyakov, K.A. Chao. *Phys. Rev. B*, **62**, 2486 (2000).
- [38] V.Ya. Aleshkin, A.V. Andreev, V.I. Gavrilenko et al. *Nanotechnology*, **11**, 348 (2000).
- [39] P.A.M. Dirac. *Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed. (Clarendon, Oxford, 1981).
- [40] U. Fano. *Phys. Rev.*, **124**, 1866 (1961).
- [41] М.А. Однблюдов, А.А. Прокофьев, И.Н. Ясиевич. *ЖЭТФ*, **121**, 692 (2002).
- [42] R. Buzcko. *Nuovo Cimento*, **9D**, 669 (1987).
- [43] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989).
- [44] А.А. Прокофьев, М.А. Однблюдов, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **35** (5), 586 (2001).
- [45] M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, M.S. Kagan, K.A. Chao. *Phys. Rev. B*, **63**, 201 204 (2001).
- [46] Yu.P. Gousev, I.V. Altukhov, K.A. Korolev, V.P. Sinis, M.S. Kagan, E.E. Haller, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich, K.A. Chao. *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 757 (1999).
- [47] Я.Б. Покровский, Н.А. Хвальковский. *ФТП*, **39**, 197 (2005).
- [48] Д.В. Козлов. *Письма ЖЭТФ*, **85**, 247 (2007).
- [49] А.В. Андрианов, А.О. Захарьин, И.Н. Ясиевич, Н.Н. Зиновьев. *Письма ЖЭТФ*, **79**, 448 (2004).
- [50] А.В. Андрианов, А.О. Захарьин, И.Н. Ясиевич, Н.Н. Зиновьев. *Письма ЖЭТФ*, **83**, 410 (2006).
- [51] V.A. Shaligin, L.E. Vorobjev, D.A. Firsov, V.Yu. Pavenin, A.N. Sofronov, A.V. Andrianov, A.O. Zakhar'in, A.Yu. Egorov, A.G. Glayshev, O.V. Bondarenko, D.V. Kozlov. *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 161 128 (2007).
- [52] A. Blom, M.A. Odnoblyudov, H.H. Cheng, I.N. Yassievich, K.A. Chao. *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 713 (2001).
- [53] I.V. Altukhov, E.G. Chirkova, V.P. Sinis, M.S. Kagan, Yu.P. Gousev, S.G. Thomas, K.L. Wang, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich. *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 3909 (2001).
- [54] A.A. Prokofiev, M.A. Odnoblyudov, I.N. Yassievich. *Towards the first silicon laser*, ed. by L. Pavesi, S. Gaponenko and L. Dal Negro (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2003).
- [55] М.С. Каган, И.В. Алтухов, В.П. Синис, Е.Г. Чиркова, И.Н. Ясиевич, Дж. Колодзей. *РЭ*, **48**, 1137 (2003).
- [56] H.J. Hrostowski, R.H. Kaiser. *J. Phys. Chem. Sol.*, **4**, 148 (1958).
- [57] G.D. Watkins, W.B. Fowler. *Phys. Rev. B*, **16**, 4524 (1977).
- [58] R. Baron, M.H. Young. *Sol. St. Commun.*, **47**, 167 (1983).
- [59] Б.Н. Андреев. Автореф. докт. дис. (Нижегород, 2004).
- [60] B.A. Andreev, A.V. Antonov, V.Y. Aleshkin, D.V. Kozlov. *Proc. 28th Int. Conf. Phys. Semicond.* (July 24–28, 2006, Vienna, Austria) P. 302.
- [61] M. Chandrasekhar, K.K. Bajaj, N. Sclar. *Sol. St. Commun.*, **54**, 287 (1985).
- [62] E. Janzen, G. Grossmann, R. Stedman, H.G. Grimmeiss. *Phys. Rev. B*, **31**, 8000 (1985).
- [63] A.W. Simonian, A.B. Sproul, Z. Shi, E. Gauja. *Phys. Rev. B*, **52**, 5672 (1995).
- [64] R. Gajic, D. Braun, F. Kuchar, A. Golubovic, R. Korntner, H. Loschner, J. Butschke, R. Springer, F. Letzkus. *J. Phys.: Condens. Matter*, **15**, 2923 (2003).
- [65] K. Jin, J. Zhang, Z. Chen et al. *Phys. Rev. B*, **64**, 205 203 (2001).
- [66] В.Я. Алешкин, А.В. Антонов, Л.В. Гавриленко, В.И. Гавриленко. *ЖЭТФ*, **128**, 822 (2005).
- [67] M. Linnarsson, E. Janzen, B. Monemar, M. Kleverman, A. Thilderkvist. *Phys. Rev. B*, **55**, 6938 (1997).
- [68] V.Ya. Aleshkin, A.V. Antonov, V.I. Gavrilenko, L.V. Gavrilenko, B.N. Zvonkov. *Proc. 13th Int. Symp. „Nanostructures: Physics and Technology“* (St. Petersburg, Russia, June 20–25, 2005) p. 378.
- [69] V.Ya. Aleshkin, A.V. Antonov, L.V. Gavrilenko, V.I. Gavrilenko. *Phys. Rev. B*, **75**, 125 201 (2007).
- [70] A.P. Jauho, P. Minnhagen. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **17**, 4369 (1984).
- [71] В.Я. Алешкин, А.В. Антонов, В.И. Гавриленко, Л.В. Гавриленко, Б.Н. Звонков. *ФТТ*, **50**, 1162 (2008).
- [72] П.Ю. Кардона. *Основы физики полупроводников* (М., Физматлит, 2002) гл. 6, с. 268.

Редактор Т.А. Полянская

## Resonant impurity states in semiconductors

V.Ya. Aleshkin, V.I. Gavrilenko, M.A. Odnoblyudov\*, I.N. Yassievich\*

Institute for Physics of Microstructures,  
Russian Academy of Sciences,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia  
\* Ioffe Physicotechnical Institute,  
Russian Academy of Sciences,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Up-to-day review of investigations concerning donor and acceptor localized and resonant states in lowdimensional structures, as well as resonant acceptor states in strained semiconductors is given. A discussion of resonant optical transitions involving optical phonons is also presented. We analyze different approaches in the theory of resonant states and also give a review of experimental data.