

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МИКРОСТРУКТУР

*На правах рукописи*

КОЗЛОВ Дмитрий Владимирович

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И РЕЗОНАНСНЫЕ СОСТОЯНИЯ МЕЛКИХ  
АКЦЕПТОРОВ В НАПРЯЖЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕ-  
РОСТРУКТУРАХ И ОДНООСНО ДЕФОРМИРОВАННОМ ГЕРМА-  
НИИ**

05.27.01 – твердотельная электроника,  
радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника,  
приборы на квантовых эффектах

01.04.10 - физика полупроводников

**Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук**

Научные руководители:

Доктор физико-математических наук

В.И.ГАВРИЛЕНКО

Доктор физико-математических наук

В.Я.АЛЕШКИН

Нижний Новгород

2003 г.

## Содержание

<b>Введение</b>	<b>4</b>
<b>Глава1. Мелкие акцепторы в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs</b>	
1.1. Расчеты спектра мелких примесей в гетероструктурах с квантовыми ямами (обзор литературы)	12
1.2. Метод расчета энергетических уровней акцепторов в напряженных структурах с использованием гамильтониана Латтинжера $4 \times 4$	20
1.3 Спектры фотопроводимости гетероструктур	35
<b>Глава2. Квазистационарные (резонансные) состояния в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs с квантовыми ямами</b>	
2.1 Поглощение света, связанное с резонансными состояниями примеси	42
2.2 Структура волновых функций акцепторных состояний, относящихся к различным подзонам размерного квантования, в гетероструктурах с квантовыми ямами	51
2.3 Наблюдение в спектрах фотопроводимости гетероструктур линий, обусловленных квазистационарными состояниями	56
<b>Глава3. Резонансные состояния мелких акцепторов в одноосно деформированном германии</b>	
3.1 Локализованные и резонансные состояния мелких акцепторов в Ge и Si	65
3.2 Вариационные расчеты состояний мелкого акцептора в одноосно деформированном германии	79

3.3 Метод расчета локализованных и резонансных состояний в одноосно деформированном германии	89
3.4 Фотопроводимость одноосно деформированного германия и твердого раствора GeSi	110
<b>Глава 4. Акцепторы в гетероструктурах Si/SiGe с квантовыми ямами</b>	
4.1 Мелкие акцепторы в структурах на основе Si и GeSi	122
4.2 Расчет спектра мелких акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe	127
4.3 Оценка химического сдвига для акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe	132
<b>Заключение</b>	<b>135</b>
<b>Приложение 1: Угловая зависимость коэффициентов разложения по функциям свободных частиц в аксиальном приближении</b>	<b>138</b>
<b>Приложение 2: О численном решении интегрального уравнения (1.22) для нахождения акцепторного спектра</b>	<b>140</b>
<b>Литература</b>	<b>142</b>
<b>Список работ автора по теме диссертации.</b>	<b>148</b>

## Введение

В настоящее время наблюдается устойчивый интерес к мелким примесям в полупроводниковых гетероструктурах. Гетероструктуры с квантовыми ямами и напряженными слоями являются искусственно созданным материалом, который позволяет расширить возможности традиционно используемых в оптоэлектронике материалов. Такие структуры представляют значительный интерес для оптоэлектроники, в частности для создания детекторов для дальнего инфракрасного (ИК) диапазона длин волн, работающих на переходах между примесными центрами в гетероструктурах, благодаря возможности перестраивать спектр носителей заряда, варьируя параметры структур и тем самым подбирая полосу чувствительности создаваемого приемника. В настоящее время наиболее изученными являются состояния мелких примесей в гетеросистемах *n*-типа [1-5]. Известен ряд работ, посвященных расчетам спектров акцепторов в гетероструктурах GaAs/AlGaAs и InGaAs/GaAs различными вариационными методами [6-9].

В последнее время значительный интерес к мелким акцепторам в полупроводниках, в частности, к их резонансным состояниям, связан с обнаружением стимулированного длинноволнового ИК излучения в одноосно сжатом *p*-Ge [10-15] и в гетероструктурах SiGe/Si:B с квантовыми ямами [16-18] при приложении сильного электрического поля при гелиевых температурах.

Стимулированное излучение в одноосно деформированном Ge авторы [10-15] объясняют переходами дырок из инверсно-заселенного резонансного состояния в локализованные акцепторные состояния в запрещенной зоне. В одноосно деформированном *p*-Ge резонансные (или квазистационарные) состояния акцепторов возникают из-за расщепления подзон легких и тяжелых дырок при достаточно больших деформациях, когда примесные уровни, относящиеся к верхней отщепленной подзоне, попадают в непрерывный спектр энергий нижней подзоны. Другой важный пример квазистационарных состояний в полупроводниках – метастабильные состояния примеси, возникающие в гетероструктурах с квантовыми ямами. В таких структурах примесные уровни, связанные с 2-ой, 3-ей и т.д. подзонами размерного квантования могут попасть в область непрерывного спектра энергий 1-ой подзоны. Стимулированное длинноволновое ИК излучение в гетероструктурах SiGe/Si авторы [16-18] также связывают с переходами между резонансными и локализованными уровнями бора, помещенного в квантовые ямы этих гетероструктур.

**Целью диссертационной работы** является развитие моделей и метода расчета локализованных и квазистационарных (резонансных) состояний мелких акцепторов в на-

пряженных полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами и одноосно деформированном Ge, интерпретация наблюдаемых спектров примесной проводимости.

Это включает в себя решение следующих основных задач:

- развитие численного метода расчета спектра акцептора в напряженных полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами и деформированном алмазоподобном полупроводнике с помощью разложения волновой функции по состояниям рассчитанным, в отсутствие примесного центра;
- расчет энергий, волновых функций и времен жизни квазистационарных состояний мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs с различными параметрами и одноосно сжатом Ge;
- вычисление матричных элементов дипольно-оптических переходов с основного уровня акцептора на локализованные и резонансные уровни и в состояния непрерывного спектра; расчет фотопроводимости гетероструктур с квантовыми ямами и деформированного Ge, интерпретации наблюдаемых в этих материалах спектральных особенностей.

**Научная новизна работы** заключается в том, что в диссертации:

1. развит и впервые последовательно реализован (применительно к гетероструктурам Ge/GeSi, Si/SiGe, InGaAs/GaAs) предложенный в работе [9] численный метод расчета спектра мелких акцепторов в гетероструктурах с квантовыми ямами, основанный на разложении акцепторной волновой функции по базису из волновых функций свободных дырок в квантовых ямах;
2. впервые изучена зависимость спектров мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и Si/SiGe от параметров структур (ширины квантовой ямы, состава твердого раствора, деформации слоев) и от положения примесного иона;
3. впервые проведены расчеты химического сдвига энергии связи акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe для различного положения иона примеси в структуре;
4. впервые рассчитаны спектры примесной фотопроводимости в гетероструктурах Ge/GeSi, InGaAs/GaAs с учетом оптических переходов на резонансные состояния акцепторов, связанные с верхними подзонами размерного квантования;
5. развитый численный метод расчета состояний акцепторов обобщен на случай объемного полупроводника, что позволило провести исследование резонансных состояний мелких акцепторов и впервые рассчитать спектр фотопроводимости с учетом переходов на резонансные состояния и в верхнюю отщепленную подзону в одноосно деформированном германии.

**Научная и практическая значимость работы** заключается в детальном исследовании акцепторов в напряженных полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами и резонансных состояний акцепторов в деформированном германии. Разработанный в диссертации метод расчета состояний мелких примесей и полученные результаты могут быть использованы для создания генераторов и детекторов излучения дальнего инфракрасного диапазона.

Содержание работы.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, приложений и списка литературы.

**Во введении** показана актуальность темы исследования, его цель и научная новизна. Приводится краткое содержание диссертации, а также сформулированы положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** посвящена локализованным состояниям мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs. В первой части главы дан обзор работ, посвященных исследованию мелких примесей в гетероструктурах GaAs/AlGaAs и InGaAs/GaAs.

Во второй части главы 1 представлен численный метод расчета мелких акцепторов в гетероструктурах. Спектры акцепторов в квантовых ямах в гетероструктурах рассчитывались в рамках приближения эффективной массы. Использовался гамильтониан  $4 \times 4$ , представляющий собой сумму гамильтониана Латтинжера, потенциальной энергии дырки в прямоугольной квантовой яме, члена, описывающего эффекты деформации, и энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором. Использовалось аксиальное приближение, т.е. закон дисперсии дырок полагался изотропным в плоскости квантовой ямы. Для этого в недиагональных элементах гамильтониана Латтинжера были опущены слагаемые, пропорциональные  $(\gamma_2 - \gamma_3)$  ( $\gamma_2, \gamma_3$  - параметры Латтинжера). В аксиальном приближении сохраняется проекция полного момента  $J$  на нормаль к квантовой яме, и спектр акцептора оказывается двукратно вырожденным по знаку этой проекции. Волновая функция акцептора разлагалась по базису из огибающих волновых функций свободных дырок в квантовой яме, которые являются собственными функциями гамильтониана в отсутствие кулоновского потенциала: Подставляя это разложение в уравнение эффективной массы, получаем интегральное уравнение для коэффициентов разложения. Далее интеграл может быть заменен дискретной суммой; тем самым, задача о расчете акцепторного спектра сводится к диагонализации конечномерной эрмитовой матрицы.

В работе проведены расчеты спектра акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs. Показано, что эффекты размерного квантования могут уменьшать энергию ионизации акцепторов. Так в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ , эквивалентное

напряжение одноосного растяжения  $P_{\text{equiv.}} = 4$  кбар) энергия связи акцептора в центре квантовой ямы гетероструктуры оказывается 6.3 мэВ, в то время как в объемном Ge при такой же деформации – 7 мэВ. Встроенная деформация слоев квантовых гетероструктур также приводит к уменьшению энергии ионизации акцепторов. Сочетание размерного квантования и деформации приводит к тому, что энергия ионизации мелких акцепторов в гетероструктурах значительно уменьшается по сравнению с энергией ионизации в объемных полупроводниках. Так в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> ( $d_{\text{QW}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $P_{\text{equiv.}} = 4$  кбар) энергия связи акцептора, помещенного в центр квантовой ямы составляет 7.3 мэВ при энергии ионизации мелкого акцептора в объемном германии около 9.8 мэВ. При перемещении иона акцептора в барьер сохраняются связанные акцепторные состояния под нижней подзоной размерного квантования. Такие состояния являются состояниями дырок, находящихся в квантовой яме и взаимодействующих с примесным ионом, помещенным в барьер. Энергия ионизации состояний акцептора, помещенного в центр барьера (В) для гетероструктур Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> ( $x = 0.1 \div 0.12$ ,  $d_{\text{QW}} = 200 \div 350 \text{ \AA}$ ,  $d_{\text{B}} = 200 \text{ \AA}$ ) составляет 1.8-2.2 мэВ, что примерно в 4 раза меньше энергии ионизации акцептора в центре квантовой ямы аналогичных структур. Получено хорошее согласие результатов расчета энергии ионизации акцептора в гетероструктурах InGaAs/GaAs с данными, полученными из измеренной с помощью метода Холла температурной зависимости концентрации носителей и из экспериментов по фотолюминесценции.

В заключительной части главы 1 представлены расчеты спектров фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi в сравнении с экспериментальными данными. Сопоставление результатов расчета с наблюдаемыми спектрами фотопроводимости позволило оценить распределение акцепторов по квантовой яме, в частности сделать вывод о том, что акцепторы могут в значительной мере концентрироваться вблизи гетерограниц.

**Вторая глава** посвящена исследованию квазистационарных состояний акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs.

В первой части главы 2 рассматриваются особенности волновых функций квазистационарных состояний и поглощения света полупроводниками, связанные с наличием квазистационарных состояний. Приведены примеры наблюдения в спектрах примесного поглощения в дальнем ИК диапазоне линий, связанных с переходами на квазистационарные состояния.

Во второй части главы 2 рассмотрена структура волновых функций состояний акцепторов, относящихся к различным подзонам размерного квантования. Рассмотрены условия возникновения резонансных акцепторных состояний в гетероструктуре с квантовыми ямами.

В третьей части главы 2 представлены расчеты спектров фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi и InGaAs/GaAs. Показано, что наблюдаемые особенности в коротковолновой области спектра фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi (линии соответствующие 18-20 мэВ) и спектра поглощения гетероструктур GaAs/InGaAs (линия соответствующая 37 мэВ) обусловлены переходами на квазистационарные энергетические уровни, связанные с верхними подзонами размерного квантования.

**Третья глава** посвящена исследованию квазистационарных состояний мелких акцепторов в одноосно деформированном германии.

В первой части главы 3 дан обзор работ, посвященных исследованию локализованных и резонансных состояний в алмазоподобных полупроводниках (Ge и Si). Описаны методы, использовавшиеся для расчетов резонансных состояний. Представлены данные по наблюдению в спектре фотопроводимости кремния линий, связанных с переходами на квазистационарные состояния акцепторов, относящиеся к спин-отщепленной подзоне и данные по наблюдению стимулированного длинноволнового инфракрасного излучения в одноосно сжатом p-Ge в сильном электрическом поле, связываемого с переходами между резонансными и локализованными состояниями.

Во второй части главы 3 представлены вариационные расчеты спектра мелких акцепторов в одноосно деформированном германии. Результаты расчета применимы для описания спектров фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi с широкими квантовыми ямами ( $d_{\text{Ge}} \approx 800 \text{ \AA}$ ).

В третьей части главы 3 представлен обобщенный на случай объемного полупроводника численный метод расчета состояний мелких акцепторов, основанный на разложении акцепторной волновой функции по базису из волновых функций свободных дырок. В работе этим методом были определены энергии, времена жизни и волновые функции квазистационарных состояний акцепторов в одноосно деформированном германии. Проведенный для проверки точности метода расчет энергии основного и нескольких возбужденных состояний мелкого акцептора в недеформированном германии показывает, что расхождение теоретических и экспериментальных данных составляет 12% для основного состояния и 7.5% для возбужденного состояния  $2\Gamma_8^+$ , в то время как для других возбужденных состояний расхождение результатов расчета и эксперимента находится в пределах 4-5%.

Четвертая часть главы 3 посвящена изучению спектров примесной фотопроводимости одноосно сжатого германия.

Развитый численный метод расчета акцепторных состояний в деформированном германии (как и в случае гетероструктур) позволяет находить волновые функции, как локализованных состояний, так и состояний, попадающих в непрерывный спектр, что сделало возможным расчет вероятностей дипольно-оптических переходов между примесными уровнями вне рамок борновского приближения. Спектр фотопроводимости был рассчитан методом, использованным в первой главе для расчета спектра фотопроводимости гетероструктур.

Расчет спектра фотопроводимости одноосно сжатого германия, показал, что коротковолновая полоса, начинающаяся около  $150 \text{ см}^{-1}$ , связана с переходами верхнюю дырочную подзону, отщепленную давлением. Интенсивность переходов в резонансные состояния в 2.5–3 раза меньше интенсивности переходов в непрерывный спектр второй подзоны, из-за этого линии, соответствующие переходам в резонансные состояния, в наблюдаемом спектре фотопроводимости теряются в шумах.

Разработанный метод расчета спектра фотопроводимости объемного деформированного алмазоподобного полупроводника был применен для изучения устройств, предназначенных для детектирования излучения дальнего инфракрасного диапазона. В работе была изучена возможность создания фотоприемника с заблокированной проводимостью по примесной зоне (Blocked Impurity Band detector: BIB) на основе напряженного  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ , выращенного на подложке Ge, более длинноволнового, чем германиевый приемник. Расчет показал, что основной максимум фотопроводимости BIB-структуры из напряженного  $\text{Ge}_{0.95}\text{Si}_{0.05}$  смещается в длинноволновую область по сравнению со структурой на основе Ge примерно на 2.2 мэВ. Таким образом, использование BIB-структур на основе напряженного твердого раствора  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$  позволяет расширить рабочий диапазон чувствительности приемника в область  $\lambda > 200 \text{ мкм}$ . Как следует из работы [19] при использовании оптимальной технологии на подложке Ge можно вырастить слой  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$  толщиной 6 мкм (что соответствует размерам обычно используемых BIB-структур на основе Ge), если доля кремния в растворе не будет превышать 0.05.

**Четвертая глава** посвящена исследованию состояний акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe.

В первой части главы 4 дан обзор работ, посвященных зонной структуре гетероструктур Si/SiGe и приближенным расчетам спектра мелких акцепторов в такой структуре

Во второй части главы 4 представлен модифицированный численный метод расчета спектра акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe, учитывающий спин-отщепленную подзону и эффекты анизотропии. Проведен расчет зависимости энергии мелких акцепторных

уровней в гетероструктурах Si/SiGe от ширины квантовых ям и от состава твердого раствора. Показано, что зависимость энергии ионизации акцептора от ширины квантовой ямы является немонотонной и минимум реализуется при ширине квантовых ям около 150 Å.

В третьей части главы 4 сделаны оценки химического сдвига для энергий  $s$  – подобных состояний акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe. Расчет показывает, что химический сдвиг значителен для акцепторов в центре квантовой ямы (около 12 мэВ для бора), но оказывается незначительным для примеси на гетероинтерфейсе (меньше 1 мэВ для бора). Этот эффект связан с уменьшением амплитуды волновой функции акцептора в месте расположения примесного иона при приближении этого иона к гетерогранице.

В **Заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Энергия ионизации мелких акцепторов в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi и Si/SiGe с квантовыми ямами из-за эффектов размерного квантования и встроенной деформации оказывается меньше энергии связи в объемных Ge и Si, соответственно. Энергия связи акцепторов существенно убывает при смещении иона примеси из центра квантовой ямы к гетерогранице (для квантовых ям, ширина которых превышает масштаб локализации волновой функции основного состояния) и остается конечной при перемещении иона примеси в квантовый барьер.
2. Химический сдвиг для основного состояния мелких акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe максимален при расположении примесного иона в центре квантовой ямы и оказывается незначительным для примеси на гетероинтерфейсе.
3. В спектрах поглощения и фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi и GaAs/InGaAs наблюдаются оптические переходы с основного состояния мелких акцепторов на квазистационарные состояния, связанные с верхними подзонами размерного квантования.
4. Нижнее квазистационарное состояние мелкого акцептора в одноосно сжатом германии происходит из возбужденного состояния  $4\Gamma_8^+$  с энергией связи 1.3 мэВ (в отсутствие деформации), а не из основного состояния  $1\Gamma_8^+$ , как полагалось ранее. Верхнее отщепившееся от основного уровня состояние не испытывает антипересечений и не выходит в непрерывный спектр с ростом деформации. Нижнее квазистационарное состояние выходит в непрерывный спектр при давлении  $P = 0.4$  кбар для сжатия вдоль оси [001] и при  $P = 0.6$  кбар для сжатия вдоль оси [111].

5. В спектре длинноволновой ИК фотопроводимости одноосно сжатого германия при низких температурах наблюдается коротковолновая полоса, связанная с переходами с основного состояния акцепторов в верхнюю дырочную подзону, отщепленную давлением, интенсивность которой на порядок меньше интенсивности полосы, связанной с переходами в нижнюю подзону. Интенсивность переходов в связанные с верхней подзоной квазистационарные состояния акцепторов примерно в три раза меньше интенсивности переходов в непрерывный спектр верхней подзоны.

Основные результаты диссертации докладывались на III – V Российских конференциях по физике полупроводников (Москва, 1997; Новосибирск, 1999; Н.Новгород, 2001), 6-ом, 8-ом и 10-ом Международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (С.Петербург, 1998, 2000, 2002), 24-ой и 25-ой Международных конференциях по физике полупроводников (Иерусалим, 1998; Осака, 2000), 8-ой и 10-ой Международных конференциях по мелким центрам в полупроводниках (Монпелье, 1998; Варшава, 2002), 9-ой и 10-ой Международных конференциях по модулированным полупроводниковым структурам (Фукуока, 1999; Линц, 2001), 26-ой Международной конференции по инфракрасным и миллиметровым волнам (Тулуза, 2001), Совещаниях “Нанопотоника” (Н.Новгород, 1999 – 2002), Совещании “Наноструктуры на основе кремния и германия” (Н.Новгород, 1998), Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике, (С.Петербург, 1999), а также на семинарах ИФМ РАН.

По теме диссертации опубликовано 35 печатных работ [А1-А35], в том числе 10 статей в научных журналах и 25 публикаций в сборниках тезисов докладов и трудов конференций, симпозиумов и совещаний.

# Глава 1. Мелкие акцепторы в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs

## 1.1. Расчет спектра мелких примесей в гетероструктурах с квантовыми ямами (обзор литературы)

### 1.1.1. Мелкие доноры в гетероструктурах

Интерес к исследованию мелких примесей в полупроводниковых гетероструктурах с квантовыми ямами возник одновременно с созданием таких структур. Наличие пространственного ограничения волновой функции мелкого примесного центра, помещенного в квантовую яму, ширина которой меньше или сравнима с характерным масштабом локализации волновой функции примеси, оказывает существенное влияние на энергетический спектр примесного центра. Наиболее подробно изучены мелкие примеси в ненапряженной гетеросистеме GaAs/AlGaAs [1-8,20,21]. Переход GaAs - Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As является гетеропереходом первого рода (для  $x < 0.45$ ), поэтому в слоях GaAs реализуются квантовые ямы и для электронов и для дырок. Рассмотрим влияние пространственного ограничения на спектр примеси на примере мелких доноров в такой гетероструктуре. Известно, что спектр мелких примесных состояний зависит от структуры зоны, вблизи которой эти состояния находятся. Для электронов в объемном GaAs реализуется простейший случай простой изотропной зоны, поэтому спектр доноров в GaAs является водородоподобным. В гетероструктуре на спектр донора, находящегося в слое GaAs оказывает существенное влияние наличие барьеров, которые ограничивают огибающую волновую функцию. Изменение спектра энергетических уровней донора при уменьшении ширины квантовой ямы теоретически исследовалось в работах [1-4].

Для расчета энергетического спектра донора в работах [1-4] использовались различные вариационные методы. В этих работах были рассчитаны энергии основного, а также возбужденных  $2s$  и  $2p$  состояний. Решалось уравнение Шредингера с гамильтонианом

$$H = -\frac{\hbar}{2m}(\Delta_{\perp} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) + V(z) - \frac{e^2}{\chi\sqrt{\rho^2 + (z - z_i)^2}}, \quad (1.1)$$

где  $V(z)$  – потенциальная энергия электрона в гетероструктуре, полагающаяся равной  $V_0$  в барьере и нулю в квантовой яме,  $\chi$  - диэлектрическая проницаемость GaAs.

В работах [1,2] волновая функция выбиралась в виде

$$\Psi(z, \rho, \varphi) = f_n(z)F(z, \rho, \varphi), \quad (1.2)$$

где  $f_n(z)$  является собственной функцией гамильтониана

$$H_0 = -\frac{\hbar}{2} \frac{1}{m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z), \quad (1.3)$$

т.е. собственной функцией свободной дырки в квантовой яме при  $\mathbf{k}_\perp = 0$ , относящейся к  $n$ -ной подзоне размерного квантования (для основного состояния, а также для состояний  $2s$  и  $2p_\pm$ ). Функция  $F(z, \rho, \varphi)$  в работах [1,3] искалась в виде разложения по водородоподобным функциям. Вариационными параметрами являлись масштаб локализации функций и коэффициенты разложения.

Результаты вариационного расчета, полученные в работе [1], представлены на рисунке 1.1, который иллюстрирует влияние пространственного ограничения на спектр состояний доноров в центре квантовой ямы гетероструктуры GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As. Видно, что энергия связи мелкого донора возрастает с уменьшением ширины ямы. Этот эффект связан с пространственным ограничением волновой функции барьерами, такое ограничение приводит к дополнительной локализации волновой функции около примесного иона и, тем самым, к увеличению энергии связи по сравнению с объемным полупроводником. Отметим также, что состояние  $2p_0$  оказывается связанным со второй подзоной размерного квантования и, согласно [1,2], выходит в континуум первой подзоны (пересекает пунктирную линию на рис.1.1) при ширине ямы равной 700 Å. Состояния  $2p_\pm$  и  $2s$  оказываются под нижним уровнем размерного квантования и в пределе бесконечно узких ям (двумерный водородоподобный спектр) формируют первое возбужденное состояние.

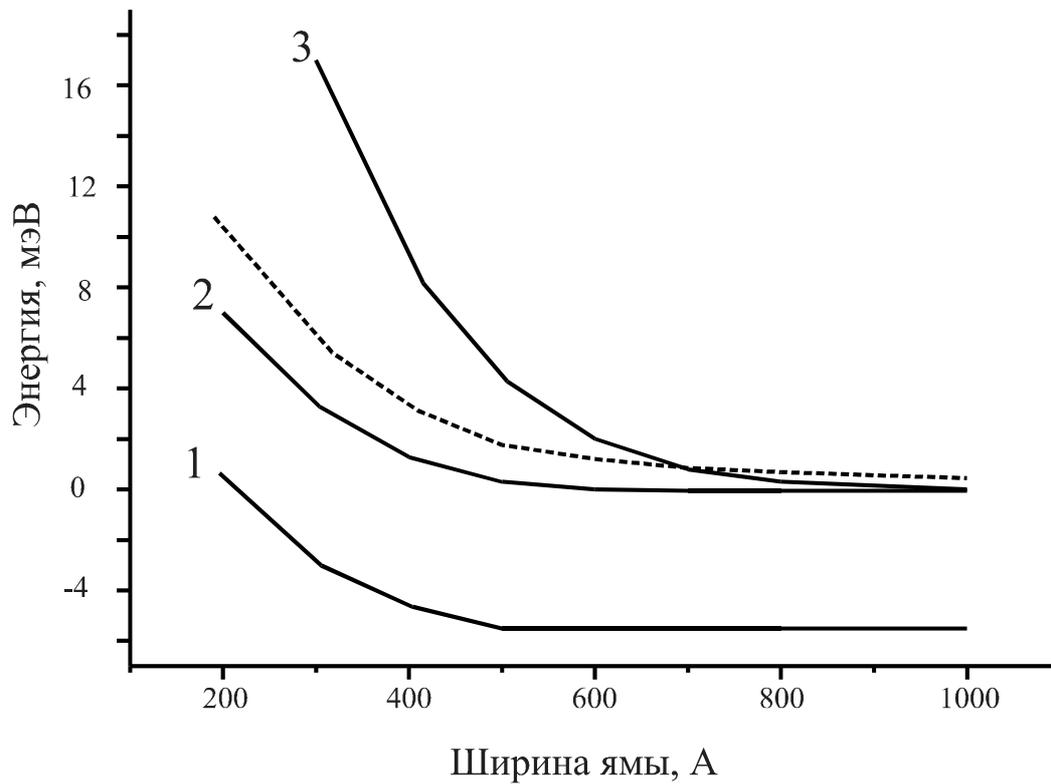


Рис.1.1. Зависимость энергий основного и нескольких возбужденных состояний мелких доноров в центре квантовой ямы в гетероструктуре GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As с шириной барьера 50 Å от ширины квантовой ямы (из работы [1]). Линия 1 – основное состояние, линия 2 –  $2p_{\pm}$  состояние, линия 3 – состояние  $2p_0$ , связанное со второй подзоной размерного квантования. Пунктирная линия показывает положение края нижней подзоны.

### 1.1.2. Спектр мелких акцепторов в ненапряженных полупроводниковых структурах GaAs/AlGaAs

Нахождение спектра мелкого акцептора представляет более трудную задачу по сравнению со случаем донорного центра из-за сложного закона дисперсии в валентной зоне. Основное состояние мелкого акцептора в GaAs преобразуется по представлению  $\Gamma_8^+$  группы  $O^h$  (такой симметрией обладает гамильтониан Латтинжера, используемый для описания дырок) и является четырехкратно вырожденным. При наложении потенциала квантовой ямы представление  $\Gamma_8^+$  распадается на два неприводимых представления, каждому из которых соответствует двукратно вырожденное состояние мелкого акцептора, отщепившееся от четырехкратно вырожденного. Расчёты энергий состояний акцептора, отщепившихся от основного в GaAs, в ненапряженных гетероструктурах GaAs/AlGaAs, были выполнены вариационным методом в работе [22]. В работах [6,7] также вариационным методом были проведены расчеты энергии нижних возбуждённых нечетных состояний акцепторов в гетероструктурах GaAs/AlGaAs. Нужно отметить, что в работах [6,7] было использовано аксиальное приближение, т.е. авторы пренебрегли анизотропией закона дисперсии дырок в плоскости роста структуры. В этом приближении сохраняется проекция полного момента  $J$  на нормаль к квантовой яме, и состояние акцептора может быть охарактеризовано таким квантовым числом. Основное состояние соответствует проекция полного момента  $J = \pm 3/2$  (в единицах  $\hbar$ ).

Так же как и в случае доноров, эффекты пространственного ограничения волновой функции оказывают влияние на энергетический спектр акцепторов в структурах GaAs/AlGaAs [6,7]. Однако в случае акцепторной примеси влияние такого ограничения носит двойственный характер. С одной стороны, ограничение приводит к дополнительной локализации волновой функции около примесного иона и, тем самым, увеличивает энергию связи по сравнению с объемным полупроводником, как и в случае доноров. С другой стороны, размерное квантование приводит к расщеплению подзон легких и тяжелых дырок и к уменьшению как эффективной массы носителей, так и энергии связи акцептора. “Тяжелые” в направлении роста структуры подзоны имеют легкую массу в плоскости квантовой ямы (около дна подзон). Закон дисперсии дырок в плоскости квантовой ямы оказывается непараболическим: эффективная масса дырок увеличивается при отступлении от дна подзоны из-за взаимодействия подзон. Уменьшение размеров ямы приводит к уменьшению такой непараболичности, и тем самым «средняя» эффективная масса дырок в нижней подзоне уменьшается, что должно приводить к уменьшению энергии ионизации. Рисунки 1.2 и 1.3 представляют зависимости энергии основного и нескольких возбужден-

ных уровней акцепторов в гетероструктуре GaAs/AlGaAs, расположенных в центре квантовой ямы (рис. 1.2) и на гетерогранице (рис. 1.3), от ширины квантовой ямы [6]. На рисунках показано, как энергия связи возрастает при уменьшении ширины квантовой ямы от 200 Å до 25 Å. Видно, что при этом энергия ионизации акцептора, расположенного на гетерогранице возрастает сильнее (в 4 раза), чем энергия связи акцептора, расположенного в центре квантовой ямы (в 2 раза). Очевидно, это связано с меньшим влиянием на спектр акцептора на гетероинтерфейсе второго квантового барьера при большой ширине ямы.

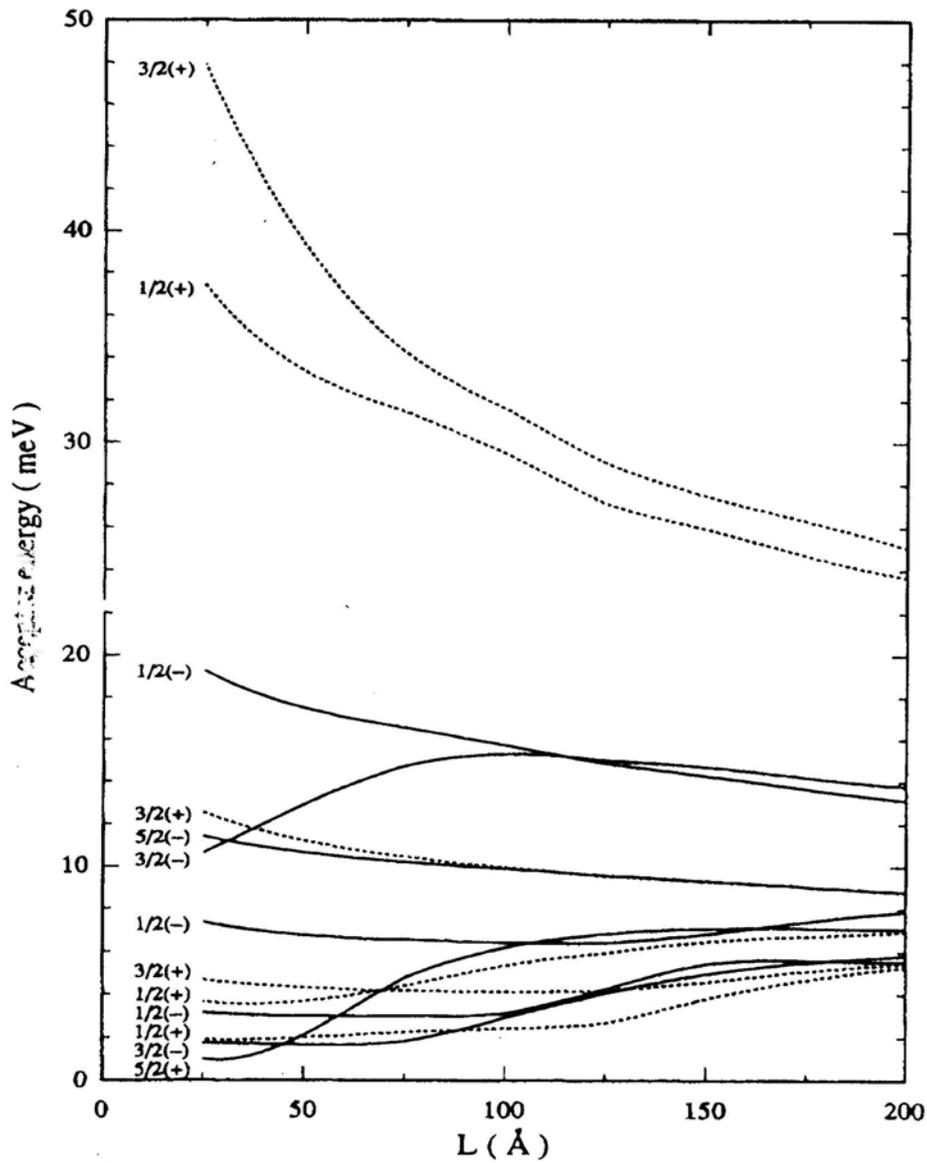


Рис.1.2. Энергии состояний акцептора, помещенного в центр квантовой ямы гетеро-структуры GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As, в зависимости от ширины ямы[6]. Энергия отсчитывается от вершины нижней подзоны размерного квантования. Слева указаны значение проекции полного момента на ось роста структуры (в единицах  $\hbar$ ) и четность волновой функции акцепторного состояния. Пунктирные линии соответствуют состояниям с типом симметрии, соответствующим двум нижним уровням ( $J = \pm 3/2$  и  $\pm 1/2$ , четные). Сплошные линии представляют состояния акцепторов с другой симметрией.

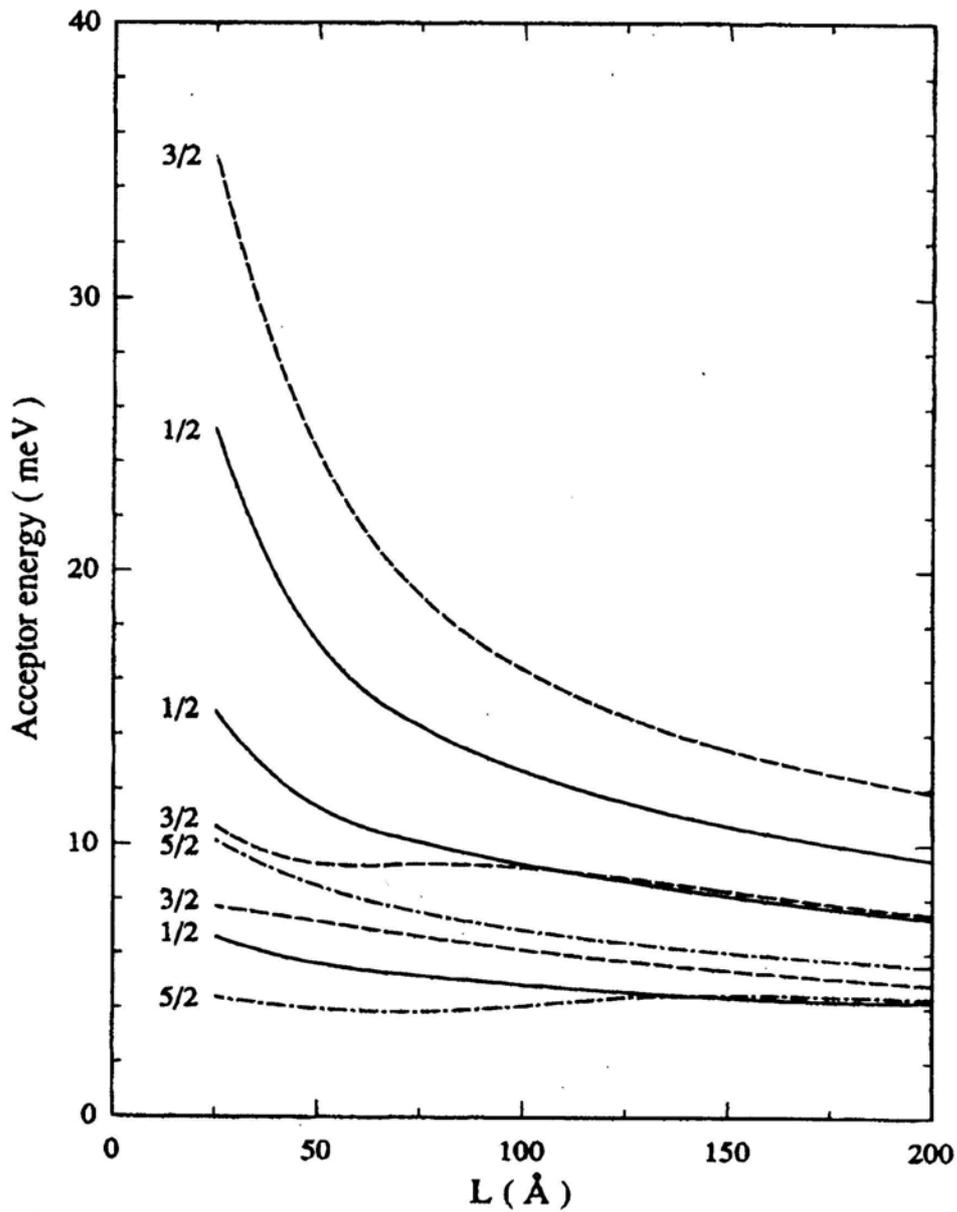


Рис.1.3. Энергии состояний акцептора, помещенного гетерограницу гетероструктуры GaAs/Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As, в зависимости от ширины ямы [6]. Энергия отсчитывается от вершины нижней подзоны размерного квантования. Слева показаны значения проекции полного момента на ось роста структуры (в единицах  $\hbar$ ), которым соответствуют состояния акцепторов.

### 1.1.3. Спектр акцепторов в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs

В напряженных структурах (например, Ge/GeSi или InGaAs/GaAs) на спектр мелких акцепторов наряду с пространственным ограничением оказывает влияние также “встроенная” деформация слоев: в изучаемых гетероструктурах слои, в которых реализуются квантовые ямы (слои Ge и InGaAs) для дырок оказываются двусторонне сжатыми в плоскости слоя. По влиянию на энергетический спектр дырок такое двустороннее сжатие эквивалентно одноосному растяжению, т.к. двустороннее сжатие можно представить как сумму всестороннего сжатия (не изменяющего симметрию решетки и поэтому не приводящего к расщеплению зон) и одноосного растяжения. Деформация приводит к дополнительному расщеплению подзон легких и тяжелых дырок и перестройке всего закона дисперсии. Отметим, что деформация существенно уменьшает эффективную массу дырок при  $\mathbf{k} = 0$ ; таким образом, следует ожидать уменьшения энергии связи мелкого акцептора в напряженных гетероструктурах по сравнению с ненапряженными.

Деформация слоев в гетероструктурах возникает из-за того, что гетеропары Ge с Si и GaAs с InAs являются несогласованными по параметру решетки:  $a_{Ge} = 5.657 \text{ \AA}$ ,  $a_{Si} = 5.431 \text{ \AA}$ ,  $a_{GaAs} = 5.654 \text{ \AA}$ ,  $a_{InAs} = 6.058 \text{ \AA}$ . При небольших долях Si или In постоянная решетки ненапряженного твердого раствора может быть рассчитана по линейному закону:

$$a_{GeSi, InGaAs} = (1 - x) \cdot a_{Ge, GaAs} + x \cdot a_{Si, InAs} \quad (1.5)$$

При эпитаксиальном выращивании твердого раствора GeSi и InGaAs на подложках Ge и GaAs, соответственно, в растущих слоях возникают упругие деформации. Упругая энергия слоя растет линейно с ростом толщины  $d$ , и при некоторой критической толщине  $d_c$  энергетически более выгодной оказывается образование дислокаций на границе и неупругая релаксация напряжений. После начала такой релаксации постоянная решетки слоя в плоскости роста  $a_{||}$  уже не совпадает с постоянной решетки подложки  $a_s$ .

Если полная толщина гетероструктуры значительно превышает критическую толщину, то структура «отрывается» от подложки и, при условии, что толщины слоев гетероструктуры не превышают критических, в структуре возникает одна постоянная решетки в плоскости роста. При этом, минимум энергии (для гетероструктур Ge/GeSi) реализуется при условии [23]:

$$\varepsilon_1 d_1 + \varepsilon_2 d_2 = 0, \quad (1.6)$$

где  $d_1$  и  $d_2$  – толщины слоев гетероструктуры,  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  – их относительные деформации.

Постоянная решетки в плоскости слоев равна

$$a_{||SL} = \frac{a_1 d_1 + a_2 d_2}{d_1 + d_2}. \quad (1.7)$$

Рассогласование структуры в целом относительно подложки определяется величиной

$$f^* = (a_{||SL} - a_s) / a_s. \quad (1.8)$$

Таким образом, появляется возможность управлять деформацией слоев структур, изменяя соотношение толщин слоев структур, не меняя их состава.

Расчёты энергии основного состояния мелкого акцептора в напряжённых гетероструктурах InGaAs/AlGaAs были выполнены авторами работы [9], впервые предложившими невариационный метод расчёта, основанный на разложении волновой функции акцептора по базису из волновых функций свободных дырок в квантовой яме. Однако, из-за неправильного выбора вида базисных функций в [9] были получены качественно неверные результаты (предсказывалось, например, снятие двукратного вырождения состояний акцептора в напряженных квантовых ямах; см. также [24]). В работе [6] было получено интегральное уравнение для коэффициентов разложения акцепторных волновых функций по указанному базису. К сожалению, авторы [6] выбрали вариационный метод решения этого уравнения, что, во-первых, снизило точность расчетов (особенно для возбужденных состояний), и, во-вторых, не позволило найти состояния в непрерывном спектре, а, следовательно, и спектральные зависимости коэффициента примесного поглощения света (или спектры фотогенерации).

Акцепторы в гетероструктурах Ge/GeSi ранее не изучались, хотя эта задача представляет значительный интерес. Энергия связи мелкого акцептора в объёмном Ge ( $E_B \approx 10$  мэВ) меньше, чем в объёмном GaAs ( $E_B \approx 25$  мэВ), поэтому влияние пространственного ограничения на спектр акцептора в гетероструктурах Ge/GeSi должно быть сильнее, чем в гетероструктурах InGaAs/GaAs.

## **1.2. Метод расчета энергетических уровней акцепторов в напряженных структурах с использованием гамильтониана Латтинжера 4×4**

В настоящем разделе представлен метод расчета спектров мелких акцепторов в квантовых ямах, использованный в работах [A1-A13]. Метод позволяет найти волновые функции как локализованных, так и делокализованных состояний, рассчитать энергии связи основного и возбужденного состояний, а также найти спектры фотогенерации свободных дырок в гетероструктурах в дальней ИК области.

### **1.2.1 Аксиальное приближение**

Энергии состояний акцептора находились путем решения уравнения Шредингера. Гамильтониан выбирался в виде суммы кинетической энергии (гамильтониан Латтинжера), потенциальной энергии дырки в квантовой яме, члена, описывающего эффекты де-

формации, и энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором [25,26]. В работе не учитывалась поляризация гетерограницы из-за небольшой разницы в диэлектрических проницаемостях материалов квантовой ямы и барьера в рассматриваемых гетероструктурах  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$  и  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ .

Гамильтониан Латтинжера, описывающий кинетическую энергию дырок в гетероструктурах  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  и  $\text{GaAs}/\text{InGaAs}$ , можно выбирать в виде матрицы  $4 \times 4$ , т.е. пренебречь спин-отщепленной подзоной, так как в  $\text{Ge}$  и  $\text{GaAs}$  величина спин-орбитального расщепления значительно превышает энергию ионизации акцепторов (энергии ионизации мелких акцепторов составляют в  $\text{Ge}$  и  $\text{GaAs}$  около 11 мэВ и 26 мэВ, соответственно, а спин-отщепленные подзоны отстоят соответственно на 290 и 340 мэВ). Согласно [26] гамильтониан Латтинжера в этом случае имеет вид:

$$\begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix}. \quad (1.9),$$

Элементы матрицы имеют в обычном базисе<sup>1</sup> (оси системы координат соответствуют основным кристаллографическим направлениям) следующий вид:

$$F = \hbar^2 \frac{(\gamma_1(z) + \gamma_2(z))(k_x^2 + k_y^2) + k_z(\gamma_1(z) - 2\gamma_2(z))k_z}{2m_0} + (a-b)\varepsilon_{zz} + \left(a + \frac{b}{2}\right)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (1.10)$$

$$G = \hbar^2 \frac{(\gamma_1(z) - \gamma_2(z))(k_x^2 + k_y^2) + k_z(\gamma_1(z) + 2\gamma_2(z))k_z}{2m_0} + (a+b)\varepsilon_{zz} + \left(a - \frac{b}{2}\right)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (1.11)$$

$$H = -i \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \{\gamma_3 k_z\} (k_x - ik_y) \quad (1.12)$$

$$I = \hbar^2 \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{(\gamma_2 + \gamma_3)(k_x - ik_y)^2 + (\gamma_2 - \gamma_3)(k_x + ik_y)^2}{2m_0}, \quad (1.13),$$

где:  $k_x = -i \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $k_y = -i \frac{\partial}{\partial y}$ ,  $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$ ,  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  – параметры Латтинжера, зависящие от материала,  $a, b$  – постоянные деформационного потенциала валентной зоны,  $\varepsilon_{ij}$  – компоненты тензора деформации,  $m_0$  – масса свободного электрона. Фигурные скобки обозначают антикоммутатор:  $\{\gamma_3 k_z\} = \gamma_3 k_z + k_z \gamma_3$ .

В случае если структура выращена вдоль направления [111], гамильтониан удобнее записать в новом базисе, выбрав ось  $z$  вдоль направления роста структуры. Элементы гамильтониана Латтинжера в системе координат:

<sup>1</sup> Этот базис удобно использовать для структур, выращенных на плоскости (001).

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_1 &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right) \text{ (ось } x), \\
\mathbf{e}_2 &= \left( \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{2}{\sqrt{6}} \right) \text{ (ось } y), \\
\mathbf{e}_3 &= \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \text{ (ось } z).
\end{aligned} \tag{1.14}$$

ИМЕЮТ ВИД:

$$F = \hbar^2 \frac{(\gamma_1(z) + \gamma_3(z))(k_x^2 + k_y^2) + k_z(\gamma_1(z) - 2\gamma_3(z))k_z}{2m_0} + (a-b)\varepsilon_{zz} + \left(a + \frac{b}{2}\right)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \tag{1.15}$$

$$G = \hbar^2 \frac{(\gamma_1(z) - \gamma_3(z))(k_x^2 + k_y^2) + k_z(\gamma_1(z) + 2\gamma_3(z))k_z}{2m_0} + (a+b)\varepsilon_{zz} + \left(a - \frac{b}{2}\right)(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \tag{1.16}$$

$$H = \hbar^2 \frac{-i \frac{1}{\sqrt{3}} \{(2\gamma_2 + \gamma_3)k_z\}(k_x - ik_y) + i \sqrt{\frac{2}{3}} (\gamma_2 - \gamma_3)(k_x + ik_y)^2}{2m_0} \tag{1.17}$$

$$I = \hbar^2 \frac{\frac{(\gamma_2 + 2\gamma_3)}{\sqrt{3}}(k_x - ik_y)^2 + \sqrt{\frac{2}{3}} \{(\gamma_2 - \gamma_3)k_z\}(k_x + ik_y)}{2m_0} \tag{1.18}$$

Так же, как и в работе [6], в настоящей работе использовалось аксиальное приближение, т.е. закон дисперсии дырок полагался изотропным в плоскости квантовой ямы. Для этого в недиагональных элементах гамильтониана Латтинжера (в выражениях (1.12), (1.13), (1.17) и (1.18)) были опущены слагаемые пропорциональные  $(\gamma_2 - \gamma_3)$ . Следует отметить, что в первом порядке теории возмущений поправка к энергии, связанная с отброшенными слагаемыми, равна нулю. Отметим также, что гамильтониан Латтинжера, определяемый выражениями (1.9) и (1.10)-(1.13) или (1.15)-(1.18) является эрмитовым везде, включая и гетерограницу. Граничные условия для волновой функции на гетерогранице могут быть получены интегрированием уравнения Шредингера в ее окрестности.

В аксиальном приближении сохраняется проекция полного момента  $J$  на нормаль к квантовой яме, и спектр акцептора оказывается двукратно вырожденным по знаку этой проекции (т.е.  $\pm J$ ). В таком приближении волновые функции акцепторов, соответствующие определенной проекции полного момента имеют вид:

$$\Psi_J(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(z, \rho) \\ \psi_2(z, \rho)e^{i\varphi} \\ \psi_3(z, \rho)e^{2i\varphi} \\ \psi_4(z, \rho)e^{3i\varphi} \end{pmatrix} e^{(3/2 - J)i\varphi}, \tag{1.19}$$

где  $J$  – значение проекции момента, измеренное в единицах  $\hbar$ ,  $\rho, \varphi, z$  – цилиндрические координаты, ось  $z$  направлена вдоль оси роста структуры (ось симметрии).

Отметим, что согласно теории групп спектр акцептора в квантовой яме, выращенной на плоскости (001) или (111), должен быть двукратно вырожденным даже при учете анизотропии закона дисперсии дырок в плоскости квантовой ямы (теорема Крамерса).

Волновая функция акцепторов искалась в виде разложения по собственным функциям дырок в квантовой яме в отсутствие акцептора:

$$\Psi_J(\mathbf{r}) = \sum_{k,n,s} C_J(k,n,s) \frac{\mathbf{g}(\mathbf{k},n,s,\mathbf{r})}{\sqrt{k}}, \quad (1.20)$$

где  $\mathbf{k}$  - волновой вектор дырки, индекс  $n$  обозначает номер подзоны размерного квантования,  $s = \pm 1$  - четность относительно отражения в плоскости, проходящей через вектор  $\mathbf{k}$  и нормаль к квантовой яме,  $\mathbf{g}(k,n,s,\mathbf{r})$  - собственная волновая функция дырки в квантовой яме. Учитывая, что зависимость от направления волнового вектора коэффициентов  $C_J(k,n,s)$  имеет вид (см. Приложение 1)

$$C_J(\mathbf{k},n,s) = C_J(k,n,s) \exp\left[i\alpha\left(J - \frac{3}{2}\right)\right], \quad (1.21)$$

где  $\alpha$  - угол, характеризующий направление волнового вектора, можно получить следующее уравнение для определения  $C_J(k,n,s)$ :

$$[\varepsilon(k,n) - E]C_J(k,n,s) + \sum_{n',s'} \int_0^\infty dk' \sqrt{kk'} C_J(k',n',s') V(k',n',s',k,n,s) = 0, \quad (1.22)$$

где  $\varepsilon(k,n)$  - закон дисперсии дырки в  $n$ -ой подзоне,  $E$  - энергия,

$$V(k',n',s',k,n,s) = -\frac{e^2}{\chi} \int_0^{2\pi} d\beta \exp\left[i\beta\left(J - \frac{3}{2}\right)\right] \int d^3r \left\langle \mathbf{g}(k',n',s',r) \left| \frac{1}{r} \right| \mathbf{g}(k,n,s,r) \right\rangle, \quad (1.23)$$

$\beta$  - угол между векторами  $k$  и  $k'$ ,  $\chi$  - диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $e$  – элементарный заряд. Отметим, что ядро интегрального оператора в уравнении для  $C_J(k,n,s)$  симметрично относительно переменных  $k, n, s, k', n', s'$  и  $V$  - действительная величина. Это обстоятельство дает возможность решать уравнение (4) с помощью диагонализации симметричной действительной матрицы. Действительно, если выбрать шаг по  $k'$  меньше обратного боровского радиуса, то подынтегральная функция слабо меняется на одном шаге. В этом случае интеграл можно представить в виде суммы по дискретному ряду по  $k'$ . Ясно также, что  $C_J(k,n,s)$  малы для значений  $k$  много больших обратного боровского радиуса. Поэтому, не совершая большой ошибки, ряд по  $k'$  можно оборвать. Понятно также, что если глубина ямы значительно больше энергии ионизации акцептора и акцептор находится внутри нее, то вкладом в волновую функцию акцептора трехмерных

(надбарьерных) состояний можно пренебречь. Таким образом, задача нахождения как локализованных так и делокализованных состояний акцептора сводится к диагонализации конечномерной симметричной матрицы. Более подробное изложение численного решения интегрального уравнения (1.22) с ядром (1.23) дано в приложении 2.

Предложенным методом были найдены энергии состояний, соответствующих проекциям полного момента импульса  $J=\pm 3/2$ ,  $J=\pm 1/2$ ,  $J=\pm 5/2$ . Для основного состояния акцепторов  $J=\pm 3/2$ , а нижним возбужденным состояниям соответствуют значения  $J=\pm 1/2$ ,  $\pm 3/2$  или  $\pm 5/2$ .

### 1.2.2. Точность аксиальной модели

Как уже отмечалось, в недиагональных элементах гамильтониана Латтинжера были отброшены слагаемые, отвечающие за анизотропию закона дисперсии дырок в плоскости роста исследуемых гетероструктур. Влияние отброшенных слагаемых на энергетический спектр акцептора можно оценить по теории возмущений.

Исходя из выражений (1.12), (1.13), (1.17), (1.18), оператор возмущения можно представить в следующем виде:

$$\hat{P} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\sqrt{3}}{2} (\gamma_2 - \gamma_3) \begin{pmatrix} 0 & 0 & (k_x + ik_y)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (k_x + ik_y)^2 \\ (k_x - ik_y)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (k_x - ik_y)^2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

для гетероструктур, выращенных на подложке (001), и

$$\hat{P} = \frac{\hbar^2 (\gamma_2 - \gamma_3)}{2m_0} \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 & i(k_x + ik_y)^2 & k_z(k_x + ik_y) & 0 \\ -i(k_x - ik_y)^2 & 0 & 0 & k_z(k_x + ik_y) \\ k_z(k_x - ik_y) & 0 & 0 & -i(k_x + ik_y)^2 \\ 0 & k_z(k_x - ik_y) & i(k_x - ik_y)^2 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

для гетероструктур, выращенных на подложке (111). Заметим, что для гетероструктур, выращенных вдоль оси третьего порядка (направление [111]), анизотропия приводит к взаимодействию состояний с проекциями полного орбитального момента  $J$  и  $J \pm 3$  (здесь и далее момент выражаем в единицах  $\hbar$ ). Для структур, выращенных на подложке (001) (вдоль оси четвертого порядка), анизотропия приводит к взаимодействию состояний с проекциями полного орбитального момента  $J$  и  $J \pm 4$ . Как уже отмечалось, состояния оказываются вырожденными по знаку  $J$ . Из (1.13) видно, что в случае гетероструктур, выращенных в направлении [001], возмущение не приводит к взаимодействию между состояниями, отличающимися только знаком проекции момента импульса на ось симметрии, т.е. вырожденными. Для гетероструктур, выращенных в направлении [111], матричный эле-

мент оператора  $\hat{\mathbf{P}}$ , отвечающий за взаимодействие между вырожденными состояниями с  $J = \pm 3/2$ , будет строго равен нулю при любом положении примесного иона в гетероструктуре из-за структуры волновых функций таких состояний, т.е., как и следовало ожидать, снятия вырождения между состояниями с  $J = \pm 3/2$  не произойдет. Таким образом, ввиду отсутствия взаимодействия между состояниями с равной энергией, поправки к энергиям акцепторов, связанные с анизотропией были рассчитаны с помощью теории возмущений, применяемой к невырожденным состояниям [27].

Поправки к энергиям уровней, возникающие из-за анизотропии были найдены во втором порядке теории возмущений. Согласно [27] поправка второго порядка к энергии  $m$ -го состояния дается выражением

$$\Delta E_m^{(2)} = \sum_n \frac{|V_{nm}|^2}{(E_n - E_m)}, \quad (1.27)$$

где:  $V_{nm} = \int \Psi_n \hat{\mathbf{P}} \Psi_m^* d\mathbf{r}$  - матричный элемент взаимодействия между двумя состояниями,  $E_n$  и  $E_m$  - энергии.

Поскольку анизотропия изменяет закон дисперсии дырок вдали от краев подзон (для больших значений волнового вектора дырки), поправка связанная с ней должна быть больше для состояний с волновой функцией, в разложение (1.20) которой входят компоненты, отвечающие большим волновым векторам. Это значит, что наибольшее влияние анизотропия оказывает на наиболее локализованные акцепторные состояния, т.е. максимальной должна быть поправка для основного состояния акцептора. В таблице 1.1 даны энергии ионизации некоторых состояний акцепторов, расположенных в центре квантовых ям гетероструктур Ge/GeSi и GaAs/InGaAs.

Из таблицы 1.1 видно, что для гетероструктур Ge/GeSi, при учете поправки второго порядка энергия связи акцепторов увеличивается на 3-3,5 %. В гетероструктурах InGaAs/GaAs анизотропия оказывается более существенной, там поправка к энергии основного состояния составляет около 9%. Энергии возбужденных состояний акцепторов в изучаемых структурах при учете анизотропии изменялись примерно на 1 % в гетероструктурах Ge/GeSi и 4 % в гетероструктурах InGaAs/GaAs.

Таблица 1.1. Энергии основного и нижнего возбужденного состояния акцептора, помещенного в центр квантовых ям, рассчитанные в аксиальном приближении и поправки к энергиям, связанные с анизотропией. Энергия отсчитывается от края нижней подзоны размерного квантования.

	Гетероструктура #306 Ge/Ge <sub>0.88</sub> Si <sub>0.12</sub> ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ , $\epsilon_{11} = 2.1 \cdot 10^{-3}$ )	Гетероструктура #308 Ge/Ge <sub>0.91</sub> Si <sub>0.09</sub> ( $d_{QW} = 355 \text{ \AA}$ , $\epsilon_{11} = 0.34 \cdot 10^{-3}$ )	Гетероструктура #2106 In <sub>0.2</sub> Ga <sub>0.2</sub> As/ GaAs ( $d_{QW} = 63 \text{ \AA}$ , $\epsilon_{11} = 0.34 \cdot 10^{-3}$ )
Энергия основного состояния в аксиальной модели ( $J=\pm 3/2$ )	-7.2 мэВ	-7.35 мэВ	-14.5 мэВ
Поправка к энергии основного состояния	-0.25 мэВ	-0.3 мэВ	-1.33 мэВ
Нижнее возбужденное состояние в аксиальной модели ( $J=\pm 1/2$ ).	-1.4 мэВ	-2 мэВ	-4.7 мэВ
Поправка к энергии нижнего возбужденного состояния.	-0.012 мэВ	-0.023 мэВ	-0.21 мэВ

Отформатировано:  
русский (Россия)

Отформатировано:  
русский (Россия)

Отформатировано:  
русский (Россия)

Отформатировано:  
русский (Россия)

### 1.2.3. Результаты расчета спектров мелких акцепторов в напряженных гетероструктурах сквантовыми ямами

Результаты расчетов спектров мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi, выращенных на плоскости [111], представлены на рис.1.4-1.7. Рис.1.4 представляет зависимость энергий основного и нескольких нижних возбужденных уровней от ширины квантовой ямы. Как видно из рисунка, энергия ионизации основного состояния акцепторов в центре квантовой ямы уменьшается с ростом ее ширины, что связано с уменьшением энергии кулоновского взаимодействия дырки с акцептором. Однако при  $d_{QW} = 350 \text{ \AA}$  энергия связи оказывается меньшей, чем в объемном Ge при такой же двуосной деформации, что и в слоях германия в гетероструктурах (7 мэВ – энергия связи в объемном германии и 6.6 мэВ в гетероструктуре при  $d_{QW} = 350 \text{ \AA}$ ). Этот факт отражает двойственный характер влияния пространственного ограничения на энергию связи мелкого акцептора. С одной стороны, ограничение приводит к дополнительной локализации волновой функции около примесного иона и, тем самым, увеличивает энергию связи по сравнению с объемным полупроводником, как и в случае доноров, с другой стороны, из-за эффектов размерного квантования уменьшается эффективная масса дырок в нижней подзоне, что приводит к уменьшению энергии ионизации. Отметим, что расчет, проведенный для гетероструктур

Si/SiGe, показывает немонотонный характер зависимости энергии связи акцептора от ширины квантовой ямы (см. главу 4).

На рис.1.4 приведены также энергии двух возбужденных состояний. Видно, что энергии ионизации нижних возбужденных состояний, соответствующих проекциям момента  $J = 5/2$  и  $1/2$ , увеличиваются с уменьшением ширины ямы, что связано с большей локализацией волновой функции около акцептора, а значит с ростом кулоновской энергии, в то время как энергия ионизации возбужденных состояний с проекциями момента  $J = 3/2$  уменьшаются с уменьшением ширины квантовой ямы. Чтобы понять причины этого эффекта нужно подробнее рассмотреть структуру волновых функций возбужденных состояний с проекцией момента  $J = 3/2$ . Разложения волновых функции акцепторов по базису из волновых функций свободных дырок в квантовой яме включают функции, относящиеся к различным подзонам размерного квантования. Нужно отметить, что при большой ширине квантовой ямы нижнее возбужденное состояние (линия 2 на рис.1.4) образовано в основном волновыми функциями второй подзоны размерного квантования, а верхнее состояние (линия 3) - в основном функциями первой. При уменьшении ширины квантовой ямы энергия ионизации состояния нижнего, привязанного ко второй подзоне размерного квантования быстро уменьшается, при ширине квантовых ям около 200 Å эти состояния максимально сближаются и «обмениваются» волновыми функциями. При меньшей ширине квантовой ямы нижнее состояние образовано уже функциями первой подзоны размерного квантования, поэтому зависимость его энергии ионизации от ширины квантовой ямы становится более плавной (см. рис.1.4), а верхнее состояние, образованное функциями второй подзоны размерного квантования, выталкивается в непрерывный спектр.

На рис.1.5 представлена зависимость энергий акцепторных состояний в гетероструктурах Ge/GeSi от положения примесного иона в квантовой яме для структур с различными значениями ширины квантовых ям. Хорошо видно, что энергия ионизации основного состояния акцептора при смещении от центра ямы к гетерогранице уменьшается почти в 2 раза, что связано с уменьшением кулоновской энергии из-за смещения волновой функции дырки, локализованной на акцепторе, относительно примесного центра. Заметим, что при движении иона примеси от центра ямы сильнее изменяется энергия ионизации акцептора в гетероструктуре с более широкой квантовой ямой. Это связано с тем, что в квантовой яме, ширина которой сравнима с масштабом локализации волновой функции акцептора, даже примесь, расположенная на краю квантовой ямы, «чувствует» обе гетерограницы. Из рис.1.5 видно также, что энергия связи начинает заметно меняться, когда примесь приближается к гетерогранице на расстояние порядка 50 Å, что соответствует масштабу локализации волновой функции основного состояния акцептора в направлении роста. Отме-

тим также, что энергия ионизации возбужденных состояний лишь незначительно уменьшается при перемещении иона примеси из центра ямы к гетерогранице (см рис 1.5). Это связано с тем, что ширина квантовых ям гетероструктур сравнима с масштабом локализации функций возбужденных состояний акцепторов, из-за чего даже примесь, расположенная на краю квантовой ямы, «чувствует» обе гетерограницы.

Рис.1.6 иллюстрирует изменение энергии связи основного и нижнего возбужденного состояний акцепторов в гетероструктуре № 306 при перемещении примесного иона от центра квантовой ямы к гетерогранице и далее в квантовый барьер. Отметим, что при перемещении примесного иона в барьер сохраняются локализованные состояния дырок с энергией ниже дна нижней подзоны размерного квантования. Такие акцепторные состояния формируются из состояний свободных дырок в квантовой яме. Акцепторный ион, помещенный в квантовый барьер, создает локализирующий потенциал для двумерных дырок в квантовой яме. Как известно, частица в двумерной квантовой яме всегда имеет хотя бы один локализованный энергетический уровень, глубина которого стремится к нулю при стремлении к нулю глубины ямы [27]. Можно ожидать, что и в нашем случае при углублении примеси в барьер энергия ионизации акцептора асимптотически стремится к нулю.

Следует отметить, что под непрерывным спектром дырок в барьере (“надбарьерный” континуум) имеется набор квазилокализованных акцепторных состояний, попадающих в непрерывный спектр подзон размерного квантования. В разложении функций таких состояний присутствуют в основном функции дырок с энергиями выше энергии барьера. При углублении примеси в барьер такие состояния перейдут в состояния акцептора в объемном твердом растворе.

Рис 1.7 представляет зависимость энергии нескольких акцепторных уровней, соответствующих различным значениям проекции момента импульса на ось роста структуры ( $J = \pm 3/2$ ,  $J = \pm 1/2$ ,  $J = \pm 5/2$ ) от величины деформации слоев германия. Видно, что энергия ионизации акцепторов убывает с ростом деформации. Отметим, что наибольшие изменения при деформации испытывает спектр состояний с  $J = \pm 1/2$ . Нижний уровень из этого набора является отщепившимся от основного четырехкратно вырожденным состоянием акцептора в объемном Ge.

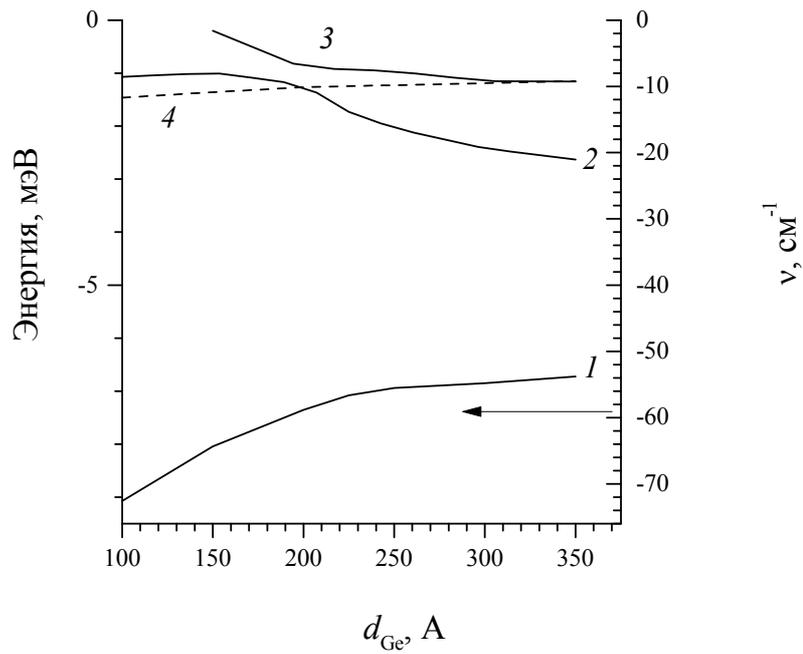


Рис.1.4. Рассчитанные зависимости энергии основного и нижних возбужденных состояний акцептора в центре квантовой ямы в гетероструктуре  $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.88}\text{Si}_{0.12}$  ( $\epsilon_{11} = 2.1 \cdot 10^{-3}$ ) в зависимости от ширины квантовой ямы. Сплошные линии –  $J = \pm 3/2$  (1 - основное, 2 и 3 - два нижних возбужденных состояния), пунктир -  $J = \pm 1/2, \pm 5/2$  (линия 4). Стрелка показывает энергию связи акцептора в объемном Ge при "эквивалентном" одноосном растяжении. Нуль энергии соответствует краю первой подзоны размерного квантования в валентной зоне.

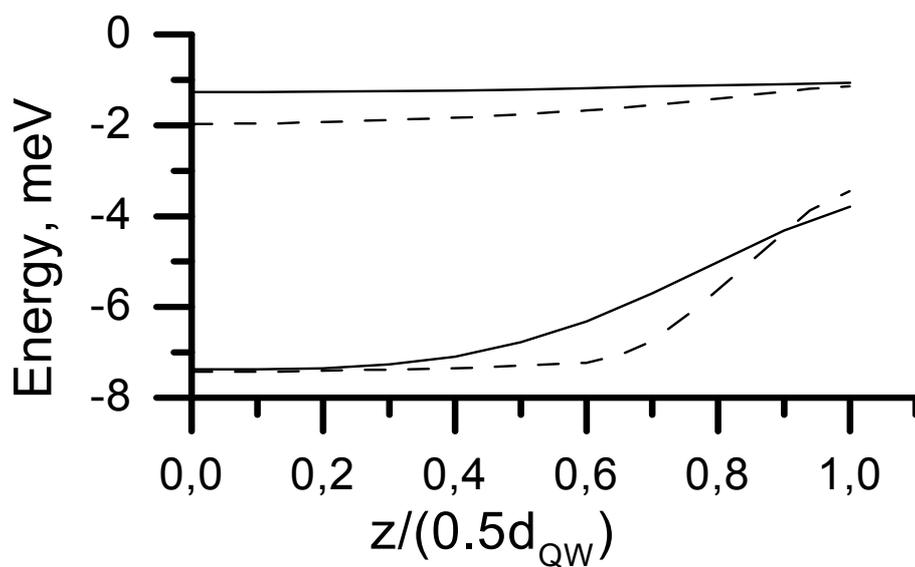


Рис.1.5. Рассчитанные энергии основного и нижнего возбужденного состояний для образцов Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> #306 (сплошная линия) и #308 (пунктир) в зависимости от положения примеси внутри квантовой ямы. Параметры структур: образец #306 –  $x = 0.12$ ,  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon_{11} = 2.1 \cdot 10^{-3}$ ; образец #308 –  $x = 0.09$ ,  $d_{QW} = 355 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon_{11} = 0.34 \cdot 10^{-3}$ .

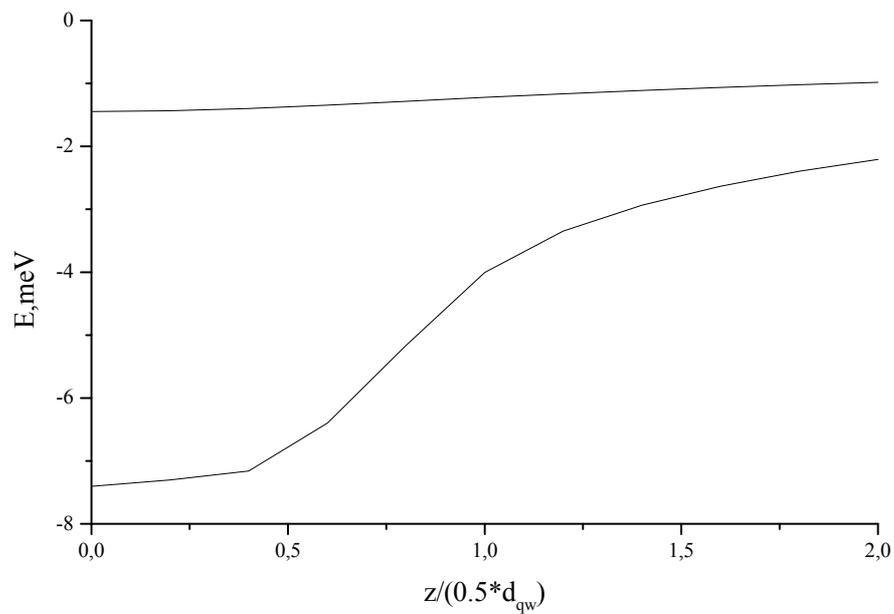


Рис.1.6. Зависимость энергии основного и нижнего возбужденного состояния акцептора в гетероструктуре Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> с квантовыми ямами #306 ( $x = 0.12$ ,  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon_{11} = 2.1 \cdot 10^{-3}$ ) от положения иона примеси.

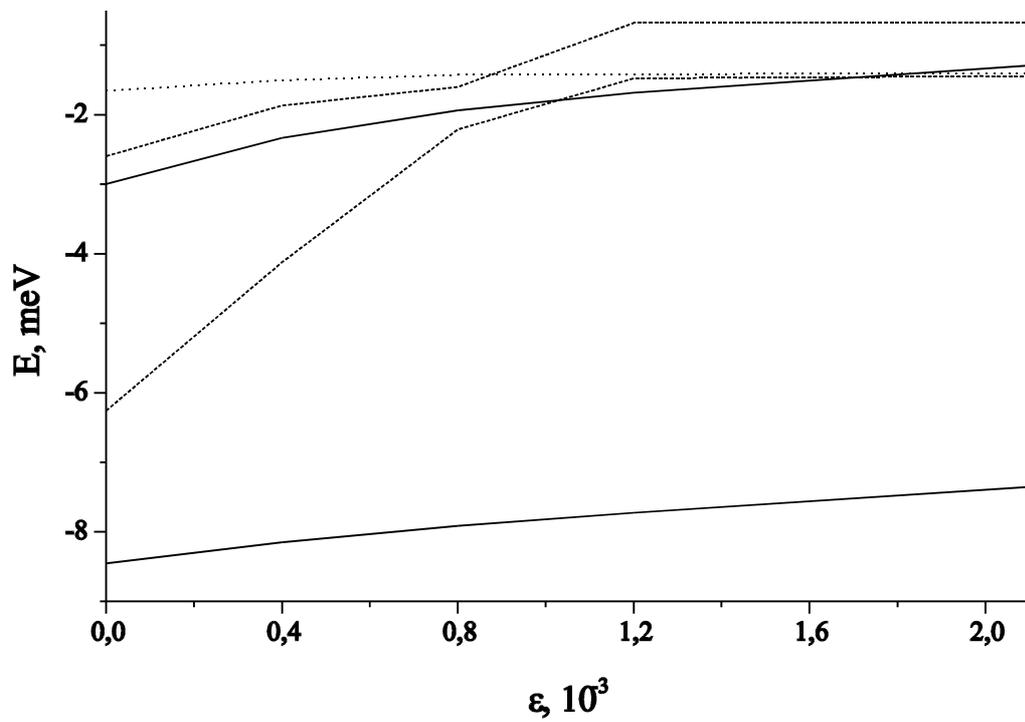


Рис. 1.7. Рассчитанные энергии связи основного и нижних возбужденных состояний акцептора в центре квантовой ямы в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub>  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$  в зависимости от величины деформации слоев Ge ( $\epsilon = \epsilon_{11}$ ). Сплошные линии -  $J = \pm 3/2$  (основное и  $2s$ -подобное состояния), пунктирная линия -  $J = \pm 1/2$ , точечная линия -  $J = \pm 5/2$ .

На рис. 1.8 представлены рассчитанные зависимости энергий состояний мелких акцепторов в гетероструктурах InGaAs/GaAs от положения акцептора в квантовой яме для двух образцов, которые исследовались экспериментально (#2067 и #2106). Заметим, что в исследованных структурах энергии ионизации акцепторов, расположенных в центре квантовой ямы и на гетерогранице отличаются только на 30%. Это связано с тем, что ширина квантовых ям рассматриваемых гетероструктур сравнима с масштабом локализации волновой функции основного состояния акцептора, из-за чего примесь, расположенная на краю квантовой ямы, “чувствует” обе гетерограницы. В образце # 2067 легирующая примесь вводилась в виде  $\delta$ -слоя в центр квантовой ямы, а в образце # 2106 – на гетерограницу. Как видно из рис.1.8, рассчитанная энергия связи основного состояния акцептора, находящегося в квантовой яме в образце # 2067, составляет 14.5 мэВ. Эта величина хорошо согласуется с значениями энергии ионизации, полученными из измеренной с помощью метода Холла [A2] температурной зависимости концентрации носителей (14 мэВ), а также из экспериментов по фотолюминесценции (13.5 мэВ). Для образца # 2106 с примесями на краю квантовой ямы расчет дает энергию основного состояния 11.2 мэВ (рис. 1.8), что практически совпадает с энергией ионизации, полученной из температурной зависимости концентрации носителей – 11.5 мэВ. Таким образом, имеется хорошее согласие результатов расчетов с экспериментальными результатами.

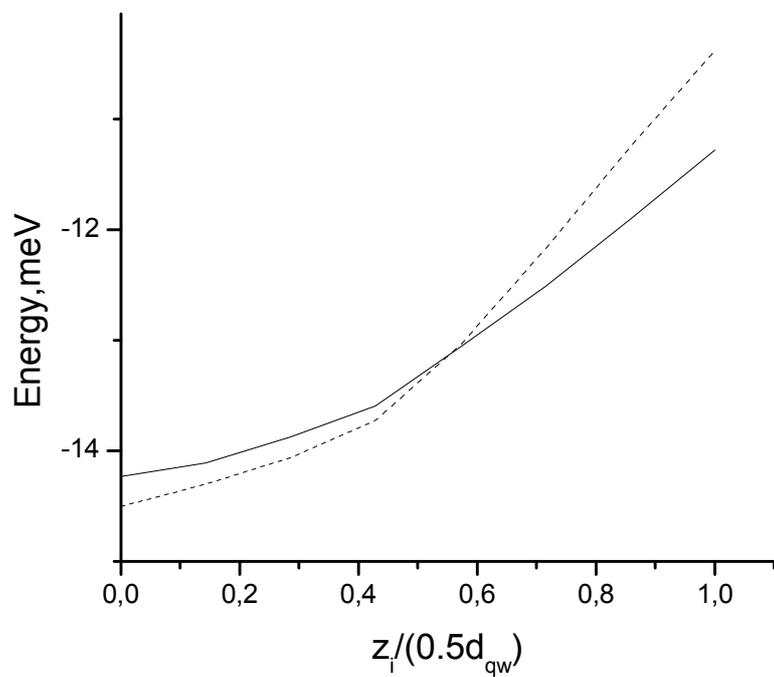


Рис.1.8. Зависимость энергии состояний мелких акцепторов в гетероструктурах  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  от положения примеси в яме: сплошная линия – образец # 2067 ( $x = 0.12$ ,  $d_{QW} = 63 \text{ \AA}$ ), пунктир - образец # 2106 ( $x = 0.1$ ,  $d_{QW} = 88 \text{ \AA}$ ).

### 1.3. Спектры фотопроводимости гетероструктур

#### 1.3.1. Метод фототермической ионизации

В настоящем разделе представлены рассчитанные спектры длинноволновой ИК фотопроводимости, связанной с фотовозбуждением акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi, которые сопоставляются с результатами спектральных измерений с помощью фурье-спектрометра BOMEM DA3.36 при  $T = 4.2$  К, выполненных в работах [28-29]. Излучение падало на образец вдоль оси роста структуры, т.е вектора электрического и магнитного полей волны лежали в плоскости квантовой ямы.

Для исследования мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами был выбран наиболее чувствительный метод фототермической ионизационной (или фотоэлектрической) спектроскопии [30-32]. На рис.1.9 показана схема, поясняющая основную идею данной методики. Исследуемый образец находится при достаточно низкой (но ненулевой) температуре, так что большая часть носителей локализована на примесных атомах. Сигнал фотопроводимости пропорционален интенсивности генерации (на единицу объема) свободных дырок ( $I_{hg}$ ). Под действием электромагнитного излучения дырка переходит в непрерывный спектр или на локализованные возбужденные состояния. В первом случае интенсивность генерации свободных дырок в единице объема равна:

$$I_{hg} = nW, \quad (1.28)$$

где  $n$  - концентрация примеси,  $W$  - вероятность перехода дырки с основного состояния в непрерывный спектр в единицу времени под действием излучения. Во втором случае дырка, перешедшая на возбужденное состояние, может попасть в непрерывный спектр, поглотив акустический фонон (термическая ионизация); тогда интенсивность генерации свободных носителей будет иметь вид:

$$I_{hg} = P_{ph}nW, \quad (1.29)$$

где  $W$  - вероятность перехода дырки на возбужденное состояние за единицу времени,  $P_{ph}$  - вероятность термической ионизации.

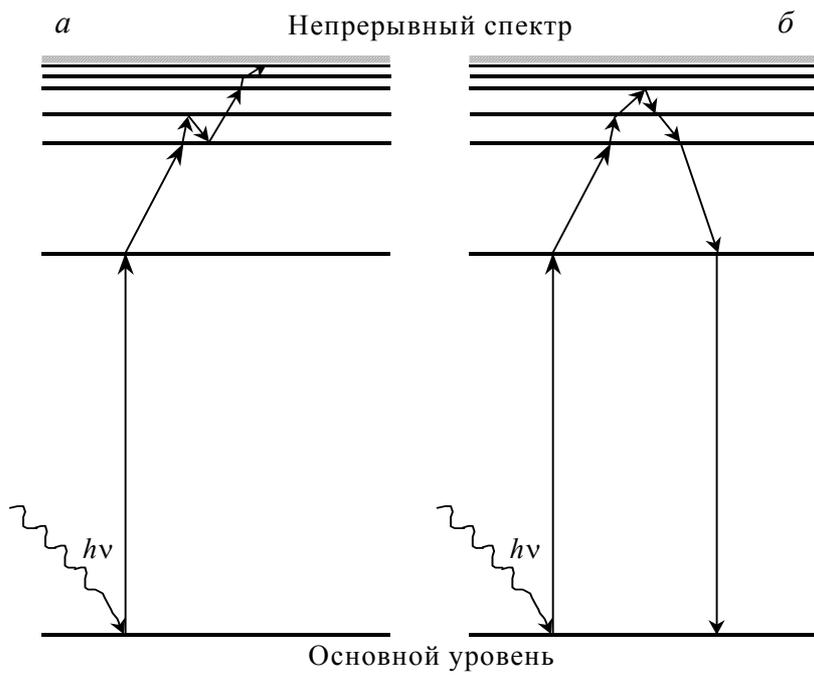


Рис.1.9. Схематическое изображение процесса фототермической ионизации примесного центра. Вертикальная стрелка – оптический переход, неvertикальные стрелки – переходы с поглощением фононов.

- а) процесс, оканчивающийся ионизацией примесного центра,
- б) процесс, оканчивающийся возвращением в основное состояние.

Изложенный в разделе 1.2. теоретический метод позволяет находить волновые функции как локализованных состояний, так и состояний, попадающих в непрерывный спектр, что сделало возможным расчет вероятностей дипольно-оптических переходов между примесными уровнями вне рамок борновского приближения. Это обстоятельство позволило вычислить коэффициент поглощения и, тем самым, описать не только положение, но и форму линий наблюдаемого спектра фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi, следовательно, более детально изучать примеси в этих структурах. Выражение для вероятности перехода в единицу времени под действием электромагнитного излучения круговой поляризации имеет следующий вид:

$$W = \frac{\sqrt{2\pi}(e\mathbf{E})^2}{\hbar} \int dE \left| \langle \Psi_i(J) | x \pm iy | \Psi_f(J \pm 1) \rangle \right|^2 \frac{G(E_f)h\nu}{[E_i + \hbar\omega - E_f]^2 + (h\nu)^2}, \quad (1.30)$$

где:  $x$  и  $y$  - декартовы координаты в плоскости квантовой ямы,  $E$  - амплитуда электрического поля электромагнитной волны,  $h\nu$  - полуширина энергетических состояний,  $E_i$  - энергия основного состояния,  $E_f$  - энергия конечного состояния,  $G(E_f)$  - плотность энергетических состояний. Нужно отметить, что из основного состояния разрешены переходы в состояния с проекциями полного момента  $J = 5/2$  и  $-1/2$  - для одного направления круговой поляризации, и в состояния с проекциями полного момента  $J = 1/2$  и  $-5/2$  - для другого. Здесь и далее полуширина примесных уровней полагалась равной 0.25 мэВ; при таком уширении рассчитанные спектры фотопроводимости наилучшим образом соответствовали измеренным спектрам. Отметим, что эта величина хорошо согласуется с шириной линий циклотронного резонанса дырок в тех же образцах (0.2 мэВ), наблюдаемого при межзонном фотовозбуждении носителей [33].

Как уже отмечалось, не все носители перешедшие на возбужденные состояния попадают в непрерывный спектр, поэтому спектр фотопроводимости может существенно отличаться от спектра поглощения. Очевидно, что длинноволновый край спектра, где фотопроводимость определяется переходами на локализованные возбужденные состояния, будет сильно меняться с ростом температуры. Вероятность термической ионизации уровня при  $E \gg kT$  можно представить в виде [34]:

$$P_{ph} = A \exp(-E/kT), \quad (1.31)$$

где  $A$  - функция температуры. Рассчитанные спектры фотогенерации свободных дырок хорошо согласуются с наблюдаемыми спектрами фотопроводимости, если положить для глубоких возбужденных состояний (таких что  $E \gg kT$ ,  $kT \approx 0,4$  мэВ при  $T = 4.2$  К)  $A \approx 1$  (в выражении (1.31)), а для мелких (таких что  $E < kT$ ,  $kT \approx 0,4$  мэВ при  $T = 4.2$  К)  $P_{ph} \approx 1$ .

### 1.3.2. Сопоставление рассчитанных спектров фотопроводимости гетероструктур

#### Ge/GeSi с экспериментом

Большинство экспериментально исследованных гетероструктур специально не легировались, в них присутствуют только остаточные акцепторы с концентрацией порядка  $10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Естественно предположить, что эти примеси равномерно распределены по гетероструктуре. Однако, благодаря особенностям роста могут создаваться условия для накопления примесей и дефектов на гетерограницах.

На рис.1.10 сплошными линиями представлены измеренные при  $T = 4.2 \text{ К}$  спектры длинноволновой ИК фотопроводимости нелегированной гетероструктуры Ge/GeSi №306. В длинноволновой области спектра (энергия кванта до 10 мэВ) фотопроводимость обусловлена главным образом переходами с основного состояния в непрерывный спектр (в подзону  $hh1$ ), а также на локализованные возбужденные состояния (с последующей термической ионизацией). На рис.1.10 точечной линией показан рассчитанный спектр фотопроводимости в предположении, что акцепторы равномерно распределены по изучаемой гетероструктуре. Видно, что рассчитанный спектр фотопроводимости имеет максимумы вблизи энергий ионизации акцепторов, расположенных в центре квантовой ямы (стрелка *a* на рис.1.10) или барьера (стрелка *c*). Это объясняется относительно слабой зависимостью энергии ионизации акцептора, расположенного вблизи центра квантовой ямы или барьера, от положения примеси (см рис.1.6). Заметим, что в наблюдаемом спектре длинноволновая полоса фотопроводимости в области 2.5-4.5 мэВ по форме значительно отличается от рассчитанной. Коротковолновый край этой полосы как раз соответствует энергии ионизации акцепторов, расположенных вблизи гетерограницы (стрелка *b* на рис.1.10). Поэтому естественно предположить, что кроме равномерно распределенных по толщине квантовой ямы примесных центров имеется значительное количество акцепторов, сконцентрированных вблизи гетерограниц. Пунктирная линия на рис.1.10 представляет рассчитанный спектр фотопроводимости в предположении, что на гетерогранице дополнительно расположен  $\delta$ -слой акцепторов с поверхностной концентрацией составляющей 25% от концентрации равномерно распределенной примеси. Предложенная модель позволяет удовлетворительно описать измеренный спектр фотопроводимости.

На рис.1.11 представлен измеренный спектр фотопроводимости образца #308 с более широкой квантовой ямой (сплошная линия). Пунктирные линии представляют собой рассчитанные спектры генерации свободных дырок в предположении, что примесь равномерно распределена по квантовой яме изучаемой гетероструктуры. Такая модель распределения примеси хорошо описывает спектр фотопроводимости данного образца. Видно, что в области спектра, соответствующей переходам между состояниями акцептора, поме-

щенного в барьер, фотопроводимости нет. Данный спектр генерации в основном определяется переходами между уровнями примеси, расположенной в центре квантовых ям. Это связано с тем, что в квантовых ямах гетероструктуры имеется большой слой примеси с энергиями ионизации, близкими к энергии ионизации акцептора, находящегося в центре квантовой ямы.

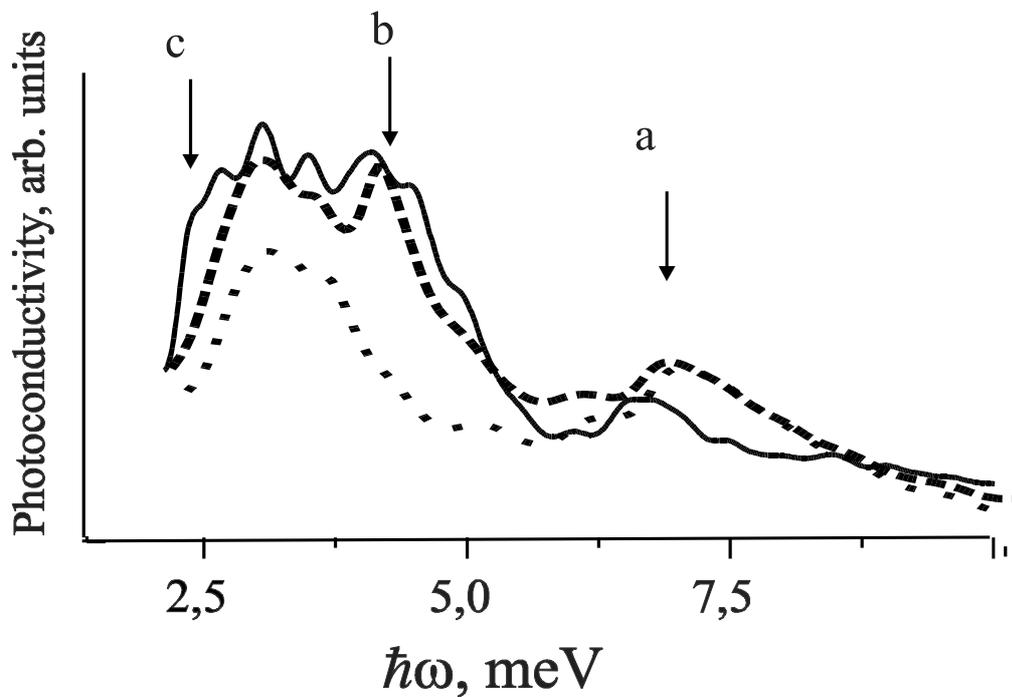


Рис.1.10. Измеренный (сплошная линия) и рассчитанные спектры фотопроводимости гетероструктуры Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> #306 ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $d_{barrier} = 200 \text{ \AA}$ ,  $N_{QW} = 162$ , упругая деформация слоев Ge  $\epsilon_{11} = 2.4 \times 10^{-3}$ ). Точечная линия - рассчитанный спектр фотопроводимости в предположении, что примесь равномерно распределена по гетероструктуре. Пунктирная линия - рассчитанный спектр в предположении, что наряду с равномерным распределением, имеется  $\delta$ -слой акцепторов вблизи гетерограниц (поверхностная концентрация примеси в этом слое полагалась равной 25% от интегральной концентрации (на один период структуры) равномерно распределенной примеси). Стрелки показывают энергию ионизации для акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы (стрелка *a*), на гетерограницу (стрелка *b*) и в центр квантового барьера (стрелка *c*).

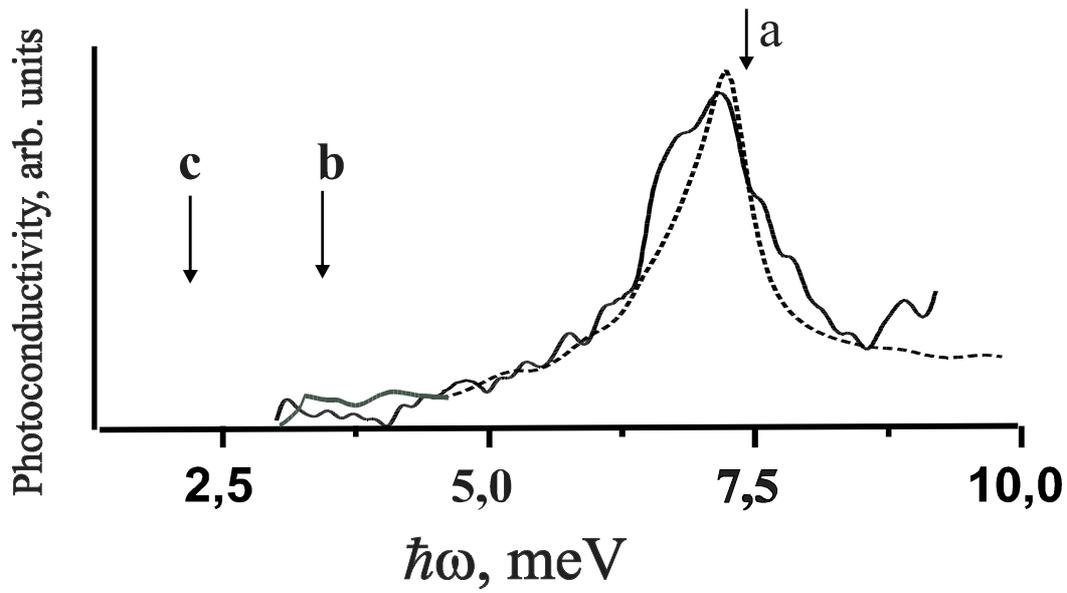


Рис.1.11. Спектр длинноволновой ИК фотопроводимости многослойной гетероструктуры Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> с квантовыми ямами #308 ( $x = 0.09$ ,  $d_{QW} = 355 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon_{11} = 0.34 \cdot 10^{-3}$ ,  $N_{QW} = 162$ ). Сплошная линия - экспериментальная кривая. Пунктирная линия представляет рассчитанный спектр генерации свободных дырок в предположении, что примесь равномерно распределена по квантовым ямам изучаемой гетероструктуры.

## Глава 2. Квазистационарные (резонансные) состояния акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs с квантовыми ямами

### 2.1. Поглощение света, связанное с резонансными состояниями примеси

#### 2.1.1. Особенности волновых функции квазистационарных состояний и спектров поглощения, связанных с переходами на резонансные состояния

Понятие квазистационарного или метастабильного состояния возникает при рассмотрении системы с одной стороны способную к распаду, с другой стороны - со временем жизни, значительно превышающим характерные времена всех других процессов происходящих в системе. Такая система, строго говоря, обладает непрерывным спектром энергий. Примером быть частица, окруженная высоким потенциальным барьером. Состояние с энергией, соответствующей уровню размерного квантования в такой яме, будет обладать большим, но конечным временем жизни.

Явления, связанные с нестабильностью, можно описывать с помощью уже известной системы полных стационарных состояний, однако при таком описании мы сталкиваемся с рядом качественных особенностей. Например, при рассеянии частицы на потенциале имеющем вид квантовой ямы, волновая функция частицы во внутренней области (в области действия потенциала) при определенных энергиях резко возрастает (резонансное рассеяние). Этот эффект эквивалентен тому, что попадающая в область потенциала частица будет находиться в этой области продолжительное время, т.е. состояние частицы с энергией резонансного рассеяния оказывается метастабильным [35]. С другой стороны, метастабильное состояние является резонансным для процессов рассеяния.

В полупроводниках и полупроводниковых гетероструктурах структурах резонансные состояния примесей возникают, когда дискретные уровни попадают в непрерывный спектр. Это происходит, например, при приложении магнитного поля, когда примесный уровень, связанный с верхним уровнем Ландау, попадает в непрерывный спектр первой магнитной подзоны; квантовых ямах, когда примесные состояния под верхними подзонами размерного квантования попадают в континуум первой подзоны, а также, например, в узкозонных полупроводниках, когда акцепторный уровень оказывается в зоне проводимости.

В работе [36] проведено исследование квазистационарных состояний, возникающих вследствие конфигурационного взаимодействия между уровнями дискретного спектра, попадающих в непрерывный спектр, и непрерывным спектром. Взаимодействие между локализованными и делокализованными состояниями описывается оператором  $\hat{V}$ . Волно-

вая функция метастабильного уровня искалась в виде “конфигурации” волновой функции дискретного состояния  $\Phi$  и состояний непрерывного спектра  $\psi_{E'}$ , т.е. в случае отсутствия вырождения функция искалась в виде:

$$\Psi = a\Phi + \int dE' b_{E'} \psi_{E'} \quad (2.1)$$

где  $b_{E'}$  – коэффициент, зависящий от энергии состояния непрерывного спектра  $E'$ , коэффициент  $a$  показывает, какую долю по норме в квазистационарном состоянии будет иметь его “локализованная” часть. Условие нормировки функции  $\Psi$  имеет следующий вид:

$$\langle \Psi^* (E) | \Psi (E') \rangle = \delta(E - E') \quad (2.2)$$

После подстановки выражения (2.1) в уравнение Шредингера получаем уравнения для коэффициентов [36]:

$$E_{\Phi} a + \int dE' V_{E'} b_{E'} = E a \quad (2.3)$$

$$V_{E'} a + E' b_{E'} = E b_{E'}, \quad (2.4)$$

где  $V_{E'} = \langle \Phi | \hat{V} | \psi_{E'} \rangle$ ,  $E_{\Phi}$  – энергия локализованного состояния. Решение уравнений (2.3) и (2.4) с условием нормировки функции (2.2) дает следующие выражения [36]:

$$|a(E)|^2 = \frac{|V_E|^2}{[E - E_{\Phi} - F(E)]^2 + \pi^2 |V_E|^4} \quad (2.5)$$

$$b_{E'} = \left[ \frac{1}{E - E'} + \frac{(E - E_{\Phi} - F(E)) \delta(E - E')}{|V_E|^2} \right] V_{E'} a(E) \quad (2.6)$$

$$\text{где: } F(E) = P \int \frac{|V_{E'}|^2}{(E - E')} dE' \quad (2.7)$$

$P$  означает, что интеграл берется в смысле главного значения.

Положению резонансного уровня соответствует максимум функции  $a(E)$ . Отметим, что в случае, когда взаимодействие непрерывного и дискретного спектров мало, и энергия резонансного уровня не сильно отличается от  $E_{\Phi}$ , функция  $a(E)$  имеет вид функции Лоренца (при условии, что матричный элемент  $V_E$  мало меняется на ширине резонансного состояния). В этом случае полуширина резонансного состояния имеет вид:

$$\Gamma/2 = \pi |V_{E_{\Phi}}|^2, \quad (2.8)$$

что соответствует вероятности ухода частицы с квазилокального состояния в непрерывный спектр, т.е. в этом случае  $\Gamma = \hbar / \tau$ , где  $\tau$  – время жизни резонансного состояния.

В работе [36] рассмотрено также изменение спектра оптического поглощения, связанное с наличием резонансного состояния в непрерывном спектре. Вероятность перехо-

дов в присутствии резонансного уровня (нормированная на вероятность переходов в континуум без учета квазистационарных состояний в непрерывном спектре) имеет следующий вид [36]:

$$\frac{|\langle \Psi(E) | \hat{T} | i \rangle|^2}{|\langle \psi_E | \hat{T} | i \rangle|^2} = \frac{(q + \varepsilon)^2}{1 + \varepsilon^2}, \quad (2.9)$$

где  $\hat{T}$  - оператор оптического перехода,  $i$  – начальное состояние, например основной уровень,

$$\varepsilon = \frac{E - E_\Phi - F(E)}{\Gamma/2}, \quad (2.10)$$

$$q = \frac{\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle + P \int dE' V_{E'} \langle \psi_{E'} | \hat{T} | i \rangle / (E - E')}{\pi V_E \langle \psi_E | \hat{T} | i \rangle}. \quad (2.11)$$

Отметим, что выражение (2.9) справедливо только для действительных значений параметра  $q$  (параметр  $\varepsilon$  всегда имеет действительное значение), т.е. когда между состояниями дискретного и непрерывного спектров нет сдвига фазы. В случае комплексного  $q$  выражение (2.9) принимает вид:

$$\frac{|\langle \Psi(E) | \hat{T} | i \rangle|^2}{|\langle \psi_E | \hat{T} | i \rangle|^2} = \frac{(\text{Re}(q) + \varepsilon)^2 + (\text{Im}(q))^2}{1 + \varepsilon^2} \quad (2.12)$$

На рис.2.1 представлены зависимости вероятности перехода в непрерывный спектр при наличии в нем резонансного уровня от энергии для различных действительных значений параметра  $q$  (из работы [36]). Видно, что имеется нуль вероятности перехода при  $\varepsilon = -q$ . При этом пик вероятности перехода имеет асимметричный вид и становится похож по форме на функцию Лоренца при  $q \rightarrow \infty$ , т.е. если вероятность перехода на дискретный уровень много больше вероятности перехода в непрерывный спектр в окрестности этого локализованного состояния (т.е.  $\langle \Phi | \hat{T} | i \rangle \gg \pi V_E \langle \psi_E | \hat{T} | i \rangle$ ). Для комплексных  $q$  провала поглощения до нуля наблюдаться не должно (см. выражение (2.12)). Таким образом, возможно изучение параметров резонансных состояний по спектру поглощения.

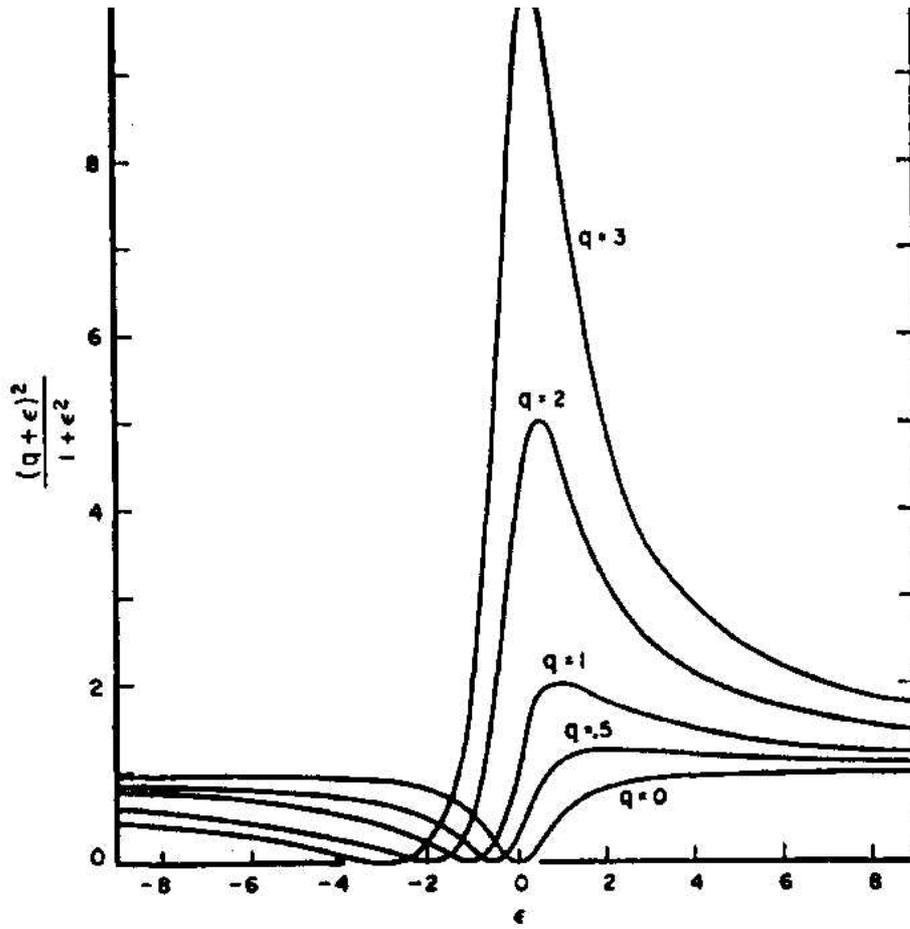


Рис.2.1. Зависимости вероятности переходов в непрерывный спектр при наличии резонансного уровня от энергии, нормированной на полуширину резонансного состояния (из работы [36]). Нуль энергии соответствует положению резонансного уровня.

### 2.1.2. Обнаружение квазистационарных состояний по спектрам поглощения света

Примером квазистационарных состояний могут служить примесные состояния, возникающие в объемном полупроводнике в магнитном поле [37-42]. Кулоновское поле приводит к появлению под каждой магнитной подзоной дискретных уровней, отвечающих состояниям, локализованным в окрестности примесного центра. Линии, соответствующие переходам на такие состояния были обнаружены в спектре фотопроводимости *n*-GaAs [37-39] и *p*-Ge [40-42].

В работе [39] изучены спектры фотовозбуждения мелких доноров в GaAs при  $T = 4.2$  К в магнитных полях до 85 кЭ. На рис.2.2 приведен спектр фотопроводимости мелких доноров в магнитном поле. Начальное состояние всех наблюдаемых переходов – основное  $1s$ -состояние доноров, связанное с нулевым уровнем Ландау. Линии переходов группируются в серии, соответствующие переходам на резонансные примесные состояния, связанные с определенным уровнем Ландау. Рис.2.3 показывает энергии переходов с основного донорного уровня в квазистационарные примесные состояния под верхними уровнями Ландау. Точки - эксперимент, сплошные линии – результаты расчета.

Положение основного  $1s$  состояния доноров в работе [39] находилось с помощью вариационной процедуры в приближении эффективной массы. Химический сдвиг для доноров находился из сравнения рассчитанной энергии перехода  $1s \rightarrow 2p$  с экспериментом (уровень  $2p$  - нижний возбужденный уровень под нулевым уровнем Ландау). Расчет энергий квазистационарных состояний под верхними уровнями Ландау проводился в работе [39] в рамках адиабатического приближения, в рамках которого описание продольного (вдоль магнитного поля) и поперечного движения электрона разделяется.

В работе [41] проведены экспериментальные и теоретические исследования квазистационарных состояний акцепторных центров в Ge. Экспериментально расстояние до таких уровней от краев подзон определялось путем сравнения измеренных значений магнитных полей, при которых наблюдалась резонансная рекомбинация или резонансная фотоионизация дырок в германии, со значениями магнитных полей, рассчитанными в предположении, что в этих процессах участвуют носители, находящиеся на дне подзон. На рис.2.4 представлена схема оптических переходов в германии, помещенном в магнитное поле (из работы [41]). Показаны переходы с основного акцепторного уровня, связанного с нижним уровнем Ландау, образованным тяжелыми дырками. Волновые функции квазистационарных состояний под вышележащими магнитными подзонами легких дырок образованы в основном состояниями легких дырок. Для легких дырок ларморовская энергия  $\hbar\omega_l = \hbar eH / m_l c$  сравнима с эффективной энергией Ридберга  $R_l = m_l e^4 / 2\hbar^2 \chi^2$  (где  $\chi$  - ди-

электрическая проницаемость,  $m_l$  - циклотронная масса легких дырок,  $e$  – заряд электрона,  $H$  – напряженность магнитного поля) в магнитном поле около 10 кЭ. Поэтому поля, при которых проводился эксперимент в работе [41] (30÷110 кЭ) достаточно большие и для теоретического рассмотрения акцепторных квазистационарных состояний под подзонами легких дырок было использовано, как и в работе [41] для доноров, адиабатическое приближение. Авторы отмечают хорошее согласие результатов расчета с экспериментом.

Другой пример квазистационарного состояния - донор, помещенный в квантовую яму гетероструктуры или сверхрешетки GaAs/AlGaAs (см работы [1, 43-47]). В работе [1] теоретически и экспериментально исследовался донорный спектр в сверхрешетках GaAs/AlGaAs. Показано, что с уменьшением ширины квантовой ямы состояние  $2p_0$ , связанное со второй подзоной размерного квантования, выходит в континуум первой подзоны (см. рис.1.1). Показано, что наблюдаемые в спектре поглощения однородно легированных сверхрешеток GaAs/AlGaAs коротковолновые линии (которые соответствуют энергии квантов, превышающих энергию связи основного состояния) связаны с переходом с основного уровня на уровень  $2p_0$ .

Отметим, что первая и вторая подзоны размерного квантования обладают разной четностью по отношению к отражению относительно плоскости, проходящей через центр квантовой ямы. Если примесь поместить в центр ямы, то присутствие иона донора такую симметрию не нарушает. Это приводит к тому, что под второй подзоной размерного квантования возникает серия примесных уровней, не взаимодействующих с нижней подзоной. Эти уровни будут локализованными, несмотря на то, что они попадают в непрерывный спектр первой подзоны размерного квантования: спектры носителей, относящихся к двум разным подзонам, можно разделить [43,44]. Если мы будем смещать ион примеси относительно центра квантовой ямы, симметрия по отношению к отражению относительно плоскости, проходящей через центр квантовой ямы, нарушится и возникнет взаимодействие между локализованными состояниями под второй подзоной и непрерывным спектром первой подзоны. В этом случае состояния дырок двух нижних подзон уже не будут независимы, поэтому состояние под второй подзоной будет смешано с состояниями непрерывного спектра первой подзоны [43-47]. Состояния под третьей подзоной будут квазистационарными и в случае расположения примесного иона в центре квантовой ямы.

Аналогичная ситуация реализуется в случае акцепторной примеси – примесные уровни под верхними подзонами попадают в непрерывный спектр нижних подзон. В настоящей главе представлены оригинальные результаты исследований квазистационарных акцепторных состояний в гетероструктурах Ge/GeSi и GaAs/InGaAs/GaAs (по материалам работ [A3-A15]).

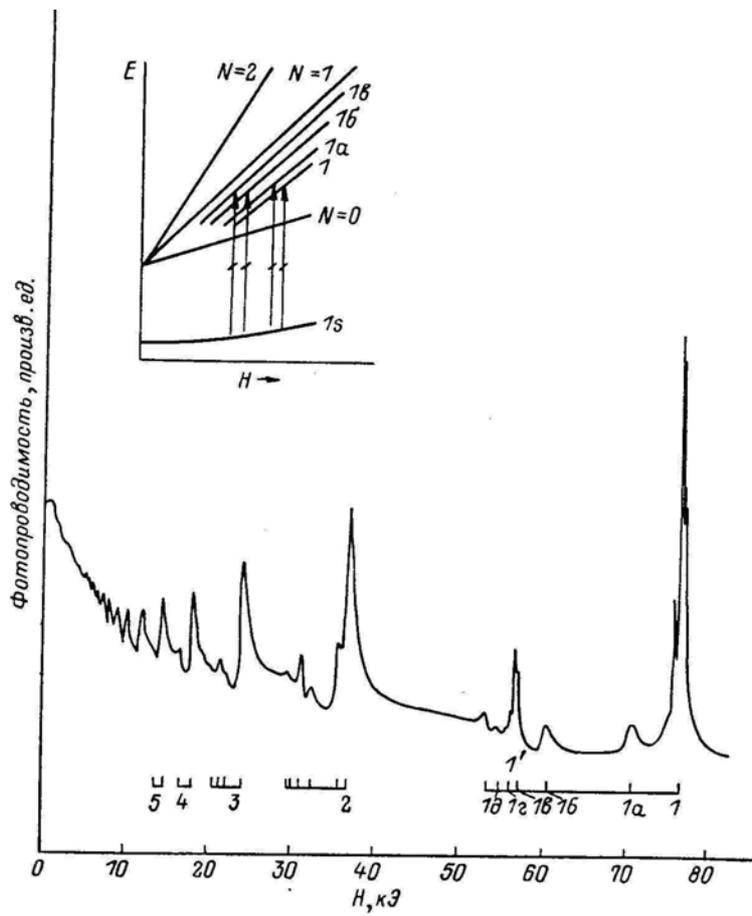


Рис.2.2. Спектр фотопроводимости *n*-GaAs в магнитном поле (из работы [39]).  $\lambda = 70.52$  мкм,  $T = 4.2$  К. На вставке – ход основного состояния доноров ( $1s$ ) и первых трех уровней Ландау в магнитном поле. Стрелками обозначены переходы с уровня  $1s$  в четыре резонансных состояния под уровнем Ландау

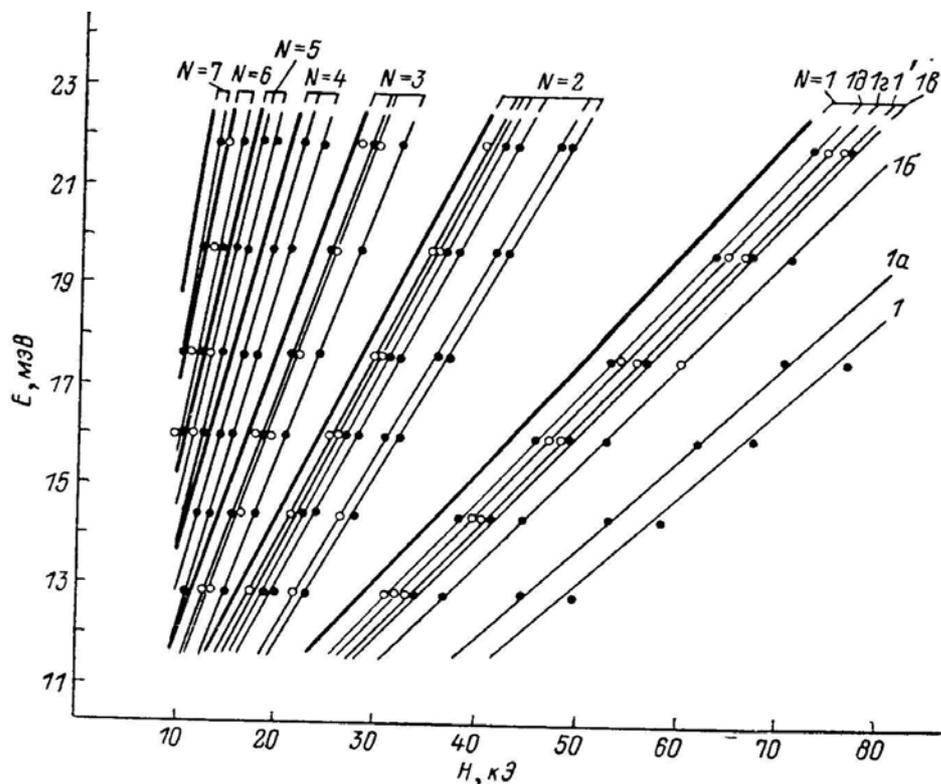


Рис. 2.3. Энергия переходов электронов с  $1s$  – состояния в возбужденные квазистационарные состояния под уровнями Ландау с  $1 \leq N \leq 7$  ( $12 \text{ мэВ} < \hbar\omega < 22 \text{ мэВ}$ ,  $10 \text{ кЭ} < H < 80 \text{ кЭ}$ ). (по данным работы [39]). Обозначения переходов даны на рис 2.1. Сплошные линии – расчет, точки – эксперимент. Темные и светлые кружки обозначают переходы с большой и малой интенсивностью.

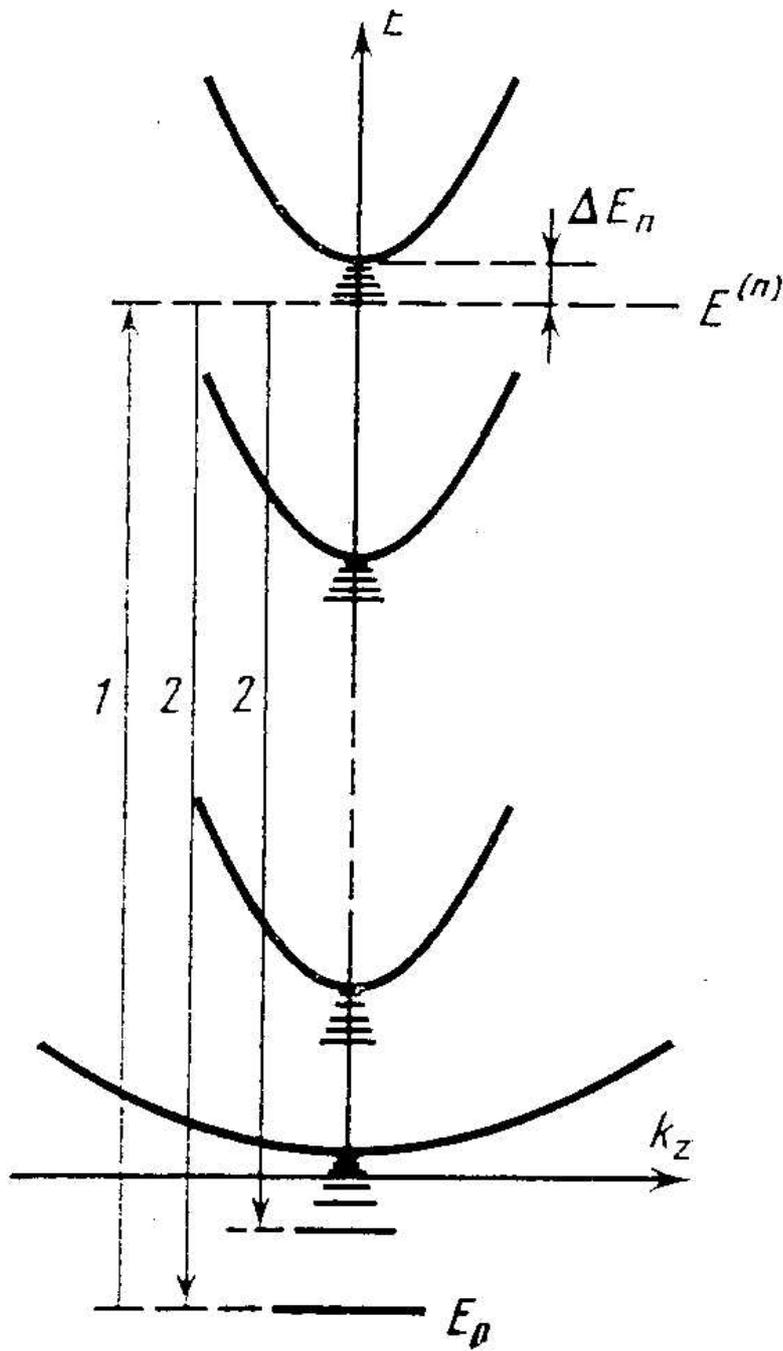


Рис. 2.4. Упрощенная схема энергетических уровней легких дырок в окрестности кулоновского центра в магнитном поле. Стрелками указаны переходы для процессов резонансной фотоионизации (1) и резонансной рекомбинации (2). Из работы [41].

## 2.2. Структура волновых функций акцепторных состояний, относящихся к различным подзонам размерного квантования, в гетероструктурах с квантовыми ямами

Метод расчета, представленный в главе 1, позволяет рассчитывать не только локализованные состояния, но и состояния непрерывного спектра. Решая этим методом уравнение Шредингера, получаем большой набор энергий, который включает несколько локализованных состояний и ряд состояний непрерывного спектра с шагом, определяемым шагом по  $k'$  в разложении (1.20). Как уже отмечалось, в гетероструктурах квазистационарные состояния возникают из-за того, что примесные уровни под верхними подзонами размерного квантования попадают в непрерывный спектр нижней подзоны. Таким образом, возникает задача, как из набора состояний непрерывного спектра выявить квазистационарные состояния. Предложенный метод поиска таких состояний основан на изучение структуры волновых функций состояний континуума.

Волновые функции акцепторов имеют сложную структуру. Разложение (1.20) включает члены, относящиеся к различным подзонам размерного квантования. Основное акцепторное состояние относится к первой подзоне размерного квантования  $hh1$  и обладает отрицательной энергией (относительно дна подзоны  $hh1$ ). Энергии состояний, относящихся к верхним подзонам, могут быть как отрицательными (локализованные состояния), так и положительными (резонансные состояния). Как уже отмечалось, в случае доноров в гетероструктурах с квантовыми ямами возбужденное  $2p_0$ -подобное состояние выходит в континуум первой подзоны размерного квантования при уменьшении ширины ямы [1]. Аналогичная ситуация наблюдается в случае акцепторов. Как отмечалось в главе 1, нижнее возбужденное состояние в гетероструктурах  $Ge/Ge_{1-x}Si_x$  ( $x \sim 0.1$ ) при больших ширинах квантовых ям образовано в основном функциями второй подзоны размерного квантования. При уменьшении ширины ямы это состояние “антипересекается” с вышележащими и выталкивается в непрерывный спектр первой подзоны (см. рис. 1.4).

На рис 2.5 представлены коэффициенты разложения волновых функций состояний акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы гетероструктуры  $Ge/Ge_{0.88}Si_{0.12}$  # 306 с шириной ямы  $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ . На рисунке представлены коэффициенты разложения по плоским волнам (по волновым функциям свободных дырок) для волновых функций основного и двух нижних возбужденных состояний, соответствующих проекции момента на ось  $z$   $J = \pm 3/2$ . Отметим, что в разложении волновых функций присутствуют дырочные состояния, как второй, так и первой подзон, так как в отличие от доноров дырочные подзоны вырождены по четности и поэтому кулоновский потенциал акцептора в центре квантовой

ямы приводит к взаимодействию двух подзон с одинаковой четностью. Видно, что нижнее возбужденное  $2p_0$ -подобное состояние (пунктирная линия) состоит в основном из состояний второй подзоны. Это состояние является локализованным (его энергия составляет - 1.37 мэВ). Если разложение волновой функции некоторого состояния акцептора включает в себя в основном состояния определенной дырочной подзоны, то мы будем считать такое состояние относящимся к этой подзоне. Как видно из сравнения пунктирной линии на рисунке 2.5а и сплошной линии на рис. 2.5б, часть волновой функции нижнего состояния, относящегося ко второй подзоне, подобна части волновой функции основного состояния, относящейся к первой подзоне размерного квантования. Как уже отмечалось,  $2p_0$ -подобное состояние при уменьшении ширины квантовой ямы выходит в непрерывный спектр нижней подзоны размерного квантования. Штрих пунктирная линия иллюстрирует изменение разложения волновой функции этого состояния, относящегося к первой подзоне при уменьшении ширины ямы до 160 Å, т.е. когда этот уровень уже является резонансным. Зависимость коэффициентов разложения волновой функции  $2p_0$ -подобного состояния от  $k$  по дырочным функциям второй подзоны при уменьшении ширины ямы качественно не меняется.

Квазистационарные состояния, относящиеся к вышележащим подзонам в непрерывном спектре первой подзоны, выделялись с помощью анализа зависимости от энергии долей вышележащих подзон в состоянии:

$$A(E, n) = \sum_{k=0}^{k_F} |C(E, k, n)|^2 \quad (2.13)$$

где  $k_F$  – предельное значение двумерного волнового вектора дырки  $k$  в разложении,  $C(n, k)$  - коэффициенты разложения, относящиеся ко  $n$ -ной подзоне размерного квантования,  $E$  – энергия акцепторного уровня. Энергия квазистационарного состояния, принадлежащего  $n$ -ой подзоне, соответствует максимуму  $A(E, n)$ .

Функция  $A(E, n)$  определяет долю локализованной части в волновой функции резонансного состояния, аналогично выражению (2.5). На рис. 2.6 представлены зависимости от энергии функции  $A(E, 2)$  для “нижнего возбужденного” квазистационарного состояния акцептора, помещенного в центр квантовой ямы гетероструктуры. Видно, что как и следует из выражения (2.5), зависимость  $A(E, 2)$  от энергии имеет резонансный характер.

Таблица 2.1 представляет спектр состояний акцептора, помещенного в центр квантовой ямы гетероструктуры #306, связанных с первыми тремя подзонами.

Таблица 2.1. Спектр состояний акцептора, помещенного в центр квантовой ямы гетероструктуры Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> # 306 ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $d_{bar} = 200 \text{ \AA}$ ,  $N_{QW} = 162$ , упругая деформация слоев Ge  $\varepsilon = 2.4 \times 10^{-3}$ ), связанных с первыми тремя подзонами размерного квантования дырок. Энергия отсчитывается от дна нижней подзоны.

Дно hh1	0 мэВ		
Дно hh2	4.8 мэВ		
Дно hh3	12.7 мэВ		
Номер состояния под подзонами	$J = \pm 3/2$	$J = \pm 1/2$	$J = \pm 5/2$
1hh1	-7.4 мэВ	-1.4 мэВ	-1.4 мэВ
2hh1	-1.0 мэВ	-0.6 мэВ	-0.6 мэВ
1hh2	-1.3 мэВ	3.7 мэВ	3.7 мэВ
1hh3	6.1 мэВ	10.5 мэВ	10.5 мэВ

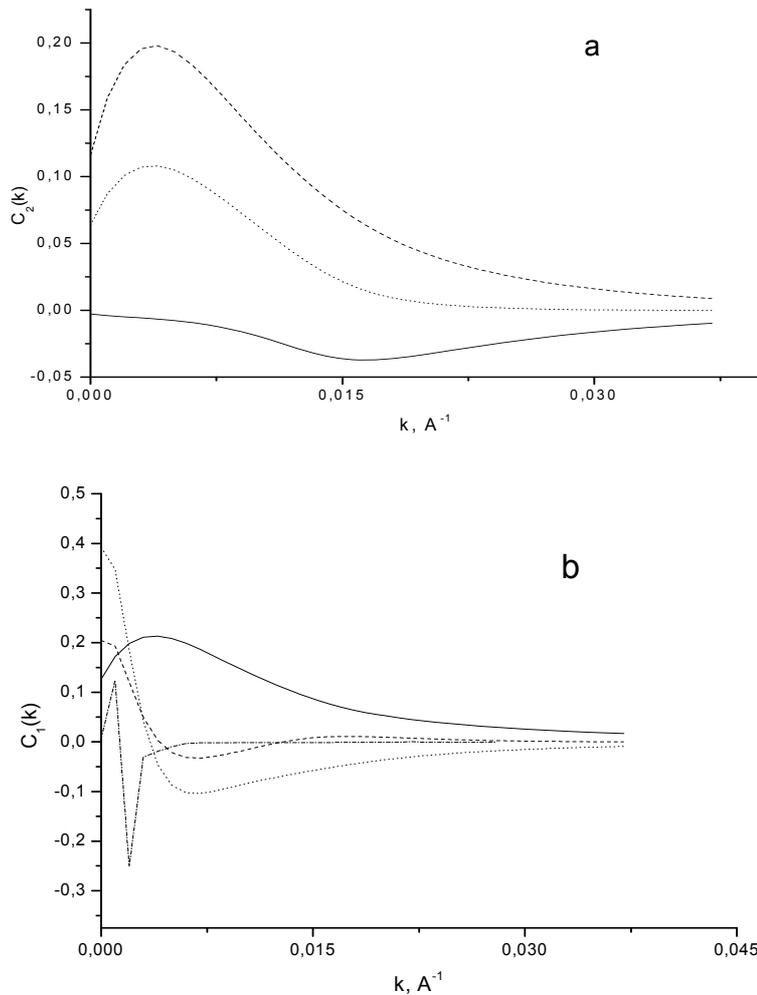


Рис.2.5. Коэффициенты разложения для волновых функций нескольких нижних состояний акцепторов, соответствующих  $J=\pm 3/2$ : (а) – по базисным функциям второй подзоны, (б) – по базисным функциям первой подзоны. Нормировка коэффициентов:  $\sum_{n,k} C_n^2(k) = 1$ . При-

мель помещена в центр квантовой ямы гетероструктуры Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> # 306 ( $d_{\text{QW}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $d_{\text{бар}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $N_{\text{QW}} = 162$ , упругая деформация слоев Ge  $\varepsilon = 2.4 \times 10^{-3}$ ). Сплошная линия – основное состояние (1s –подобное), пунктирная линия – первое возбужденное (2p<sub>0</sub> – подобное) состояние, точечная линия – 2s-подобное состояние. Штрих-пунктирная линия на рисунке (б) - разложение 2p<sub>0</sub>-подобного состояния по функциям нижней подзоны, при уменьшении ширины квантовой ямы до 160  $\text{\AA}$ .

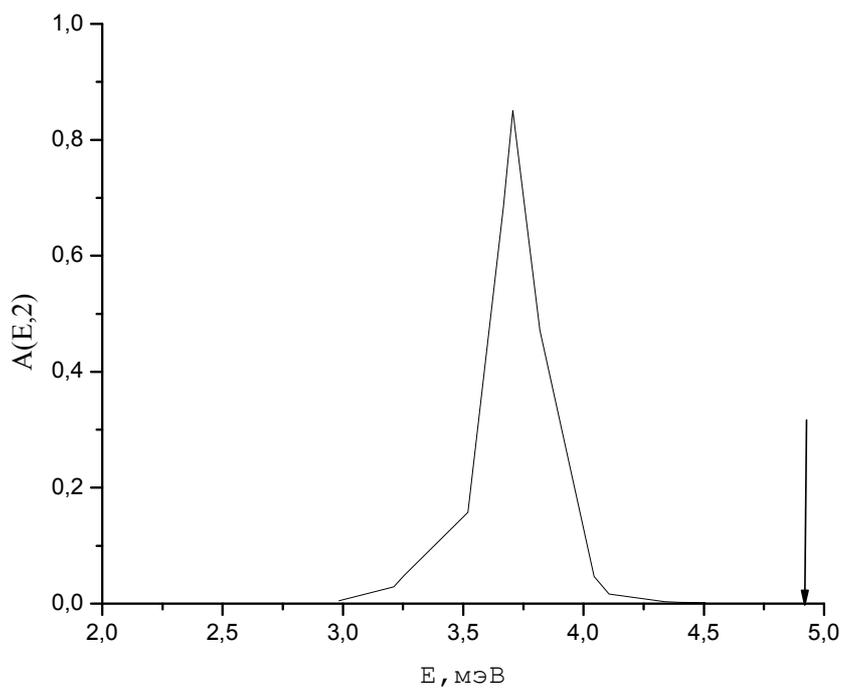


Рис.2.6. Зависимость доли второй подзоны размерного квантования в разложении состояний акцепторов в центре квантовой ямы в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> #306 по плоским волнам от энергии акцепторного состояния. Стрелка показывает край второй подзоны.

### 2.3. Наблюдение в спектрах фотопроводимости гетероструктур линий, обусловленных квазистационарными состояниями.

Как было сказано ранее, оптические переходы под действием электромагнитного излучения, падающего вдоль оси роста структуры, идут с основного состояния ( $J = \pm 3/2$ ) на акцепторные уровни, соответствующие  $J = \pm 1/2$  и  $J = \pm 5/2$ . Как видно из таблицы 2.1, под верхними подзонами размерного квантования имеются квазистационарные состояния, на которые возможны переходы под действием электромагнитного излучения.

На рис. 2.7 представлен рассчитанный спектр фотопроводимости гетероструктуры #306 с примесью в центре квантовой ямы в области частот, соответствующих переходам на квазистационарные акцепторные уровни, связанные с верхними подзонами. Поскольку такие состояния находятся в непрерывном спектре первой подзоны, считалось, что все носители, заброшенные излучением на резонансный уровень, дают вклад в фототок. Поэтому расчеты спектра фотопроводимости проводили, используя выражения (1.28) и (1.30). В спектре хорошо видны особенности, связанные с переходами на нижние возбужденные квазистационарные состояния, соответствующие энергиям кванта 11 мэВ (под вторую подзону) и 18 мэВ (под третью подзону). Стрелки 2 и 3 показывают переходы на края 2 – ой и 3 – ей подзон соответственно. Видно, что линия, соответствующая переходу под третью подзону, имеет асимметричный вид, предсказанный в работе [36] (см. рис. 2.1). Однако провала поглощения до нуля не наблюдается, что скорее всего связано с уширением примесных уровней, которое полагалось равным 0.25 мэВ (см. п.1.3.2). Как уже отмечалось, в длинноволновой области (до 10мэВ) фотопроводимость гетероструктуры Ge/GeSi #306 обусловлена главным образом переходами с основного состояния в непрерывный спектр (в подзону hh1, см рис.2.8), а также на локализованные возбужденные состояния (с последующей термической ионизацией). В коротковолновой области фотопроводимость определяют переходы на состояния верхних подзон размерного квантования (как на квазистационарные уровни, так и в состояния континуума).

На рис. 2.9 представлена коротковолновая часть спектра фотопроводимости образца #306. Пунктирная линия показывает рассчитанный спектр фотопроводимости образца #306 с учетом резонансных примесных уровней. Модель распределения примеси по гетероструктуре, бралась такой, чтобы наилучшим образом описать длинноволновую часть спектра фотопроводимости (см. главу 1), т.е. равномерное распределение +  $\delta$ -слой на гетерогранице. При этом для наилучшей подгонки расчета под эксперимент (сплошная кривая на рис.1b) в расчете пришлось уменьшить ширину квантовой ямы до 185 Å (по сравнению с шириной 200 Å, определенной методом рентгеновской дифракции). При таком

уменьшении ширины ямы энергия ионизации акцептора изменится менее чем на 0.15 мэВ, и поэтому длинноволновая часть спектра изменится незначительно. Как отмечалось в главе 1, спектр фотопроводимости должен иметь особенности, соответствующие переходам между уровнями акцепторов, помещенных в центре квантовой ямы (стрелки 1а, 2а, 3а на рис.2.8), в центре барьера (стрелки 1с, 2с, 3с) или на гетерогранице (стрелки 1б, 2б, 3б). Стрелки 2а,б,с и 3а,с на рис.2.8 показывают оптические переходы с основного состояния акцептора  $J = \pm 3/2$  на “возбужденные” резонансные уровни ( $J = \pm 1/2$  и  $J = \pm 5/2$ ), относящиеся ко второй (стрелки 2) и третьей (стрелки 3) подзонам размерного квантования. Видно, что линии 3а-3с хорошо выражены в измеренном спектре фотопроводимости образца #306. Достаточно заметные спектральные особенности, расположенные между 9 и 12 мэВ, можно связать с дублетом 2а – 2б. Таким образом, по особенностям в коротковолновой области спектра поглощения можно изучать положение резонансных энергетических уровней, связанных с верхними подзонами размерного квантования.

В работах [A14, A15] были проведены исследования квазистационарных состояний углерода в гетероструктуре InGaAs/GaAs с  $\delta$ -легированными гетерограницами. Исследованный образец #2106 выращивался методом МОС-гидридной эпитаксии при атмосферном давлении на плоскости (001) полуизолирующего GaAs и содержал 20 одиночных квантовых ям  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  ( $x = 0.12$ ) шириной 63 Å, разделенных широкими (600 Å) барьерными слоями GaAs. Легирующие  $\delta$ -слои углерода располагались на границе квантовых ям и барьеров ( $N_A = 2 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ). Для возбуждения примесных состояний использовался лазер на свободных электронах FELIX, перестраивавшийся в диапазоне 27–37 мкм. Излучение FELIX представляло собой микроимпульсы длительностью 6-8 пс, повторяющиеся с интервалом в 1 нс, объединенные в цуг длиной 6-8 мкс с частотой повторения 5 Гц. Максимальное значение энергии в микроимпульсе не превышало 5 мкДж, диаметр пучка излучения составлял около 1 см. Лазерное излучение доставлялось к поверхности образца, погруженного в жидкий He, по металлической трубке диаметром 1 см. Для измерения фототока на поверхность образца на расстоянии 3 мм друг от друга были нанесены металлические полосовые контакты. Значение напряжения смещения составляло около 2 В. Оптическое пропускание структуры в указанном диапазоне исследовалось при помощи фотоприемника Ge:Ga, расположенного непосредственно за образцом. Все измерения проводились при температуре 4.2 К.

Для интерпретации результатов эксперимента были рассчитаны энергии состояний акцептора в гетероструктуре #2106, при расположении примеси на границе квантовой ямы. Схематически вычисленные значения энергий состояний примеси показаны на рис.2.10. Эти состояния соответствуют проекциям полного момента импульса  $J = \pm 3/2$ ,  $J =$

$\pm 1/2$  и  $J = \pm 5/2$ . Рассчитанная энергия связи основного состояния акцептора ( $J = \pm 3/2$ ) составляет 11.5 мэВ. Энергии связи двух нижних резонансных состояний, соответствующих  $J = 1/2$  и  $J = \pm 5/2$  отстоят, соответственно, на 4.2 и 2.6 мэВ от энергии второй подзоны размерного квантования. Расстояние между дырочными подзонами равно 29 мэВ. Таким образом, получаем, что энергии разрешенных переходов из основного в резонансные состояния равны 36.3 и 38 мэВ.

В работе был рассчитан спектр фотопроводимости гетероструктуры #2106. В длинноволновой области спектра (энергии фотонов 10-15 мэВ) происхождение фотоносителей обусловлено оптическими переходами из основного состояния акцепторов в состояния непрерывного спектра (в первой подзоне) и на возбужденные локализованные состояния (с последующей термоионизацией). Для коротковолновой части спектра (энергии фотонов 30-45 мэВ) фотоносители рождаются благодаря переходам между основным состоянием и резонансными состояниями второй подзоны размерного квантования.

Для определения мощности излучения, поглощаемого структурой, в исследуемом диапазоне необходимо учесть решеточное отражение. Следует отметить, что в области 34-44 мэВ наблюдается сильная зависимость коэффициента отражения от длины волны (см. рис.2.11). Поэтому экспериментальные спектры фототока нормировались на спектр отражения GaAs в этом диапазоне [48]. Результат приведен на рис.2.11. Из сравнения рассчитанного и наблюдаемого спектров фототока видно, что пик в районе 36 мэВ обусловлен переходами дырок из основного состояния в нижнее возбужденное резонансное состояние, относящееся ко второй подзоне тяжелых дырок. Отметим, что расчет воспроизводит не только положение линии, но и качественно ее форму. Переходы в более высокие резонансные состояния не наблюдаются. Возможно, это связано с уширением резонансных состояний акцепторов из-за перекрытия волновых функций соседних примесных атомов. Ширина наблюдаемой линии порядка 1 мэВ, что свидетельствует о высоком качестве структуры.

На рис.2.12 приведена зависимость величины фототока в максимуме от мощности возбуждения. Видно, что с увеличением плотности мощности падающего излучения рост пика фототока насыщается. Вероятно, это связано с опустошением основного состояния акцептора. Вместе с тем, насыщение не наблюдается для энергий квантов  $\hbar\omega > 37$  мэВ, для которых поглощение значительно слабее (см. рис.2.11).

Таким образом, экспериментально обнаружены переходы из основного состояния акцептора в резонансное состояние, принадлежащее второй подзоне тяжелых дырок в квантовой яме гетероструктуры InGaAs/GaAs.

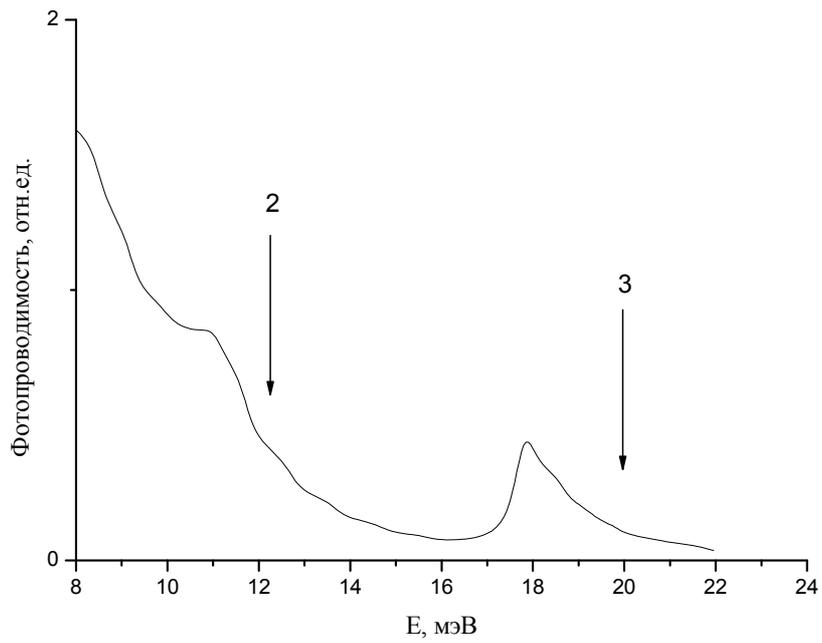


Рис.2.7. Фотопроводимость гетероструктуры Ge/ Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> #306 ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $d_{\text{бар}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $N_{QW} = 162$ , упругая деформация слоев Ge  $\varepsilon = 2.4 \times 10^{-3}$ ), рассчитанная в предположении, что примесь сосредоточена в центре квантовой ямы. Стрелки показывают положение краев подзон размерного квантования: стрелка 2 - край второй подзоны, стрелка 3 – край третьей подзоны.

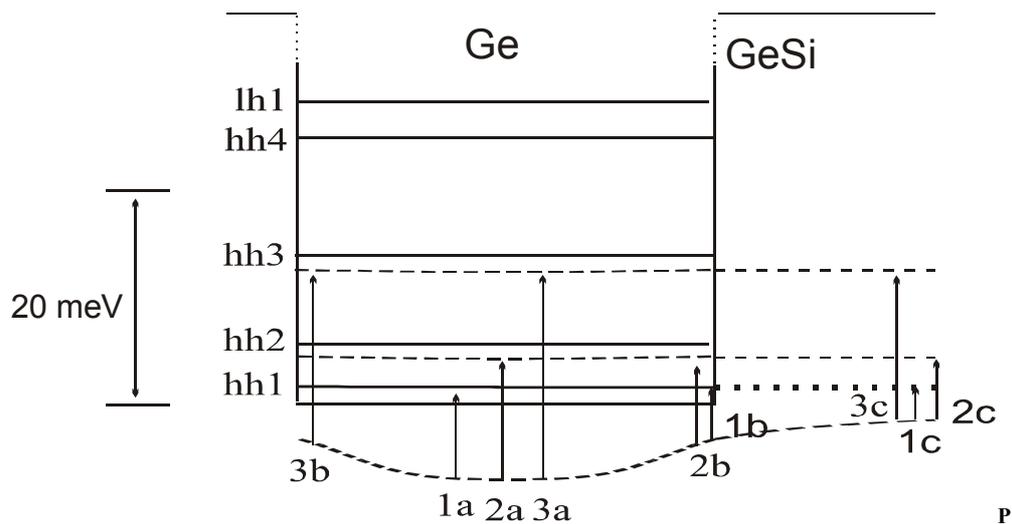


Рис.2.8. Энергетическая диаграмма состояний дырок в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> #306. Сплошными и пунктирными линиями показаны энергии подзон свободных дырок (тяжелые дырки: hh1-hh4, легкие дырки: lh1) и акцепторных состояний (основного и двум «возбужденных» резонансных) соответственно. Стрелки показывают энергии переходов для акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы (стрелки а), на гетерограницу (стрелки b) и в центр барьера (стрелки с). Точечная линия показывает положение конечного состояния для перехода 1с (дно нижней подзоны).

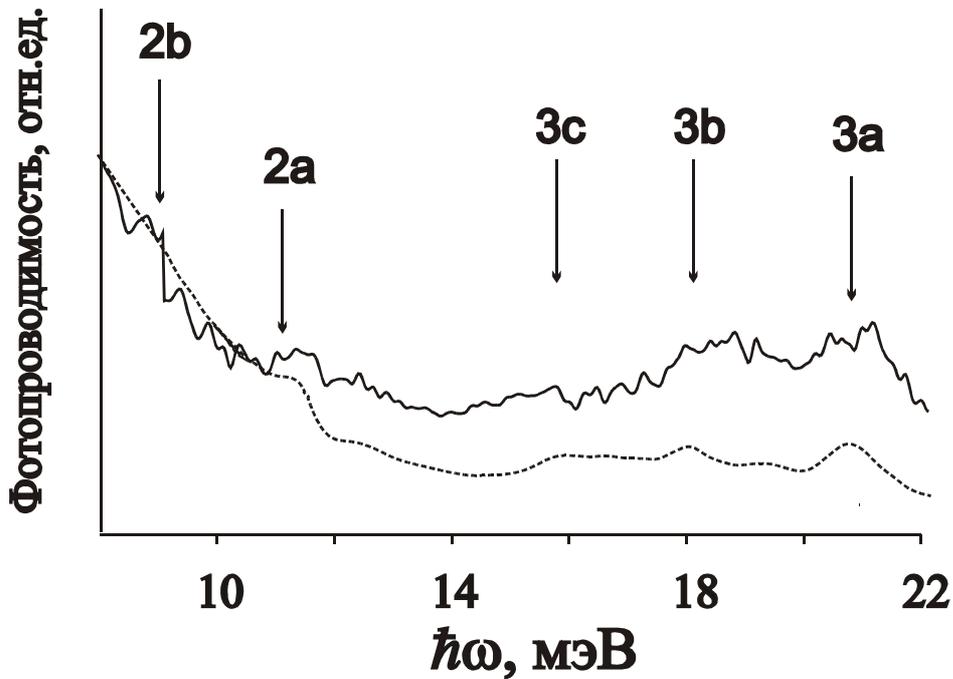


Рис.2.9. Коротковолновая часть измеренного (сплошная линия) и рассчитанного спектров фотопроводимости гетероструктуры Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> #306 ( $d_{QW} = 200 \text{ \AA}$ ,  $d_{\text{бар}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $N_{QW} = 162$ , упругая деформация слоев Ge  $\varepsilon = 2.4 \times 10^{-3}$ ). Пунктирные линии - рассчитанный спектр в предположении, что наряду с равномерным распределением, имеется  $\delta$ - слой акцепторов вблизи гетерограниц (поверхностная концентрация примеси в этом слое полагалась равной 25% от интегральной концентрации (на один период структуры) равномерно распределенной примеси). Стрелки показывают энергии переходов для акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы (стрелки а), на гетерограницу (стрелки б) и в центр квантового барьера (стрелка с).

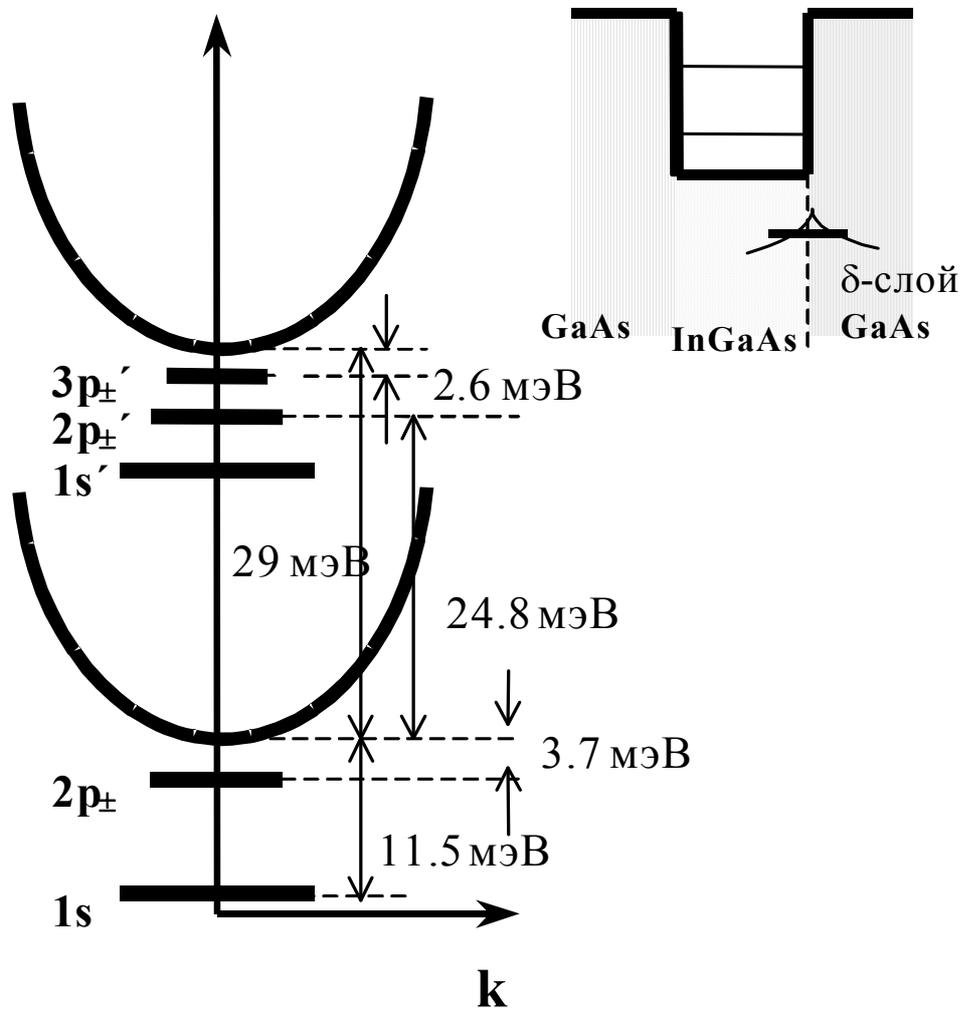


Рис.2.10. Рассчитанное положение уровней энергии акцептора в квантовой яме в гетероструктуре InGaAs/GaAs #2106 с примесью на гетерогранице.

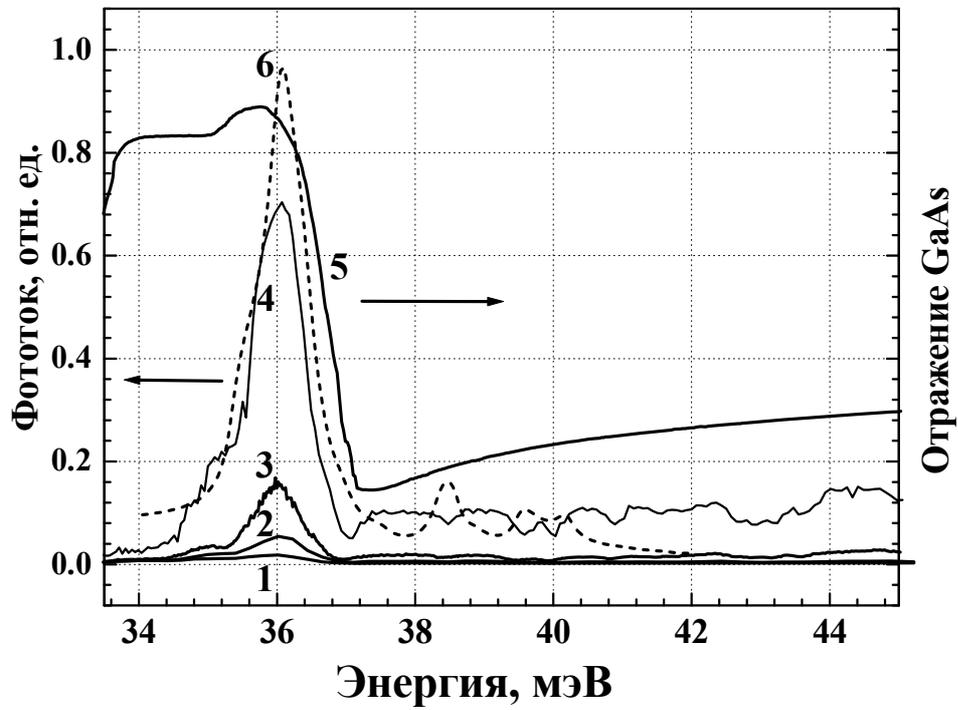


Рис.2.11. Спектр отражения GaAs и зависимости нормированного фототока гетеро-структуры InGaAs/GaAs #2106 от плотности мощности возбуждающего излучения (эксперимент): 1 – 5 Вт/см<sup>2</sup>; 2 – 50 Вт/см<sup>2</sup>; 3 – 5×10<sup>2</sup> Вт/см<sup>2</sup>; 4 – 5×10<sup>3</sup> Вт/см<sup>2</sup>; 5 – спектр отражения GaAs [48]. Рассчитанный спектр фотопроводимости представлен пунктирной кривой 6 (полуширина уровней полагалась равной 0.25 мэВ).

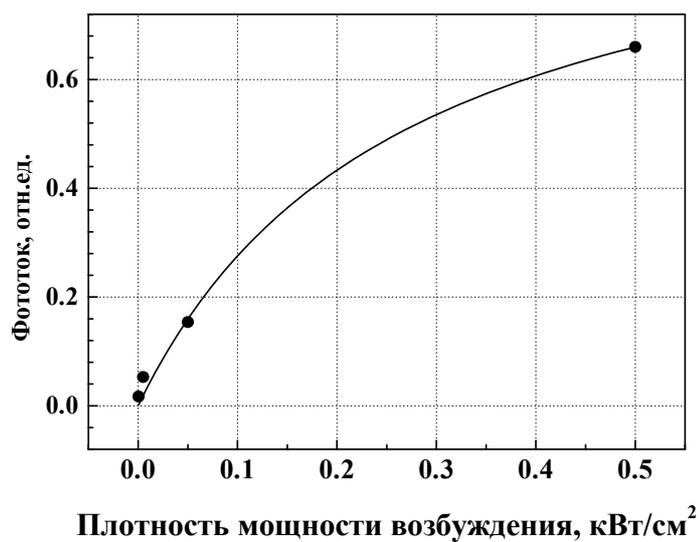


Рис.2.12. Зависимость интенсивности фототока в гетероструктуре InGaAs/GaAs #2106 в максимуме линии поглощения ( $\hbar\omega = 37$  мэВ, см. рис.2.11) от поглощенной мощности возбуждения.

### Глава 3. Резонансные состояния мелких акцепторов в одноосно деформированном германии

#### 3.1 Локализованные и резонансные состояния мелких акцепторов в Ge и Si

##### 3.1.1. Исследования спектра акцепторов в полупроводниках с решеткой типа алмаза

Атом элемента III группы, введенный в идеальную решетку германия или кремния, отдает дырку в валентную зону и заряжается отрицательно. С точки зрения электронной теории примесные состояния создаются волновым пакетом, формирующимся из одноэлектронных функций Блоха, локализованным на примеси. Чтобы решить задачу о примесных состояниях в одноэлектронном приближении необходимо учесть электрический потенциал, возмущающий идеальный периодический потенциал решетки. На расстояниях от примесного иона значительно превосходящих размер кристаллической решетки такой потенциал совпадает с кулоновским потенциалом ионного остатка, помещенного в однородную среду с диэлектрической проницаемостью полупроводника (в работе диэлектрическая проницаемость  $\chi$  для германия при  $T = 4.2$  К полагалась равной 15.36 [49], а для кремния  $\chi = 12.1$  [50]). Таким образом, если масштаб локализации волновой функции частицы много больше постоянной решетки (в этом случае вклад от окрестности иона примеси порядка постоянной решетки в функционал энергии будет незначительным), состояния примесей будут решениями уравнения Шредингера с периодическим потенциалом решетки и описанным выше кулоновским потенциалом. В этом случае волновая функция частицы на примесном центре может быть представлена в виде [51]:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^n F_j(\mathbf{r})\Phi_j(\mathbf{r}) \quad (3.1)$$

где суммирование ведется по энергетическим зонам идеального кристалла,  $\Phi_j(\mathbf{r})$  - функция Блоха  $j$ -той подзоны, соответствующая нулевому значению квазиволнового вектора,  $F_j(\mathbf{r})$  - плавно меняющаяся (на масштабе постоянной кристаллической решетки) функция, называемая огибающей волновой функцией. По теории возмущений можно получить уравнение для огибающих волновых функций (уравнение эффективной массы). В выражении (3.1) нужно оставлять только слагаемые, соответствующие зонам, вблизи которых находится примесный уровень. Так для акцепторов в полупроводниках IV группы, или в  $A_3B_5$  суммирование должно вестись по шести валентным подзонам (двукратно вырожденные подзоны легких и тяжелых дырок, которые в свою очередь вырождены в потолке валентной зоны при  $\mathbf{k}=0$ , и двукратно вырожденная спин-отщепленная подзона). В этом случае огибающую функцию можно рассматривать как шестикомпонентный вектор, в ко-

тором каждая компонента является комплексной амплитудой блоховской функции одной из подзон. Огибающие функции примесей находят, решая уравнение с гамильтонианом, включающим кулоновскую энергию иона примеси и шестимерный гамильтониан, описывающий кинетическую энергию дырок вблизи потолка валентной зоны [51]. Диагонализация гамильтониана кинетической энергии дает спектр валентной зоны, состоящий из подзон легких и тяжелых дырок и из спин-отщепленной подзоны.

В таблице 3.1 приведены величины спин-орбитального расщепления дырочных подзон в сравнении с энергиями ионизации акцепторов для Ge, Si. Видно, что в случае германия энергия ионизации акцепторов много меньше величины спин-орбитального расщепления, поэтому вклад спин-отщепленной подзоны в формирование локализованного состояния вблизи потолка валентной зоны будет мал. Поэтому при описании мелких акцепторных состояний в германии используют гамильтониан Латтинжера не учитывающий спин-отщепленную подзону и являющийся матрицей  $4 \times 4$ . В случае кремния необходимо учитывать все подзоны.

Таблица 3.1. Энергии ионизации некоторых акцепторных примесей в Ge и Si в сравнении со значениями спин-орбитального расщепления дырочных подзон.

	Расстояние до потолка спин-отщепленной подзоны	Примесь В	Примесь Al	Примесь Ga
Ge	290 мэВ [51]	10.8 мэВ [52]	11.15 мэВ [52]	11.3 мэВ [52]
Si	40 мэВ [51]	46 мэВ [53]	67 мэВ [53]	71 мэВ [53]

Решения уравнения для огибающих будут одинаковыми для любого однократно заряженного примесного иона, т.е. такое приближение игнорирует различие в химическом составе примесей (так называемый химический сдвиг) при нахождении спектра энергий примесей и волновых функций. Химический сдвиг проявляется, например, в различии энергии ионизации для различных элементов III группы. Отметим, что химический сдвиг для акцепторов в германии невелик (см. таблицу 3.1).

При расчете акцепторного спектра в германии решалось четырехмерное уравнение эффективной массы с гамильтонианом, включающим кулоновский потенциал и гамильтониан Латтинжера [25]:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 + 2.5\gamma_2) \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \gamma_3 (\mathbf{p} \cdot \mathbf{S})^2 + (\gamma_3 - \gamma_2) (\hat{p}_x^2 S_x^2 + \hat{p}_y^2 S_y^2 + \hat{p}_z^2 S_z^2) \right\}, \quad (3.2),$$

где  $S_{x,y,z}$  – компоненты оператора спина дырки, которую можно рассматривать как частицу со спином  $3/2$ ,  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  - параметры Латтинжера, являющиеся константами, зависящими от материала. Значения констант Латтинжера для германия и кремния приведены в таблице 3.2.

Таблица 3.2. Значения параметров Латтинжера для германия и кремния.

	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$
Ge	13.38 [54]	4.24 [54]	5.7 [54]
Si	4.22 [55]	0.53 [55]	1.38 [55]

Разработано несколько приближенных методов решения уравнения эффективной массы с таким гамильтонианом. Первые методы были разработаны на основе вариационной процедуры. Решение уравнения Шредингера эквивалентно поиску минимума функционала энергии. Для решения этой задачи необходимо надлежащим образом выбрать пробные функции. В работе [51] такие функции выбирались следующим образом:

1) функции искались в виде:

$$F^j(r, \theta, \varphi) = \sum_l r^l \exp\left(-\frac{r}{r_l}\right) \sum_{m=-l}^l c_{jlm} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (3.3)$$

где  $j$  - номер компоненты вектора  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ ,  $j = 1, \dots, 4$ ;

2) поскольку функция  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  должна быть собственной функцией оператора четности, в выражении (3.3) будут присутствовать слагаемые только одной четности по  $l$ .

3) Ряд по  $l$  обрывают на  $l = 2$  (при поиске волновой функции основного состояния) или на  $l = 3$ .

**Таким образом, пробная функция принимает вид:**

$$F^j(r, \theta, \varphi) = c_{j00} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right) + r^2 \exp\left(-\frac{r}{r_2}\right) \sum_{m=-l}^l c_{j2m} Y_{2m}(\theta, \varphi) \quad (3.4)$$

Здесь вариационными параметрами являются  $r_l$  и  $c_{jlm}$ . Чтобы уменьшить число вариационных параметров и упростить расчеты, пользовались соображениями симметрии. Значения энергий связи основного и нескольких возбужденных состояний, полученные в работе [51] описанным выше методом, представлены в таблице 3.3. Для основного состояния вариационная процедура [51] дает энергию связи 8.83 мэВ, что на 20 процентов меньше чем энергия ионизации бора в германии, для которого химический сдвиг наименьший (см. таблицу 3.1).

Таблица 3.3. Рассчитанные в работах [51] и [56] энергии связи основного и нескольких возбужденных состояний мелких акцепторов в германии и кремнии

Уровень	Энергия связи в Ge (мэВ) [51]	Энергия связи в Ge (мэВ) [56]	Энергия связи в Si (мэВ) [56]
$1\Gamma_8^+$	8.83	9.8	31.6
$1\Gamma_8^-$	3.98	4.2	11.2
$2\Gamma_8^+$	-	2.9	8.6
$2\Gamma_8^-$	2.4	2.5	7.6
$1\Gamma_6^-$	1.9	-	-

Известны и другие способы расчета спектра мелких акцепторов в германии. В работе [56] были рассчитаны энергии связи основного и возбужденных состояний мелких акцепторов в кремнии и германии в приближении сильного спин-орбитального взаимодействия, т.е. пренебрегая спин-отщепленной подзоной. Метод решения четырехмерного уравнения (3.2) в работе [56] основан на использовании того факта, что анизотропия закона дисперсии дырок для в Ge невелика (чего нельзя сказать о Si!). Поэтому при расчете акцепторного спектра была использована сферическая модель, т.е. в выражении (3.2) было опущено слагаемое пропорциональное  $(\gamma_3 - \gamma_2)$ , ответственное за анизотропию закона дисперсии дырок. При этом параметры  $\gamma_3$  и  $\gamma_2$  заменяются в выражении (3.2) на “усредненный” параметр  $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$ . В этом случае гамильтониан Латтинжера принимает вид:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 + 2.5\gamma) \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \gamma (\hat{\mathbf{p}} \mathbf{S})^2 \right\}. \quad (3.5)$$

В сферической модели полный момент  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  является интегралом движения. Из выражения (3.5) видно, что гамильтониан Латтинжера состоит из водородоподобной части и спин-орбитальной части, пропорциональной  $(\hat{\mathbf{p}} \mathbf{S})^2$ . Отметим, что спин-орбитальная часть гамильтониана, «замешивает» водородоподобные состояния, у которых орбитальные моменты отличаются на  $\Delta L = 0, \pm 2$ . Исходя из этого, волновые функции основного состояния акцепторов искались в следующем виде [56]:

$$\Psi_{s,j=3/2}(r, \theta, \varphi) = \begin{pmatrix} f_1(r) \\ 0 \\ f_2(r) Y_{2,2}(\theta, \varphi) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Функции  $f_1(r)$  и  $f_2(r)$  определялись с помощью вариационной процедуры. Они искались в виде рядов по функциям Гаусса:

$$f(r) = \sum_{i=1}^{21} A_i \exp(-\alpha_i r^2), \quad (3.7)$$

коэффициенты разложения  $A_i$  являются вариационными параметрами, параметры  $\alpha_i$  были выбраны в виде геометрической прогрессии:  $\alpha_{i+1} = g\alpha_i$  причем  $\alpha_1 = 10^{-2} / \sqrt{a_0}$ , а  $\alpha_{21} = 5 \times 10^5 / \sqrt{a_0}$ , где  $a_0 = \frac{\hbar^2 \varepsilon_0^2 \gamma_1}{e^2 m_0}$  - боровский радиус. Полученная этим методом энергия ионизации мелкого акцептора составляет 9.8 мэВ для германия и 31.6 мэВ для кремния. В работе [57] вычислены поправки к энергии ионизации акцептора в германии, связанные с анизотропией. С учетом этих поправок энергия связи акцептора в германии в приближении эффективной массы составляет около 10.3 мэВ.

### 3.1.2. Влияние деформации на спектр акцепторов в германии

**Рассмотрим на примере германия, как изменяется энергетический спектр дырок при упругой деформации полупроводника с решеткой типа алмаза вблизи края валентной зоны. Как известно, потолок валентной зоны в германии находится в  $\Gamma$ -точке. Диагонализация гамильтониана (3.2) дает вырожденные в т.  $k = 0$  подзоны тяжёлых ( $h$ ) и лёгких ( $l$ ) дырок**

$$E_{l,h}(k) = Ak^2 \pm [B^2 k^2 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)]^{\frac{1}{2}} \quad (3.8)$$

При малой деформации, рассматривая ее влияние на дырочный спектр, можно ограничиться линейными по деформации, т.е. пропорциональными компонентам тензора деформации, членами. Влияние деформации полупроводника на дырочный спектр учитывается с помощью гамильтониана деформации [26], по форме напоминающего четырехмерный гамильтониан Латтинжера

$$H_d = \begin{vmatrix} f & h & j & 0 \\ h^* & g & 0 & j \\ j^* & 0 & g & -h \\ 0 & j^* & -h^* & f \end{vmatrix} \quad (3.9)$$

Элементы матрицы пропорциональны компонентам тензора деформации ( $\varepsilon_{ij}$ ). В частном случае одноосной деформации при выборе оси  $z$  вдоль направления приложения давления тензор деформации имеет вид:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, \quad \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} < 0 \quad (3.10)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{-2(C_{11} + 2C_{12}) + 4C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \cdot \varepsilon_{xx} = -0.37\varepsilon_{xx} \quad (3.11)$$

Значения коэффициентов  $C$  для Ge и Si приведены в таблице 3.4.

Таблица 3.4

Параметр	Ge [58]	Si [58]
$C_{11}$ ГПа	131.1	167.7
$C_{12}$ , ГПа	49.2	64.98
$C_{44}$ , ГПа	68.2	80.35

**В таком базисе деформационный потенциал имеет вид:**

$$H_d = a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} + b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad (3.12)$$

где  $a$  и  $b$  – константы, зависящие от материала и от направления приложения давления. Первое слагаемое в гамильтониане не оказывает влияние на спектр дырок, а только смещает уровень отсчета энергии, поэтому в дальнейшем его учитывать не будем. Поскольку при одноосной деформации, две отличные от нуля компоненты тензора деформации выражаются через третью, которая в свою очередь пропорциональна приложенному напряжению, деформационный гамильтониан можно переписать в виде:

$$H_d = \begin{vmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta}{2} \end{vmatrix}. \quad (3.13)$$

$\Delta = KP$ , где  $P$  – величина давления приложенного вдоль оси деформации, положительный знак  $P$  соответствует одноосному растяжению, коэффициент  $K = 3.7$ мэВ/кбар, для германия, деформированного в кристаллографическом направлении (111), и 6мэВ/кбар для гер-

мания, деформированного в кристаллографическом направлении (001), [59],  $\Delta$  - величина расщепления краев дырочных подзон при приложении давления.

Расчет спектра акцепторных состояний в одноосно сжатом вдоль оси (001) и вдоль оси (111) германии был выполнен в работе [60]. Авторы развили вариационный метод аналогичный [56], используя сферическое приближение. Было показано, что энергия связи акцептора убывает с ростом деформации при сжатии как вдоль направления (001), так и вдоль (111). Нужно отметить, что сферическое приближение хорошо работает только в случае малых деформаций, при значительных деформациях будет существенным отличие закона дисперсии дырок с волновыми векторами перпендикулярными оси деформации от закона дисперсии дырок с волновыми векторами параллельными давлению (см рис. 3.1).

### 3.1.3. Исследование квазистационарных состояний в германии и кремнии

Квазистационарные состояния в германии и кремнии возникают во-первых из-за спин-орбитального расщепления: состояния связанные со спин-отщепленной подзоной попадают в континуум двух нижних подзон, во-вторых, при деформации кристалла германия или кремния подзоны легких и тяжелых дырок расщепляются, и акцепторные состояния, связанные с верхней подзоной, попадают в континуум нижней подзоны.

Квазистационарные состояния в кремнии были обнаружены экспериментально в работах [61, см. также 62]. В этих работах изучалось поглощение дальнего ИК излучения легированного акцепторами кремния. На рис 3.2 представлен измеренный спектр поглощения излучения кремнием, легированного бором (из работы [61]). В коротковолновой части спектра хорошо видны узкие пики, соответствующие энергиям значительно превышающим энергию ионизации. Эту особенность авторы [61] связывают с переходами с основного уровня акцепторов на “возбужденные”  $p$ -подобные квазистационарные состояния, связанные со спин-отщепленной подзоной. Отметим, что пик, связанный с переходом на состояние  $2p$  ( $2p'$ -линия) хорошо виден также в спектре поглощения кремния, легированного галлием и алюминием [61].

Квазистационарные состояния в одноосно деформированном германии изучались в работах [10-15]. Интерес к таким состояниям обусловлен в первую очередь обнаружением стимулированного длинноволнового ИК излучения в одноосно сжатом  $p$ -Ge при приложении сильного электрического поля при гелиевых температурах [10-15]. Электрическое поле приводит к ионизации мелких акцепторов и разогреву дырок в валентной зоне. При некотором пороговом давлении ( $P \approx 4$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [111]$ ,  $P \approx 3$  кбар для  $\mathbf{P} \parallel [001]$ ) наблюдается резкое увеличение интенсивности длинноволнового ИК излучения из образца. Это явле-

ние авторы [10, 12-15] связали с возникновением стимулированного излучения при переходах дырок из инверсно-заселенного резонансного состояния в локализованные акцепторные состояния в запрещенной зоне. При интерпретации спектров стимулированного излучения (см., например, рис.3.3) в работах [12,13,62] были сделаны приближенные оценки положения резонансных состояний. В пределе больших деформаций каждая из расщепившихся подзон и связанные с ней примесные уровни рассматривались независимо [63]. Состояния примесного центра вблизи каждой подзоны при этом описывается уравнением

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{\epsilon r} \right] \Psi = E \Psi \quad (3.14)$$

(здесь главная ось эллипсоида постоянной энергии направлена вдоль  $z$ ,  $m_{\parallel}$ ,  $m_{\perp}$  - эффективные массы вдоль оси эллипсоида и в плоскости, перпендикулярной оси  $z$  соответственно. Ось  $z$  выбрана вдоль направления деформации. Значения эффективных масс для случая одноосного сжатия вдоль направления [111], использованные при расчете акцепторного спектра в работе [63], представлены в таблице 3.5.

Таблица 3.5

	Верхняя подзона (подзона тяжелых дырок)	Нижняя подзона (подзона легких дырок)
$m_{\parallel}$	$0.5 m_0$	$0.04 m_0$
$m_{\perp}$	$0.05 m_0$	$0.13 m_0$

Спектр резонансных состояний находился как спектр локализованных состояний примеси вблизи простой анизотропной зоны; при расчетах использовался вариационный метод. В таблице 3.6 представлены рассчитанные в [63] энергии локализованных и резонансных состояний акцепторов.

Таблица 3.6. Энергии локализованных и квазистационарных состояний в одноосно сжатом Ge в пределе больших деформаций ( $P_{\parallel}$ [111]) по данным работы [63], а также энергии оптических переходов из нижнего квазистационарного состояния на локализованные уровни  $P = 6.85$  кбар, ( $\Delta = 27.4$  мэВ)

Состояния	Энергии локализованных состояний под дном нижней подзоны,	Энергии квазистационарных состояний под дном верхней подзоны,	Энергии оптических переходов из квазистационарного состояния $1s$ в локализованные

	мэВ	мэВ	состояния, мэВ
1s	3.8	4.76	26.4
2p <sub>±</sub>	1.3	0.9	23.9
2s	1.2	1.53	23.8
2p <sub>0</sub>	0.8	2.0	23.4

Авторы [12,13,62] связывают линии в спектре стимулированного излучения с переходами с основного квазистационарного состояния на уровни 1s (линия 2), 2p<sub>±</sub> (самая сильная линия 1) и 2p<sub>0</sub> (линия 3). Отмечается, что расстояния по энергии между линиями в спектре хорошо согласуются с расстояниями между соответствующими уровнями.

При небольших и промежуточных деформациях использовалась модель потенциала нулевого радиуса [12], т.е. кулоновский потенциал заменялся потенциалом сферически симметричной ямы малого (по сравнению масштабом локализации волновой функции) радиуса. Параметры потенциальной ямы выбирались так, чтобы в недеформированном кристалле существовал только один четырехкратно вырожденный уровень акцептора, и его энергия связи совпадала с энергией связи примеси галлия в германии (11.3 мэВ). При одноосной деформации это состояние расщепляется на два двукратно вырожденных уровня, один из которых оказывается связан с верхней подзоной и с ростом давления, попадая в континуум нижней дырочной подзоны, становится квазистационарным (см. рис.3.4). Состояния можно охарактеризовать проекцией полного момента импульса на ось деформации: примесный уровень связанный с верхней подзоной при одноосном сжатии соответствует проекции момента  $M = \pm 3/2$ , а состояние связанное с нижней подзоной при одноосном сжатии соответствует проекции  $M = \pm 1/2$ . В рамках модели потенциала нулевого радиуса были получены значения давления, при которых отщепленное состояние с  $M = \pm 1/2$  попадает в непрерывный спектр. Эти значения составляют около 4 кбар для германия сжатого в направлении (111) и 3 кбар для сжатия в направлении (001). В работе [12] отмечается, что такая модель не может претендовать на высокую точность в количественном описании акцепторных состояний в деформированном полупроводнике, так как потенциал нулевого радиуса является довольно грубым приближением для кулоновского потенциала. В дальнейшем в работах [44-47,64] был использован другой метод расчета положения и времени жизни квазистационарных акцепторных состояний в одноосно сжатом германии. Он основан на использовании метода конфигурационного взаимодействия, впервые предложенного Фано для изучения автоионизации атома гелия. Волновая функция акцепторного состояния представляется в виде разложения

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{+1/2} = \varphi_{\mathbf{k}}^{+1/2} + \sum_{\mu=\pm 3/2} a_{\mathbf{k}}^{+1/2,\mu} \phi^{\mu}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu=\pm 1/2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{b_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{+1/2,\nu}}{(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'} + i\gamma)} \varphi_{\mathbf{k}'}^{\nu}, \quad (3.15)$$

где функции  $\varphi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}$  являются решениями уравнения Шредингера без кулоновского центра, т.е. представляют собой плоские волны, а функции  $\phi^{\mu}(r)$  - решения уравнения эффективной массы с кулоновским слагаемым и гамильтонианом Латтинжера, у которого отбросили недиагональные элементы, отвечающие за взаимодействия подзон. Подставляя эту функцию в уравнения с полным гамильтонианом, находят коэффициенты разложения и  $\gamma$  - полуширину квазистационарного состояния. Нижнее метастабильное состояние по данным работы [64] выходит в континуум при давлении 1.4 кбар для германия сжатого в направлении [111] и 0.9 кбар для сжатия в направлении [001] [64]. Максимальная полуширина уровня при этом составляет 2.5 мэВ и 2 мэВ соответственно. Нужно отметить простоту данного метода, позволяющего делать аналитические оценки параметров резонансного состояния для реального кулоновского потенциала, однако модель накладывает существенные ограничения на вид волновой функции квазистационарного акцепторного состояния, в частности на вид ее локализованной части  $\phi^{\mu}(r)$ , когда при ее расчете отбрасываются недиагональные члены гамильтониана Латтинжера, что допустимо только для значительных давлений.

В настоящей главе представлены расчеты локализованных и резонансных состояний в деформированном германии, выполненных вариационным методом с использованием теории групп [A16–A22] и методом разложения по плоским волнам [A23–A26].

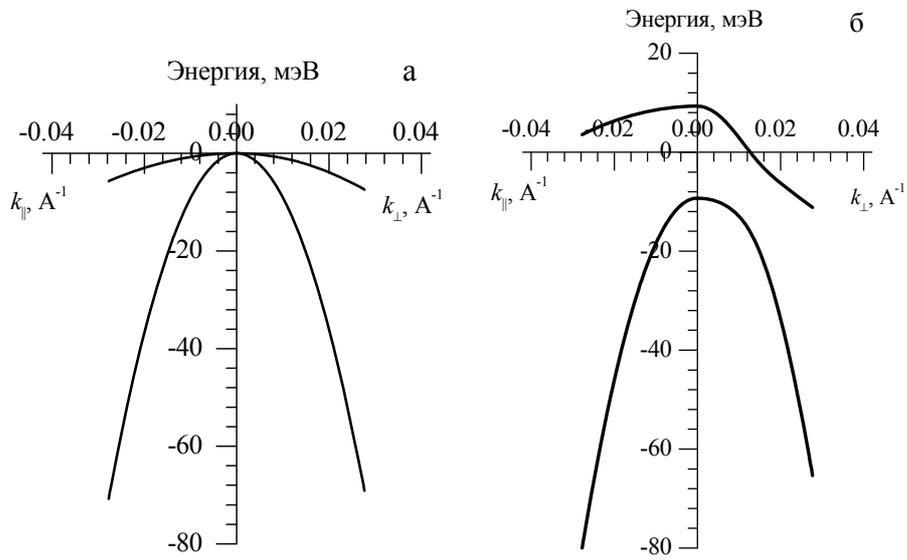


Рис.3.1. Изменение закона дисперсии дырок вблизи потолка валентной зоны объёмного германия при одноосном растяжении вдоль оси  $[111]$  ( $k_{\parallel} \parallel [111]$ ,  $k_{\perp} \parallel [11\bar{2}]$ ):

а)  $P = 0$ ;    б)  $P = 5$  кбар.

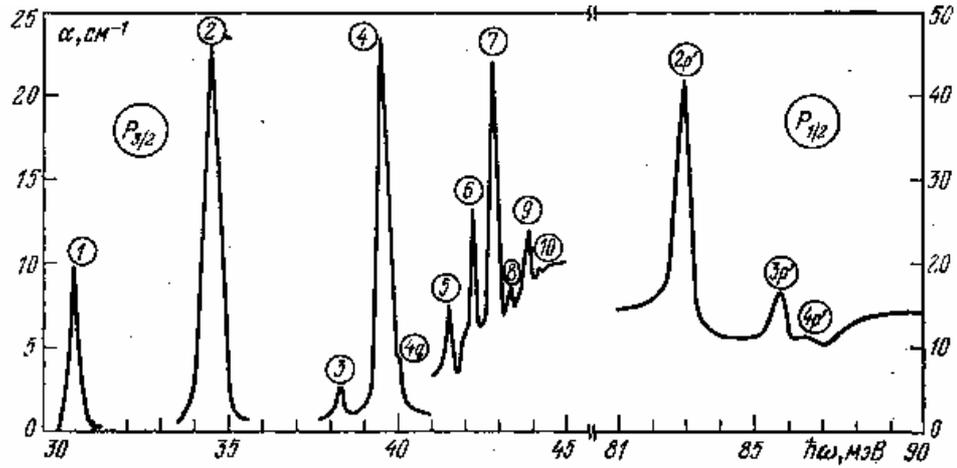


Рис. 3.2. Спектр поглощения мелкой акцепторной примеси бора в кремнии при гелиевой температуре в образцах с концентрацией легирующей примеси  $p = 1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  (линии 1—4q) и  $2.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  (линии 5—10 и 2p', 3p', 4p') [61]. Линии 1—10 обусловлены переходами на примесные состояниями вблизи верха валентной зоны; линии 2p', 3p', 4p' — переходами на примесные состояниями, образованными вблизи верха отщепленной из-за спин-орбитального взаимодействия нижней ветви валентной зоны кремния.

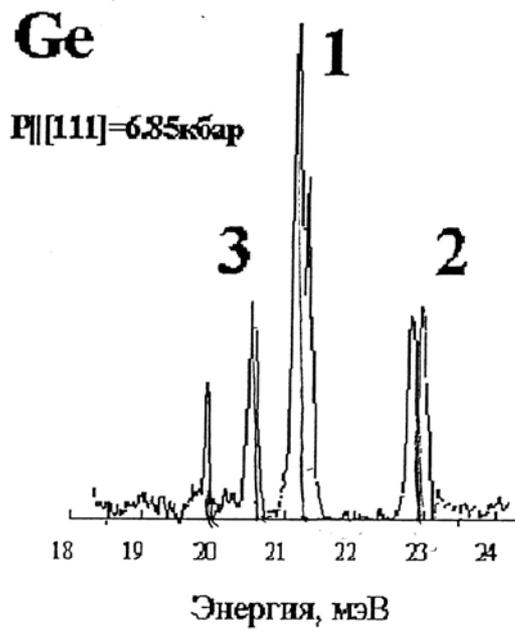


Рис.3.3. Спектр стимулированного излучения одноосно сжатого в направлении [111] германия при  $P = 6,85$  кбар [10, 12-15].

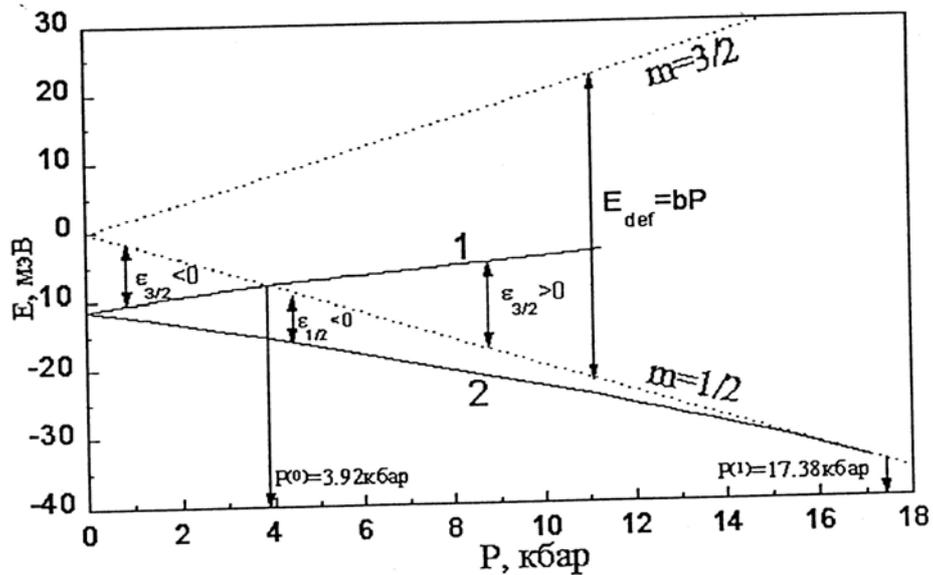


Рис.3.4. Зависимость рассчитанных в рамках модели потенциала нулевого радиуса энергий примесных состояний от приложенного вдоль оси [111] [12]. 1 - состояние, связанное с верхней подзоной ( $M = \pm 3/2$ ), 2 – состояние, связанное с нижней подзоной ( $M = \pm 1/2$ ), пунктир – положение краев дырочных подзон.

### 3.2. Вариационный расчет состояний мелкого акцептора в одноосно деформированном германии

В этой части главы представлен метод, развитый в работах [A16-A22], для расчета спектра мелких акцепторов в одноосно растянутом в направлении [111] германии на основе вариационного метода, развитого в работе [51] для расчета уровней акцептора в недеформированном германии.

#### 3.2.1. Выбор пробных функций для расчета состояния мелкого акцептора в растянутом вдоль оси [111] германии

Выберем систему координат  $\hat{x} \parallel [1\bar{1}0]$ ,  $\hat{y} \parallel [11\bar{2}]$ ,  $\hat{z} \parallel [111]$ , направив ось  $z$  вдоль оси деформации. При этом деформационный гамильтониан принимает диагональный вид (3.12). Как было сказано выше, величина расщепления дырочных подзон  $\Delta$  пропорциональна приложенному давлению и коэффициент пропорциональности  $K$  для деформированного вдоль оси [111] германия равен 3.7 мэВ/кбар. Гамильтониан Латтинжера (3.2), в этой системе координат имеет вид:

$$H_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

где

$$F = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) + \frac{D}{2\sqrt{3}}(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (3.17)$$

$$G = A(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{D}{2\sqrt{3}}(k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \quad (3.18)$$

$$H = \frac{i}{\sqrt{3}} \left( B - \frac{D}{\sqrt{3}} \right) k_+^2 - \frac{2i}{\sqrt{3}} \left( B + \frac{D}{2\sqrt{3}} \right) k_z k_-, \quad (3.19)$$

$$I = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left( B + \frac{2D}{\sqrt{3}} \right) k_-^2 - \sqrt{\frac{2}{3}} \left( B - \frac{D}{\sqrt{3}} \right) k_z k_+, \quad (3.20)$$

**Пробные функции для вариационной процедуры выбирались в виде разложения по водородоподобным функциям аналогично (3.4). Вариационные параметры – коэффициенты разложения и длины локализации водородоподобных функций. Чтобы уменьшить число таких параметров и тем самым упростить расчеты, были использованы ограничения, накладываемые на вид волновой функции симметрией.**

В одноосно деформированном вдоль направления [111] германии центру зоны Бриллюэна соответствует точечная группа симметрии  $D_{3d}$ . Этой же группой симметрии

обладает точка L в недеформированном германии. Поэтому волновые функции акцепторов в деформированном материале будут преобразовываться по дополнительным представлениям двойной группы в точке L. Существует 6 дополнительных неприводимых представлений группы  $D_{3d}$ :  $L_4^+$ ,  $L_5^+$ ,  $L_6^+$ . Волновая функция основного состояния акцептора преобразуется по неприводимому представлению, соответствующему потолку валентной зоны. В недеформированном германии потолку валентной зоны соответствует четырехмерное представление  $\Gamma_8^+$  [51]. Это представление следующим образом разлагается на неприводимые представления группы  $D_{3d}$ :

$$\Gamma_8^+ = L_4^+ + L_5^+ + L_6^+. \quad (3.21)$$

Представления  $L_4^+$  и  $L_5^+$  одномерны и комплексно сопряжены друг с другом, поэтому они должны рассматриваться как одно двумерное неприводимое представление для преобразования волновых функций  $L_{4,5}^+$  [26]. Представление  $L_6^+$  двумерно. Как уже отмечалось, одноосная деформация снимает вырождение подзон легких и тяжелых дырок в т.  $\mathbf{k} = 0$ . При этом волновые функции, соответствующие состояниям с проекцией полного момента на ось деформации равной  $\pm 3/2$  (тяжелые дырки), преобразуются по представлению  $L_{4,5}^+$ . Волновые функции состояний с проекцией полного момента на ось деформации равной  $\pm 1/2$  (легкие дырки) преобразуются по представлению  $L_6^+$ . Отметим, что у определенных как тяжелые дырок масса в направлении  $[111]$  больше, чем у легких (почти в 10 раз).

**Построим пробные функции вида (3.4), преобразующиеся по неприводимым представлениям  $L_{4,5}^+$  и  $L_6^+$ . Для этого нужно взять функцию вида (3.4), такую, чтобы в ней присутствовали все сферические гармоники (нужно выбирать так, чтобы получить максимально общий вид пробной функции, преобразующейся по заданному представлению). Затем к этой функции нужно применить проекционный оператор представления  $L_{4,5}^+$  или  $L_6^+$   $P = \frac{1}{G} \sum_g X_g T_g$ , где  $G$ -мощность группы,  $X_g$  характер неприводимого представления,  $T_g$ -оператор преобразования симметрии; суммирование ведется по элементам группы. На координатную функцию оператор  $T_g$  действует следующим образом:  $T_g F(x) = F(g^{-1}x)$  Функция, получившаяся в результате применения этого оператора, является базисной функцией представления. Применяя к ней преобразования симметрии можно получить остальные функции вида (3.4), осуществляющие вместе с первой соответствующее представление. Характеристики этих неприводимых представлений приведены в таблице 4.3.**

Таблица 4.3. Характеры дополнительных неприводимых представлений двойной точечной группы  $D_{3d}$ . Черта над элементом группы означает поворот на  $360^\circ$ . Элементы равные приведенным умноженным на инверсию не включены в таблицу. Характеры этих элементов  $X_{ig} = \pm X_g$ . Выбор знака зависит от четности функции.

	E	$\bar{E}$	$\delta_{3xyz}^{-1}, \delta_{3xyz}$	$\bar{\delta}_{3xyz}^{-1}, \bar{\delta}_{3xyz}$	$\sigma_{x\bar{y}}, \sigma_{z\bar{y}}, \sigma_{\bar{x}z}$	$\bar{\sigma}_{x\bar{y}}, \bar{\sigma}_{z\bar{y}}, \bar{\sigma}_{\bar{x}z}$
$L_4^\pm$	1	-1	-1	1	i	-i
$L_5^\pm$	1	-1	-1	1	-i	i
$L_6^\pm$	2	-2	1	-1	0	0

Состояние, волновые функции которого преобразуются по  $N$ -мерному неприводимому представлению, как минимум  $N$ -кратно вырождено. В нашем случае есть два одномерных представления и одно двумерное.  $L_4^\pm$  и  $L_5^\pm$  комплексно сопряжены, имеют комплексно сопряженные базисные функции, а значит, отвечают одной энергии. Следовательно, естественно ожидать, что при наложении деформации четырехкратно вырожденное основное состояние расщепится на два двукратно вырожденных. У преобразований группы  $D_{3d}$  есть два инварианта: координата вдоль оси растяжения ( $z$ ) и расстояние до этой оси ( $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ ). Далее ищем пробные функции в виде (3.4), заменяя  $z$  на  $qz$ , где  $q$  - дополнительный вариационный параметр, отвечающий за сжатие (или растяжение) волновой функции вдоль оси деформации. Затем потребуем, чтобы волновые функции преобразовывались по представлениям  $L_4^\pm$  и  $L_5^\pm$ . Тогда в результате применения проекционного оператора к “деформированной” вдоль оси  $z$  функции вида (3.4), получаем пробные функции для состояний, на которые расщепится основное состояние акцептора:

$$F_{L_4} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} e^{\frac{\sqrt{\rho^2 + (qz)^2}}{a}} + \left\{ c_2 [\rho^2 - 2(qz)^2] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} + c_3 \rho^2 \begin{pmatrix} 0 \\ ie^{-2i\varphi} \\ e^{2i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} + c_4 \rho \cdot z \begin{pmatrix} 0 \\ -ie^{i\varphi} \\ e^{-i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} \right\} e^{\frac{\sqrt{\rho^2 + (qz)^2}}{b}} \quad (3.22)$$

$$F_{L_6} = c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (qz)^2}}{a}\right) + \left\{ c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ \rho^2 - 2(qz)^2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} i\rho \cdot z e^{i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_4 \begin{pmatrix} i\rho \cdot z e^{-i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_5 \begin{pmatrix} i\rho^2 e^{2i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + c_6 \begin{pmatrix} i\rho^2 e^{-2i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right\} \exp\left(-\frac{\sqrt{\rho^2 + (qz)^2}}{b}\right) \quad (3.23)$$

Рассмотрим, как будут расщепляться при одноосной деформации нижние возбужденные состояния. В отсутствие деформации четыре нижних возбужденных состояния представляют из себя: два четырехкратно вырожденных уровня, волновые функции которых преобразуются по  $\Gamma_8^-$ , и два двукратно вырожденных уровня (их волновые функции преобразуются по  $\Gamma_6^-$  и  $\Gamma_7^-$  соответственно). При наложении деформации представление  $\Gamma_8^-$  расщепляется аналогично представлению  $\tilde{A}_8^+$ :  $\Gamma_8^- = L_4^- + L_5^- + L_6^-$ , а представления  $\Gamma_6^-$  и  $\Gamma_7^-$  переходят в неприводимое представление  $L_6^-$ . В итоге получается два уровня, функции которых преобразуются по  $L_4^-$  и  $L_5^-$ , и четыре уровня, функции которых преобразуются по  $L_6^-$ . Пробные волновые функции можно выбрать, оставив в выражении (3.4) в суммировании по  $l$  слагаемые с  $l = 1$  и  $3$  ( $p$  и  $f$ -подобные состояния) [51] и потребовав, чтобы функции преобразовывались по  $L_4^-$  ( $L_5^-$ ) или по  $L_6^-$ . Ниже приведены выражения для пробных функций возбужденных состояний:

а) пробная функция для  $L_4^-$ -уровней:

$$\begin{aligned}
\Psi_{4,5} = & c_1 z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{f}} + ic_2 \rho \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \\ ie^{-i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{f}} + \\
& + c_3 z \left(z^2 - \frac{1}{5}r^2\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + ic_4 \rho \left(z^2 - \frac{3}{5}r^2\right) \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \\ ie^{-i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + \\
& + ic_5 \rho^2 z \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-2i\varphi} \\ ie^{2i\varphi} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + c_6 \rho^3 \begin{pmatrix} e^{3i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ ie^{-3i\varphi} \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + c_7 \rho^3 \begin{pmatrix} e^{-3i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ ie^{3i\varphi} \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}}
\end{aligned} \tag{3.24}$$

б) пробная функция для  $L_6^-$ -уровней:

$$\begin{aligned}
\Psi_6 = & c_1 z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{f}} + \rho \begin{pmatrix} i(c_2 e^{i\varphi} + c_3 e^{-i\varphi}) \\ c_4 e^{-i\varphi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{f}} + \\
& + c_5 z \left(z^2 - \frac{1}{5}r^2\right) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + \rho \left(z^2 - \frac{3}{5}r^2\right) \begin{pmatrix} i(c_6 e^{i\varphi} + c_7 e^{-i\varphi}) \\ c_8 e^{-i\varphi} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + \\
& + i\rho^2 z \begin{pmatrix} c_9 e^{2i\varphi} + c_{10} e^{-2i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}} + \rho^3 \begin{pmatrix} c_{11} e^{3i\varphi} + c_{12} e^{-3i\varphi} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{\sqrt{(\rho^2+(qz)^2)}}{b}}
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Здесь-  $c_i, q, f, b$  - вариационные параметры. Далее проводилось варьирование функционала энергии с приведенными пробными функциями для основных и возбужденных состояний с гамильтонианом уравнения (4.5) для различных величин приложенного давления.

### 3.2.2. Результаты вариационного расчета акцепторного спектра в односно

растянутом германии; сопоставление с экспериментальными данными

Рассчитанные зависимости энергий расщепленного основного состояния акцептора  $L_{4,5}^+$  (с волновой функцией (3.22)) и  $L_6^+$  (с волновой функцией(3.23)) от величины модуля деформации  $\epsilon_{xx}$  приведены рис.3.5. Начало отсчета энергии соответствует краю подзоны тяжелых дырок. Полученная в работе энергия ионизации основного состояния акцептора для случая  $P = 0$  равна 8.87 мэВ, что хорошо согласуется с величиной 8.83 мэВ, получен-

ной в работе [51]. При больших деформациях ( $\epsilon_{xx} > 15 \cdot 10^{-3}$ ) энергия ионизации основного состояния выходит на асимптотическое значение 5.57 мэВ, величина которого хорошо согласуется с расчетом в модели простой зоны с анизотропной массой [28].

На рис.3.6 представлены зависимости масштабов локализации волновой функции основного состояния вдоль оси деформации и в перпендикулярном направлении от величины деформации. Хорошо видно, что радиус локализации (“боровский” радиус) вдоль направления растяжения уменьшается с ростом деформации до 4.0 нм, а в перпендикулярном направлении увеличивается. Такое поведение объясняется изменением масс в соответствующих направлениях.

В работе были найдены два возбужденных состояния с волновыми функциями (3.25). При нахождении второго состояния на вариационные параметры было наложено дополнительное условие: требование ортогональности к нижнему возбужденному состоянию функции (3.25). Для состояний с функцией типа (3.24) было найдено только нижнее возбужденное состояние, поскольку второе с ростом деформации быстро выходит в непрерывный спектр. Зависимости энергий рассчитанных возбужденных состояний акцептора от величины деформации  $\epsilon_{xx}$  также представлены на рис.3.5. Справа приведены соответствующие в пределе больших деформаций обозначения состояний мелкого примесного центра вблизи простой анизотропной зоны ( $1s$ ,  $2p_0$ ,  $2p_{\pm}$ ). Видно, что энергии возбужденных уровней быстрее выходят на асимптотические значения, чем энергия основного состояния, что связано, очевидно, с меньшей энергией связи возбужденных состояний.

Выполненный расчет акцепторного спектра в одноосно растянутом Ge позволил интерпретировать наблюдаемые линии и полосы фотопроводимости гетероструктур Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> с широкими квантовыми ямами. Напомним, что в таких структурах квантовые ямы для дырок реализуются в слоях Ge. Под широкой подразумевается квантовая яма, ширина которой многократно превосходит характерную протяженность волновой функции в основном состоянии акцептора, т.е. 40 Å (см. рис.3.6). В таких ямах спектр мелких акцепторов в основном определяется деформацией материала ямы, т.е. фактически величиной расщепления подзон легких и тяжелых дырок.

Спектр примесной фотопроводимости образца Ge/GeSi #309 с толстыми слоями германия показан на рис.3.7. Спектр в целом сдвинут в длинноволновую область по сравнению со спектром объемного *p*-Ge ( $\hbar\omega_{\max} \approx 12$  мэВ, см., например, [65]) и состоит из линии с максимумом при  $\hbar\omega \approx 5.3$  мэВ и широкой полосы  $\hbar\omega = 7.4 \div 10$  мэВ. В этом образце эффекты размерного квантования незначительны, и спектр фотопроводимости хорошо согласуется с описанной выше теоретической моделью (рис.3.5; соответствующая образцу #309 деформация отмечена вертикальной линией). Линии при  $\hbar\omega \approx 5.3$  мэВ соответствует

переход из основного состояния  $L_{4,5}^+$  в первое возбужденное состояние  $L_{4,5}^-$ . Расстояние между уровнями  $L_{4,5}^+$  и  $L_6^-(1)$  составляет 7.1 мэВ, что хорошо согласуется с началом коротковолновой полосы в спектре на рис.3.7. Фотопроводимость в области более высоких частот в этом случае может быть связана, очевидно, с переходами в вышележащие возбужденные состояния и в континуум.

Отщепившееся от основного уровня состояние, функции которого преобразуются по представлению  $L_6^+$ , с ростом давления быстро приближается к краю подзоны тяжелых дырок. Это состояние, связанное с подзоной легких дырок, имеет тенденцию к выходу в континуум, однако этот эффект не может быть получен с помощью вариационного расчета. Среди возбужденных уровней акцептора имеются отвечающие той же симметрии  $d$ -подобные состояния, связанные с нижней подзоной тяжелых дырок. Используемая в данной вариационной процедуре пробная функция соответствует  $s$ -подобным и  $d$ -подобным состояниям. При пересечении основного  $s$ -подобного состояния, связанного с верхней подзоной легких дырок, и возбужденного состояния, связанного с нижней подзоной тяжелых дырок, вариационный расчет будет давать энергию  $d$ -подобного возбужденного состояния, связанного с нижней подзоной [A16].

Нужно отметить, что разработанный метод не позволяет находить квазистационарные акцепторные состояния, поскольку водородоподобные пробные функции не обладают асимптотикой квазистационарного состояния (убегающей волной). В следующей части главы представлен метод, позволяющий рассчитывать спектр квазистационарных состояний и проследивать их генезис из локальных уровней с ростом давления.

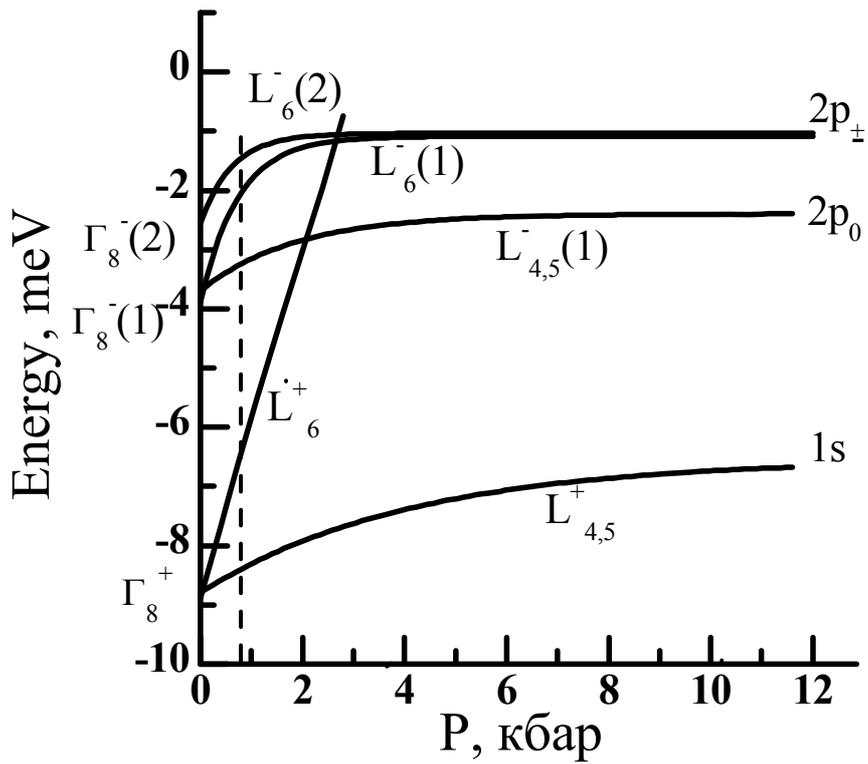


Рис.3.5. Зависимости энергий связи основного и нижних возбужденных состояний акцептора в одноосно растянутом вдоль [111] германии от величины давления. Вертикальная пунктирная линия отмечает значение давления, соответствующее расщеплению подзон легких и тяжелых дырок в гетероструктуре Ge/GeSi #309.

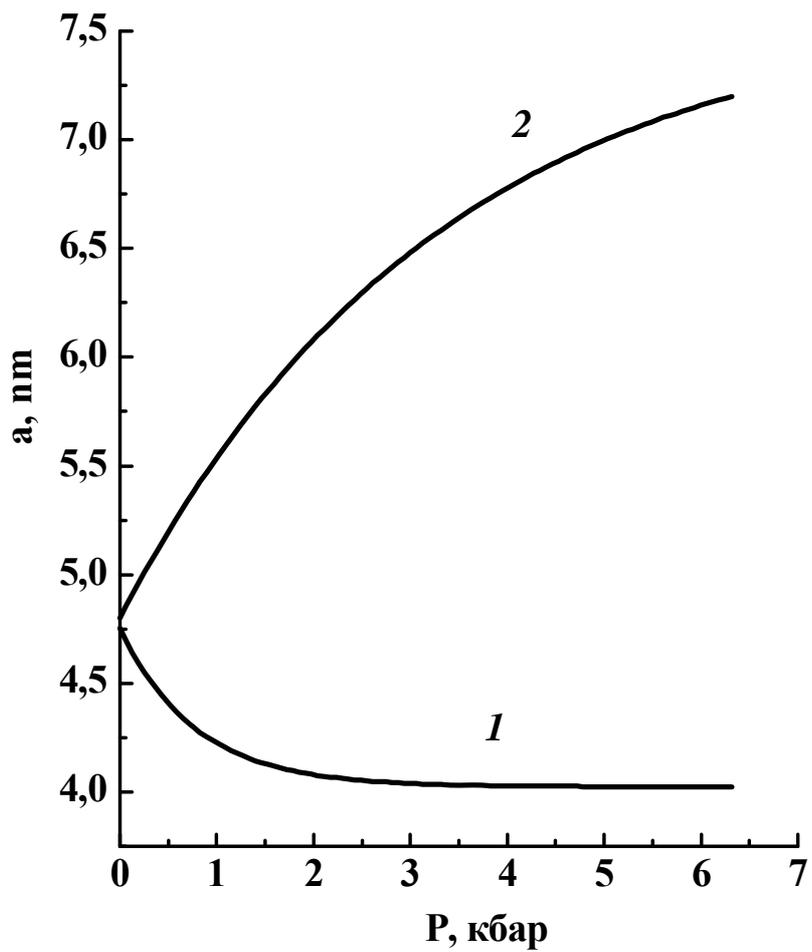


Рис.3.6. Зависимости от величины давления продольного (вдоль оси растяжения, кривая 1) и поперечного (кривая 2) масштабов локализации волновой функции основного состояния акцептора в германии одноосно растянутом вдоль направления [111].

Фотопроводимость, отн.ед

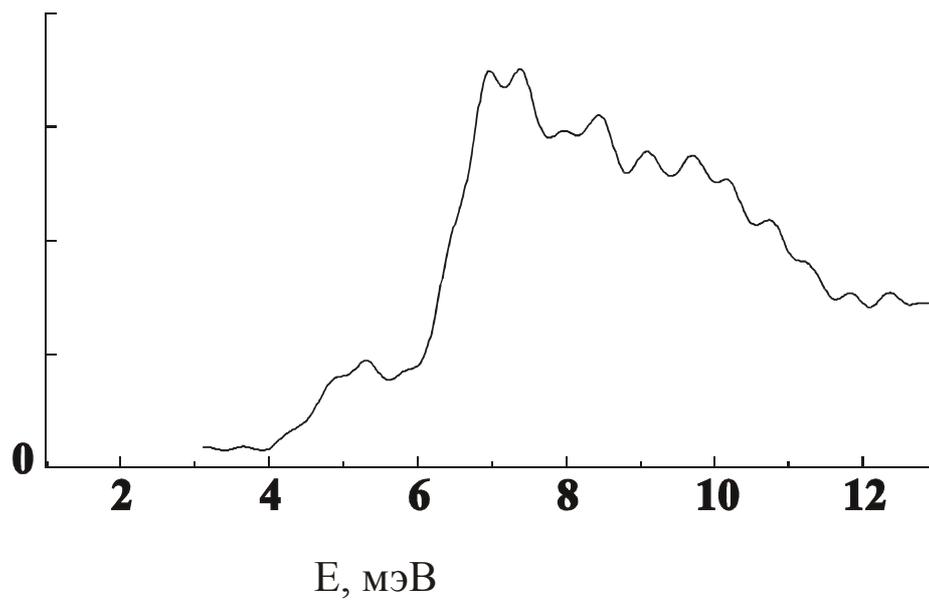


Рис.3.7. Спектр примесной фотопроводимости гетероструктуры  $p$ -типа  $\text{Ge}/\text{Ge}_{0.93}\text{Si}_{0.07}$  #309 при  $T = 4.2$  К ( $d_{\text{Ge}} = 800$  Å,  $d_{\text{GeSi}} \approx 200$  Å,  $N_{\text{QW}} = 83$ ,  $\epsilon_{\text{xx}} = 0.46 \cdot 10^{-3}$ ).

### 3.3. Метод расчета локализованных и резонансных состояний в одноосно деформированном германии

В настоящем разделе дано изложение развитого численного метода расчета, позволяющего находить энергии и волновые функции как локализованных состояний дырок в поле акцептора, так и состояний непрерывного спектра, включая резонансные примесные состояния, и представлены результаты теоретического исследования состояний мелких акцепторов в одноосно деформированном Ge [A23-A26].

#### 3.3.1. Метод расчета

Энергии и волновые функции дырок в поле акцептора находились путем решения уравнения Шредингера в приближении эффективной массы. Гамильтониан выбирался в виде суммы кинетической энергии (гамильтониан Латтинжера), члена, описывающего эффекты деформации, и энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором [26]. Так же, как и в работе [9], использовалось аксиальное приближение, т.е. закон дисперсии дырок полагался изотропным в плоскости, перпендикулярной оси деформации. Для этого в недиагональных элементах гамильтониана Латтинжера были опущены слабые пропорциональные  $(\gamma_2-\gamma_3)$  ( $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  - параметры Латтинжера [25]). Следует отметить, что в первом порядке теории возмущений поправка к энергии, связанная с отброшенными слагаемыми, равна нулю. Отметим, что в результате одноосного сжатия подзона, состояния которой имеют проекцию полного момента  $\pm 3/2$  на ось деформации, смещается вверх относительно подзоны, состояния которой имеют проекцию на эту ось  $\pm 1/2$  (имеются в виду состояния с импульсом, направленным вдоль оси деформации).

В аксиальном приближении сохраняется проекция полного момента  $J$  на ось деформации, и спектр акцептора оказывается двукратно вырожденным по знаку этой проекции (т.е.  $\pm J$ ). Отметим, что согласно теории групп спектр дырок в поле акцептора в Ge, деформированном вдоль [001] или [111], должен быть двукратно вырожденным даже при учете анизотропии закона дисперсии дырок в плоскости перпендикулярной оси деформации. Хорошим квантовым числом является также четность при отражении относительно плоскости, перпендикулярной оси симметрии [111] и проходящей через примесный центр (далее, говоря о четности состояния, будем иметь ввиду именно такую четность). Наличие такого интеграла движения позволило существенно облегчить расчеты.

Волновая функция дырок в поле акцептора находилась в виде разложения по собственным функциям дырок в отсутствие акцептора:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^2 \iint dk_z d\mathbf{k}_\perp C_J(\mathbf{k}_\perp, k_z, n) \mathbf{g}_n(\mathbf{k}_\perp, k_z, z) \exp(i\mathbf{k}_\perp \rho), \quad (3.26)$$

где

$$\mathbf{g}_n(\mathbf{k}, k_z, z) = U \begin{pmatrix} ((\gamma_1 - 0.5\gamma_3)k_{\perp}^2 + (\gamma_1 + \gamma_3)k_z^2 + 0.5\Delta - E_n(k_{\perp}, k_z)) \cos(k_z z) \\ -\frac{2}{\sqrt{3}}(2\gamma_2 + \gamma_3)k_z k_{\perp} \sin(k_z z) \exp(i\alpha) \\ \frac{1}{\sqrt{3}}(\gamma_2 + 2\gamma_3)k_{\perp}^2 \cos(k_z z) \exp(2i\alpha) \\ 0 \end{pmatrix} - \quad (3.27)$$

- собственная волновая функция для четных дырочных состояний,

$$\mathbf{g}_n(\mathbf{k}, k_z, z) = U \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}(\gamma_2 + 2\gamma_3)k_{\perp}^2 \cos(k_z z) \exp(-2i\alpha) \\ -\frac{2}{\sqrt{3}}(2\gamma_2 + \gamma_3)k_z k_{\perp} \sin(k_z z) \exp(-i\alpha) \\ ((\gamma_1 - 0.5\gamma_3)k_{\perp}^2 + (\gamma_1 + \gamma_3)k_z^2 + 0.5\Delta - E_n(k_{\perp}, k_z)) \cos(k_z z) \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

- собственная волновая функция для нечетных дырочных состояний,  $k_z$  – проекция волнового вектора дырки на ось деформации,  $\mathbf{k}_{\perp}$  – волновой вектор дырки в плоскости перпендикулярной оси деформации ( $k_{\perp}$  – модуль этого вектора,  $\alpha$  – угол между вектором  $\mathbf{k}_{\perp}$  и осью  $x$ ),

$$U = \{((\gamma_1 - 0.5\gamma_3)k_{\perp}^2 + (\gamma_1 + \gamma_2)k_z^2 + 0.5\Delta - E_n(k_{\perp}, k_z))^2 + \frac{4}{3}(2\gamma_2 + \gamma_3)^2 k_z^2 k_{\perp}^2 + \frac{1}{3}(\gamma_2 + 2\gamma_3)^2 k_{\perp}^4\}^{-1/2},$$

$$E_n(k_{\perp}, k_z) = \gamma_1(k_z^2 + k_{\perp}^2) + (-1)^n \{0.25(\gamma_3(k_{\perp}^2 - 2k_z^2) - \Delta)^2 + \frac{4}{3}(2\gamma_2 + \gamma_3)^2 k_z^2 k_{\perp}^2 + \frac{1}{3}(\gamma_2 + 2\gamma_3)^2 k_{\perp}^4\}^{1/2}$$

- закон дисперсии свободных дырок для двух подзон,  $\Delta$ - расщепление подзон при  $k_z, k_{\perp} = 0$ , связанное с деформацией (при одноосном сжатии  $\Delta < 0$ ). Отметим, что закон дисперсии для нижней подзоны, которой соответствует знак минус, в отсутствие деформации ( $\Delta = 0$ ) переходит в закон дисперсии тяжелых дырок. Таким образом, нижняя подзона становится подзоной тяжелых дырок, а верхняя - подзоной легких дырок при стремлении деформации к нулю.

Учитывая, что зависимость коэффициентов  $C_J(\mathbf{k}_{\perp}, k_z, n)$  от угла  $\alpha$  при аксиальном приближении имеет вид (см. приложение 1) [6]

$$C_J(\mathbf{k}_{\perp}, k_z, n) = C_J(k_{\perp}, k_z, n) \exp\left[i\alpha\left(J - \frac{3}{2}\right)\right], \quad (3.29)$$

где  $J$  - проекция полного момента на ось деформации, можно получить следующее уравнение для определения  $C_J(k_{\perp}, k_z, n)$ :

$$[E_n(k_{\perp}, k_z) - E]C_J(k_{\perp}, k_z, n) + \sum_{n'=0}^2 \int dk_z' \int_0^{\infty} k_{\perp}' \sqrt{k_z' k_{\perp}'} C_J(k_{\perp}', k_z', n') V(k_{\perp}, k_z, n, k_{\perp}', k_z', n') = 0. \quad (3.30)$$

Здесь  $E$  - энергия,

$$V(k_{\perp}, k_z, n, k_{\perp}', k_z', n') = -\frac{e^2}{\chi} \int_0^{2\pi} d\beta \exp\left[i\beta\left(J - \frac{3}{2}\right)\right] \left\langle \mathbf{g}_{n'}(k_{\perp}, k_z, \mathbf{r}) \left| \frac{1}{r} \right| \mathbf{g}_n(k_{\perp}', k_z', \mathbf{r}) \right\rangle. \quad (3.31)$$

После взятия интеграла в плоскости перпендикулярной оси деформации получаем:

$$\left\langle \mathbf{g}_{n'}(k_{\perp}, k_z, \mathbf{r}) \left| \frac{1}{r} \right| \mathbf{g}_n(k_{\perp}', k_z', \mathbf{r}) \right\rangle = 2 \int_0^{\infty} dz \mathbf{g}_{n'}(k_{\perp}, k_z, z) \mathbf{g}_n(k_{\perp}', k_z', z) \frac{\exp(-|z|K)}{K}, \quad (3.32)$$

где  $K = (k_z' - k_z)^2 + (k_{\perp}' - k_{\perp})^2 + 2k_{\perp}' k_{\perp} (1 - \cos \beta)$ ,  $\beta$  - угол между векторами  $\mathbf{k}_{\perp}$  и  $\mathbf{k}_{\perp}'$ ,  $\chi$  - диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $e$  - заряд электрона. Отметим, что ядро интегрального оператора в уравнении для  $C_J(k_{\perp}, k_z, s)$  симметрично относительно переменных и  $V$  - действительная величина.

При решении интегрального уравнения (3.30) интегралы заменялись суммами, что эквивалентно дискретизации непрерывного спектра. Проще всего это сделать, введя граничные условия, также обладающие цилиндрической симметрией. Например, поместить акцептор в центр цилиндра длиной  $L$  и радиусом  $R$  и вести разложение по цилиндрически симметричным функциям, обращающимся в нуль на границе цилиндра. Эти функции не являются плоскими волнами, а представляют собой линейную комбинацию функций Бесселя, однако интегральные уравнения для разложения по функциям Бесселя будут иметь такой же вид, что и для разложения по плоским волнам (см. приложение 1). Введение таких граничных условий, не должно оказывать заметного влияния на акцепторный спектр, если размеры цилиндра значительно превосходят масштабы локализации функций, что эквивалентно выбору шага по  $k_{\perp, z}$  много меньше обратного боровского радиуса (условие для локализованных состояний) или в цилиндре укладывается большое число волн (условие для состояний непрерывного спектра). Следовательно, процедура дискретизации будет давать значительную ошибку только при расчетах акцепторного спектра вблизи краев подзон, как со стороны локализованных состояний, так и со стороны состояний непрерывного спектра.

Отметим, что при переходе от интеграла к конечной сумме при решении интегрального уравнения (3.30) был выбран постоянный шаг по  $k_{\perp}$ , что не согласуется с цилиндрическими граничными условиями (шаг должен совпадать с расстояниями между ну-

лями функций Бесселя), однако при больших номерах корней функции Бесселя, т.е. при  $k_{\perp}R \gg 1$  (или  $k_{\perp} \gg \Delta k_{\perp}$ , где  $\Delta k_{\perp}$  - шаг по поперечному волновому вектору) нули функций Бесселя эквидистантны, следовательно выбирая постоянный шаг по  $k_{\perp}$  мы допускаем ошибку в определении коэффициентов разложения на масштабе  $k_{\perp} \sim 1/R$ , т.е той же области, где дает ошибку процедура дискретизации.

Ясно также, что  $C_{\mathcal{J}}(k_{\perp}, k_z, s)$  малы для значений  $k_{\perp,z}$  много больших обратного боровского радиуса. Поэтому, не совершая большой ошибки, ряд по  $k_{\perp,z}$  можно оборвать. Таким образом, задача нахождения как локализованных, так и делокализованных состояний акцептора сводится к диагонализации конечномерной симметричной матрицы (в наших расчетах размерность этой матрицы составляла от  $1500 \times 1500$  до  $3000 \times 3000$ ).

Поскольку боровский радиус основного состояния дырки в поле акцептора в недеформированном германии составляет величину порядка  $50 \text{ \AA}$  (см. рис.3.6), то при расчетах спектра для давлений, приводящих к расщеплению подзон менее 10 мэВ, выбрались одинаковые значения шагов по  $k_{\perp}$  и  $k_z$  равные  $2 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ . При больших деформациях, для повышения точности расчета целесообразно выбирать разные величины шагов по  $k_{\perp}$  и  $k_z$ . Это связано с существенной анизотропией волновых функций: волновые функции резонансных состояний должны сжиматься вдоль  $z$ , а локализованных - вытягиваться. Для расчета локализованных состояний выбирались значения шага по  $k_{\perp}$   $1.8 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  и по  $k_z$   $1 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ , а для резонансных состояний  $1 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  и  $2.3 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  соответственно.

Волновые функции акцепторов имеют сложную структуру. Разложение (3.26) включает члены, относящиеся к двум различным подзонам. Если разложение волновой функции некоторого состояния акцептора включает в себя в основном огибающие волновые функции определенной дырочной подзоны, то мы будем считать такое состояние относящимся к этой подзоне. В деформированном материале основное акцепторное состояние относится к нижней подзоне и располагается ниже ее дна. Энергии состояний, относящихся к верхней подзоне, могут быть как меньшими энергии дна нижней подзоны (локализованные состояния), так и большими её (квазистационарные состояния). Локализованные состояния, связанные с верхней подзоной, становятся резонансными при увеличении величины одноосной деформации кристалла.

На рис. 3.8 представлены волновые функции для нижнего квазистационарного (сплошная линия) и основного локализованного (пунктирная линия) состояний дырок в поле акцептора в сжатом вдоль оси [111] германии. Как уже отмечалось, волновая функция квазистационарного состояния состоит из двух частей: “локализованной” части, образованной верхней подзоной, и “распространяющейся” части, образованной нижней подзо-

ной. Точечная линия на рис.3.8 представляет “локализованную” часть волновой функции квазистационарного состояния. Видно, что волновая функция квазистационарного состояния на малых расстояниях от примесного центра подобна волновой функции основного состояния, а на больших расстояниях представляет собой стоячую волну вдоль координаты  $z$ . Сравнивая волновую функцию квазистационарного состояния с волновой функцией типичного состояния непрерывного спектра (штрих–пунктирная линия на рис.3.8), следует иметь в виду, что “делокализованная” часть данного квазистационарного состояния оказывается сформированному волнами распространяющимися вдоль  $z$ -направления, так как осцилляции по координате  $\rho$  волновой функции этого состояния отсутствуют.

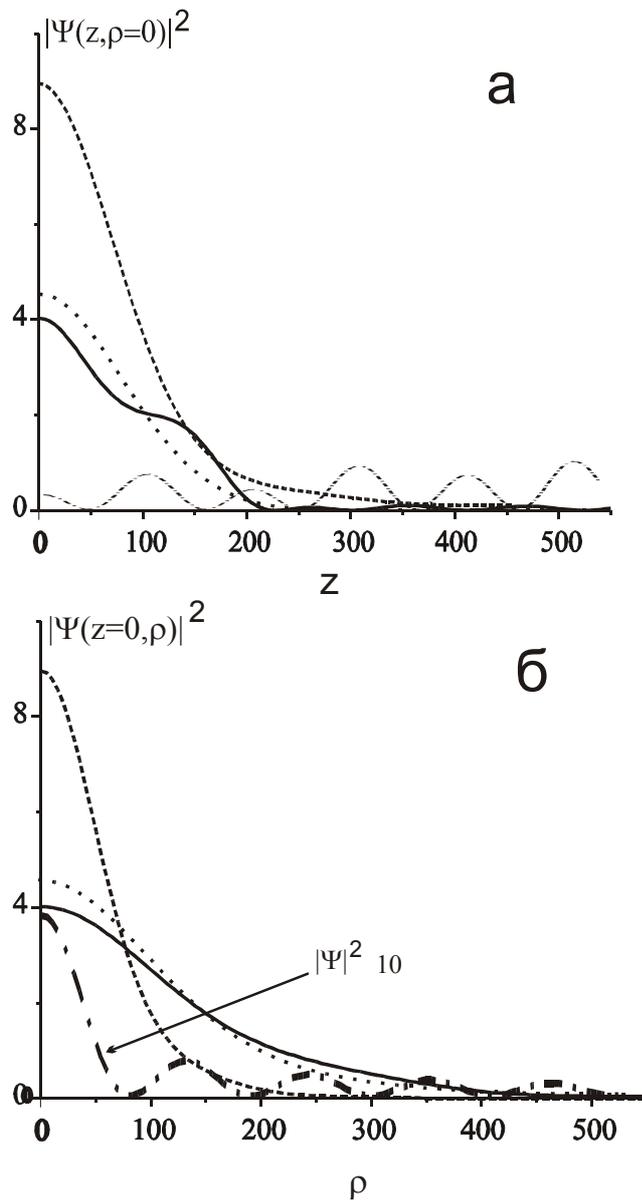


Рис 3.8. Зависимости плотности вероятности дырки в поле акцептора в германии, сжатом вдоль направления [111], от  $z$  (а) и  $\rho$  (б) (ось  $z$  выбрана вдоль направления деформации). Величина давления составляет 10 кБар. Сплошная линия соответствует нижнему резонансному состоянию, пунктирная – основному состоянию акцептора, точечная линия представляет “локализованную” часть резонансного состояния, образованную верхней подзоной. Штрих – пунктирная линия соответствует нерезонансному четному состоянию непрерывного спектра с энергией 100.8 мэВ (отсчитанной от дна нижней подзоны) и  $J = +1/2$ .

### 3.3.2. Точность разработанного метода: сравнение с результатами эксперимента и применение метода разложения по плоским волнам к модели потенциала нулевого радиуса

Для проверки точности метода были рассчитаны энергии основного и нескольких возбужденных состояний мелкого акцептора в недеформированном германии, отвечающие различным проекциям полного момента импульса на ось симметрии. Результаты представлены в 2-ом – 4-ом столбцах таблицы 3.7 (при расчете ось аксиальной симметрии была выбрана вдоль кристаллографического направления [111]). В 1-ом столбце таблицы представлена классификация состояний по типам представлений, которым должны соответствовать функции найденных состояний в кристалле германия. Для некоторых состояний указаны соответствующие им переходы в спектре поглощения германия. В таблице 3.7 приведены также результаты расчетов, выполненных в работах [56], которые, по видимому, в настоящее время являются наиболее точными (5-ый столбец). В столбце 6 приведены результаты экспериментального определения энергии уровней в германии из работы [66].

Как известно, основное состояние акцептора  $1\Gamma_8^+$  является четырехкратно вырожденным. Однако из-за использования при вычислениях вместо кубической аксиальной симметрии, рассчитанное нами основное состояние оказывается расщепленным. Энергия связи состояния, соответствующего  $J = \pm 1/2$ , составляет 9.65 мэВ, а энергия связи состояния, соответствующего  $J = \pm 3/2$ , оказывается 9.23 мэВ. Таким образом, расщепление основного состояния, связанное с использованием «неправильной» симметрии, составляет примерно 5% от энергии ионизации. Это справедливо и для возбужденных четырехкратно вырожденных состояний (см. таблицу 3.7).

Отметим, что наилучшее согласие при сопоставлении данного расчета с экспериментом наблюдается для основного состояния ( $1s$ -подобного) и для состояния  $2\Gamma_8^+$  ( $2s$ -подобного). Для этих состояний рассогласование теоретических и экспериментальных данных составляет 12% для основного и 7.5% для состояния  $2\Gamma_8^+$ , в то время как для других возбужденных состояний расхождение результатов расчета и эксперимента находится в пределах 4-5%. Это объясняется наличием химического сдвига [67], который существенен для  $s$ -подобных состояний и практически отсутствует для других состояний, так как у последних волновая функция имеет узел в точке расположения акцептора.

Для проверки точности развитого метода в работе также было проведено сопоставление результатов расчета с экспериментальными данными по примесной фотопроводимости для сильно сжатого вдоль направления [100] Ge [68] – см. таблицу 3.8. Величина давления составляла 6 кбар, что соответствует расщеплению подзон 36 мэВ.

Таблица 3.7. Энергии связи акцепторных состояний в недеформированном Ge.

	$J = \pm 1/2$	$J = \pm 3/2$	$J = \pm 5/2$	Теория [56,67]	Эксперимент (бор) [66]
Основное состояние $1\Gamma_8^+$	9.65 мэВ	9.23 мэВ	-	9.8 мэВ [56]	10.8 мэВ
$1\Gamma_8^-$ (G-линия)	4.5 мэВ	4.7 мэВ	-	4.58 мэВ [67]	4.6 мэВ
$2\Gamma_8^+$ (E-линия)	3.05 мэВ	3.3 мэВ	-	2.9 мэВ [56]	3.25 мэВ
$2\Gamma_8^-$ (D-линия)	-	2.8 мэВ	2.95 мэВ	2.88 мэВ [67]	2.88 мэВ
Двукратно вырожденное ( $1\Gamma_7^+$ или $1\Gamma_6^+$ )	-	2.4 мэВ	-	-	-
$1\Gamma_7^-$ (C-линия)	2.2 мэВ	-	-	2.13 мэВ [67]	2.13 мэВ
$3\Gamma_8^+$	1.55 мэВ	1.49 мэВ		-	-
$4\Gamma_8^+$	1.33 мэВ	1.29 мэВ		-	-

Таблица 3.8. Энергии связи акцепторных состояний в одноосно сжатом Ge.

( $\mathbf{P} \parallel [100]$ ,  $P = 6$  кбар)

Классификация состояний	Энергия связи (настоящий расчет)	Энергия связи (эксперимент [68])
1s	5.56 мэВ	6.00 мэВ
2s	1.32 мэВ	1.385 мэВ
$2p_{\pm 1}$	1.44 мэВ	1.335 мэВ
$2p_0$	0.90 мэВ	0.889 мэВ
$3p_{\pm 1}$	0.62 мэВ	0.613 мэВ

Видно, что соответствие результатов расчета и эксперимента лучше чем в случае недеформированного германия: расхождение не превышает 5% для всех уровней кроме 1s состояния (для которого рассогласование составляет 7,3%), где очевидно по-прежнему существенен химический сдвиг.

Для проверки точности метода при расчете квазистационарных состояний был проведен расчет спектра в модели потенциала нулевого радиуса, использованного в работе [12]. Кулоновский потенциал был заменен потенциалом сферически симметричной ямы

радиусом 15 Å. Глубина потенциальной ямы была подобрана так, чтобы энергия связи локализованного состояния в ней составляла 11.3 мэВ. Метод расчета не позволяет брать квантовую яму меньшего размера, так как разработанный численный метод сходится при расчете спектра в таком потенциале при условии  $k_F \gg 1/r$ , где  $k_F$  – предельное значение  $k_{1,z}$ , а  $r$  – радиус ямы. В данном расчете  $k_F = 2 \text{ \AA}^{-1}$ . На рисунке 3.9 представлен результат расчета спектра потенциала нулевого радиуса. Давление прикладывалось вдоль направления [111]. При нулевом давлении имеется единственный вырожденный уровень, который расщепляется при одноосном сжатии: пунктирная линия – состояние, связанное с нижней подзоной, сплошная линия – состояние, связанное с верхней подзоной. Верхнее состояние выходит в непрерывный спектр при давлении около 4.5 кбар, что близко к результату полученному в работе [12] (ср. с рис 3.4).

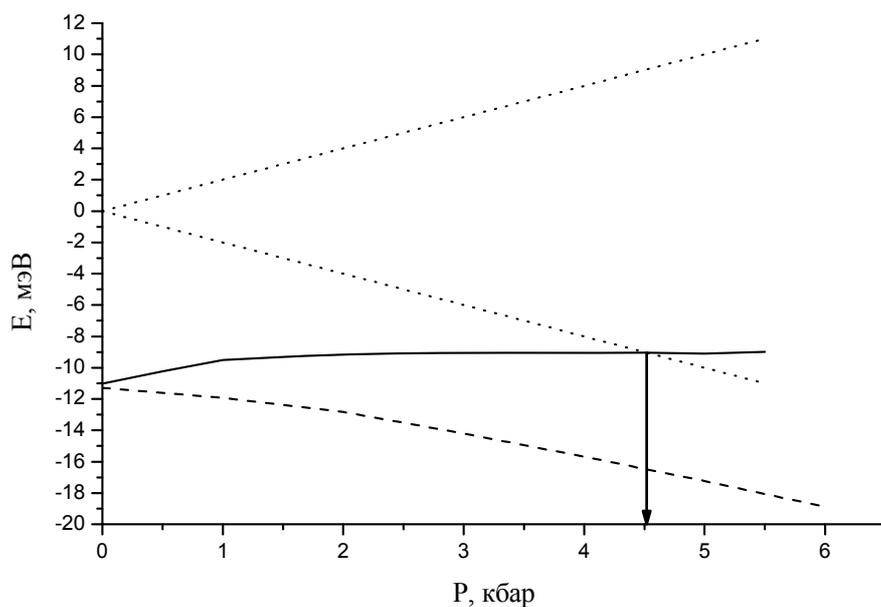


Рис.3.9. Рассчитанные в приближении потенциала нулевого радиуса методом разложения по плоским волнам энергии акцепторных состояний в сжатом вдоль направления [111] германии в зависимости от величины давления. Пунктирная линия - состояние, связанное с нижней подзоной ( $J = \pm 1/2$ ), сплошная линия – состояние, связанное с верхней подзоной ( $J = \pm 3/2$ ). Точечные линии показывают края подзон. Стрелка показывает значение давления, при котором состояние  $J = \pm 3/2$  выходит в непрерывный спектр нижней подзоны.

### 3.3.3. Расчет положения и времени жизни квазистационарных состояний в одноосно деформированном Ge

При одноосной деформации четырехкратное вырождение уровней снимается. На рис.3.10 показана зависимость энергии основного локализованного и нижнего квазистационарного состояний в одноосно сжатом Ge от давления в направлениях [111] (сплошная линия) и [001] (пунктирная линия). В деформированном Ge основным будет четное состояние с проекцией полного момента  $J = \pm 1/2$ . Квазистационарные состояния в непрерывном спектре выделялись путем вычисления доли верхней подзоны в разложении акцепторной волновой функции:

$$A_2(E) = \sum_{k_z=0}^{k_F} \sum_{k_{\perp}=0}^{k_F} |C_2(E, k_z, k_{\perp})|^2, \quad (3.33)$$

где  $k_F$  – предельное значение  $k_{\perp,z}$ ,  $C_2(k_z, k_{\perp})$  - коэффициенты разложения, относящиеся ко второй подзоне,  $E$  – энергия акцепторного уровня. Энергия квазистационарного состояния соответствует максимуму  $A_2(E)$ . С ростом давления максимальное значение  $A_{2max}(E)$  стремиться к 1. Отметим, что замена в выражении (3.26) интеграла суммой приводит к тому, что континуумы подзон распадаются на дискретный спектр с некоторым шагом по энергии. Это приводит к тому, что положение  $A_{2max}(E)$  может отличаться от истинного на величину такого шага. Отметим, что шаг по энергии вблизи резонансного состояния составляет 0.2 – 0.25 мэВ.

Как следует из сопоставления данных таблицы 3.7 и рис.3.10, “основное” резонансное состояние “происходит” из возбужденного состояния  $4\Gamma_8^+$  с энергией связи 1.3 мэВ (в отсутствие деформации), а не из основного состояния, как это естественно получается в модели потенциала нулевого радиуса (где оно выходит в непрерывный спектр при  $P \approx 4$  кбар) [12]. Это неудивительно, так как в недеформированном кристалле уровень  $4\Gamma_8^+$  оказывается первым состоянием, волновая функция которого построена в основном из функций легких дырок, в то время как в волновые функции всех нижележащих уровней основной вклад дают состояния подзоны тяжелых дырок.

Рис.3.11 показывает энергии “основного” квазистационарного состояния (сплошная линия) и нижележащих состояний (пунктирные линии) с той же симметрией ( $J = \pm 3/2$ , четные) для германия сжатого в направлении [111]. Видно, что верхнее отщепившееся от основного уровня состояние не испытывает антипересечений и не выходит в непрерывный спектр, как полагалось ранее [12]. Это состояние при больших деформациях переходит в уровень  $3d_{\pm 1}$  в модели простой анизотропной зоны с энергией ионизации 0.7 мэВ. Таким образом, сделанный в работе [12] вывод, что минимальная величина давления, при

котором удается наблюдать стимулированное излучение ( $P \approx 4$  кбар при  $\mathbf{P} \parallel [111]$ ), обусловлено попаданием при этих условиях в непрерывный спектр уровня, отщепленного от основного состояния акцептора, представляется неверным.

Рис.3.12 показывает положения нижнего квазистационарного состояния акцепторов в деформированном вдоль  $[111]$  и  $[001]$  Ge, рассчитанные методом конфигурационного взаимодействия [64]. Видно, что при небольших давлениях этот результат заметно расходится с расчетом, выполненным в настоящей работе (рис.3.10). По-видимому, это связано с тем, что в работе [64] пренебрегали изменением формы локализованной части волновой функции квазистационарного состояния (функция  $\phi^{\mu}(r)$  в выражении (3.15)) при уменьшении давления (см. также п.3.1.3). Это приводит к тому что энергия “затравочного” состояния дискретного спектра под верхней подзоной не зависит от давления, в то время как такое состояние становится мельче при уменьшении давления из-за уменьшения средней эффективной массы дырок в верхней подзоне за счет ее взаимодействия с нижней.

Пунктирными линиями на рис.3.13 показаны зависимости от давления положений возбужденных локализованных уровней, на которые разрешены излучательные переходы с «основного» резонансного состояния (нечетные состояния). Стрелки показывают разрешенные переходы с “основного” квазистационарного состояния (сплошная линия), которые могут присутствовать в спектре излучения, представленном на рис.3.3.

При интерпретации измеренных спектров излучения (см. рис.3.3) необходимо учитывать влияние электрического поля на стационарные и квазистационарные состояния акцепторов в деформированном Ge. Поскольку спектральные исследования стимулированного излучения были выполнены в электрическом поле 3 кВ/см при давлении 6.85 кбар ( $\mathbf{E} \parallel \mathbf{P}$ ) [10,12-15], именно для этих условий в настоящей работе были сделаны оценки эффекта Штарка. Приложение электрического поля приводит к двум следствиям:

- во-первых, электрическое поле сдвигает все примесные состояния вниз, сближая тем самым уровни, поскольку возбужденные состояния имеют большие орбиты и поле влияет на них сильнее;
- во-вторых, электрическое поле делает все состояния квазистационарными, поскольку появляется вероятность туннелирования в непрерывный спектр.

Смещение глубоких уровней можно оценить по теории возмущения, при этом поправка первого порядка будет равна нулю. Поправка второго порядка для основного состояния, соответствующего нижней подзоне составляет около 1.6 мэВ (энергия ионизации этого состояния без электрического поля составляет 6.2 мэВ). Поправки для возбужден-

ных состояний значительно превышают энергию ионизации этих состояний (энергия ионизации  $2p_{\pm 1}$ -состояния составляет 2.15 мэВ), т.е. теория возмущений перестает для них работать. Таким образом, спектр возбужденных состояний, связанных с нижней подзоной, кардинально меняется при приложении электрического поля 3 кВ/см.

Влияние поля на квазистационарные состояния, связанные с верхней подзоной, оказывается значительно более слабым. Так поправка второго порядка к основному состоянию составляет всего лишь 0.2 мэВ (энергия связи - 3.95 мэВ), поправка к энергии  $2p_{\pm 1}$ -состояния составляет 0.9 мэВ (энергия связи - 1.2 мэВ). Такое отличие от состояний, расположенных под нижней подзоной, возникает из-за того, что масштаб локализации волновой функции резонансного состояния оказывается меньше в направлении вдоль электрического поля, чем в направлении перпендикулярном полю, а для локализованных состояний ситуация обратная (см. рис.3.8). Отметим, что поскольку электрическое поле сильнее влияет на состояния, относящиеся к нижней подзоне, время жизни этих состояний может оказаться меньше, чем время жизни состояний, бывших резонансными и без электрического поля. Это обстоятельство может оказаться важным для создания инверсной населенности примесных состояний в сжатом германии.

Ширина хорошо определенных квазистационарных уровней  $\Gamma$  связана с временем жизни частицы на таком уровне как  $\tau = \frac{\hbar}{\Gamma}$  [36]. В работе был проведен расчет ширины квазистационарных уровней  $\Gamma$  для различных направлений деформации. Величину  $\Gamma$  можно оценить прямо из зависимости  $A_2(E)$ , как это было сделано в работе [A23]. Функция  $A_2(E)$  искалась в виде функции Лоренца с шириной по полувысоте  $\Gamma$ , параметры этой функции были найдены по ближайшим к  $A_{2max}(E)$  точкам. Отметим, что форму Лоренца функция  $A_2(E)$  имеет только вблизи хорошо определенного состояния (т.е. если  $\Gamma \ll E_i$ ). Были сделаны оценки ширины квазистационарного состояния для нескольких значений давлений. Так при  $P = 3$  кбар полуширина “основного” квазистационарного состояния составляет 0.5 мэВ, при  $P = 4$  кбар – 0.4 мэВ, при  $P = 6.85$  кбар – 0.3 мэВ. Однако, можно заметить, что ширина этого состояния оказалась близка по величине к шагу по энергии, т.е к точности расчета.

Вследствие этого был использован следующий способ определения полуширины квазистационарного уровня:

- 1) взаимодействие между подзонами рассматривалось как возмущение;
- 2) состояния, относящиеся к двум подзонам, находились независимо, для этого в уравнении (3.30) опускались члены, связанные с взаимодействием плоских волн из разных подзон;

3) рассчитывалась вероятность распада квазистационарного состояния в единицу времени как вероятность перехода под действием оператора кулоновской энергии, между локализованным состоянием, связанным со второй подзоной, и состоянием непрерывного спектра нижней подзоны

$$\hbar / \tau = 2\pi \left\langle \Psi_a \left| \frac{-e^2}{\chi r} \right| \Psi_i \right\rangle^2 \frac{1}{\Delta E}, \quad (3.34)$$

где  $\tau$  - время жизни резонансного состояния,  $\Psi_a$  - функция основного локализованного состояния, связанного с верхней подзоной,  $\Psi_i$  - функция непрерывного спектра нижней подзоны, ближайшая по энергии к локализованному состоянию),  $\Delta E$  - “расстояние” (по энергии) между уровнями непрерывного спектра нижней подзоны вблизи локализованного уровня.

Формула (3.34) хорошо работает в случае невырожденного спектра (например, в двумерном случае), однако непрерывный спектр акцепторов в германия вырожден по направлению волнового вектора, т.е. по углу, который волновой вектор составляет с осью деформации. При дискретизации спектра такое вырождение снимается, однако близкие по энергии состояния континуума будут отвечать разным направлениям волнового вектора, это приведет к быстрым осцилляциям матричного элемента перехода между локализованным состоянием и состоянием непрерывного спектра. Это возникает из-за того, что функция нижнего состояния, связанного с нижней подзоной, имеет разную протяженность в направлении вдоль оси деформации и в направлении перпендикулярном ей. Минимум матричного приходится на  $k_z = 0$ . В связи с этим при расчете ширины уровня квадрат матричного элемент перехода усреднялся по ближайшим к локальному уровню состояниям, расположенными между минимумами осцилляций

$$\Gamma / 2 = \pi \sum_i \left\langle \Psi_a \left| \frac{-e^2}{\chi r} \right| \Psi_i \right\rangle^2 \frac{1}{\Delta E_0}. \quad (3.35)$$

Здесь  $\Delta E_0$  - расстояние между минимумами осцилляций. Рисунок 3.14 представляет результат расчета  $\Gamma/2$  в зависимости от энергии нижнего квазилокального уровня, отсчитанной от края нижней подзоны (см рис.3.12). Видно, что максимум  $\Gamma/2$  достигается при энергии около уровня около 3 мэВ (или при  $P = 1.2$  кбар при сжатии вдоль направления [001] и 0.8 кбар для при сжатии вдоль направления [111]) и составляет примерно 1.-1.15 мэВ для двух направлений сжатия. Далее ширина квазистационарного уровня быстро убывает. Отметим, что имеется расхождение между представленным результатом расчета  $\Gamma/2$  и зависимостью, полученной методом конфигурационного взаимодействия. Из сопос-

тавления данных на рис.3.14 и рис.3.15 видно, что максимальные значения ширины квазистационарного уровня отличаются примерно в 2 раза. Это расхождение может быть связано с недостаточной точностью используемого нами метода при небольших давлениях (напомним, что наш метод удовлетворительно работает только для хорошо определенных состояний), так и с уже упоминавшимся выше неточным выбором “затравочной” функции в методе конфигурационного взаимодействия [64]. Также видно, что на рис.3.15 максимум дальше смещен от начала координат. Отметим, что в обоих случаях максимум смещен на величину порядка энергии связи квазилокального уровня (расстояния до второй подзоны).

Наблюдается также качественное расхождение в поведении ширины основного квазистационарного состояния при больших давлениях. Из рис.3.14, видно, что ширины состояния для обоих направлений сжатия оказываются одного порядка, в то время как по данным расчета по методу конфигурационного взаимодействия (рис.3.15) результаты для двух направлений сжатия отличаются на порядок.

Отметим также, что при расщеплении подзон на величину больше 30 мэВ на время жизни квазистационарного состояния может оказывать существенное влияние рассеяние на оптических фонах.

\

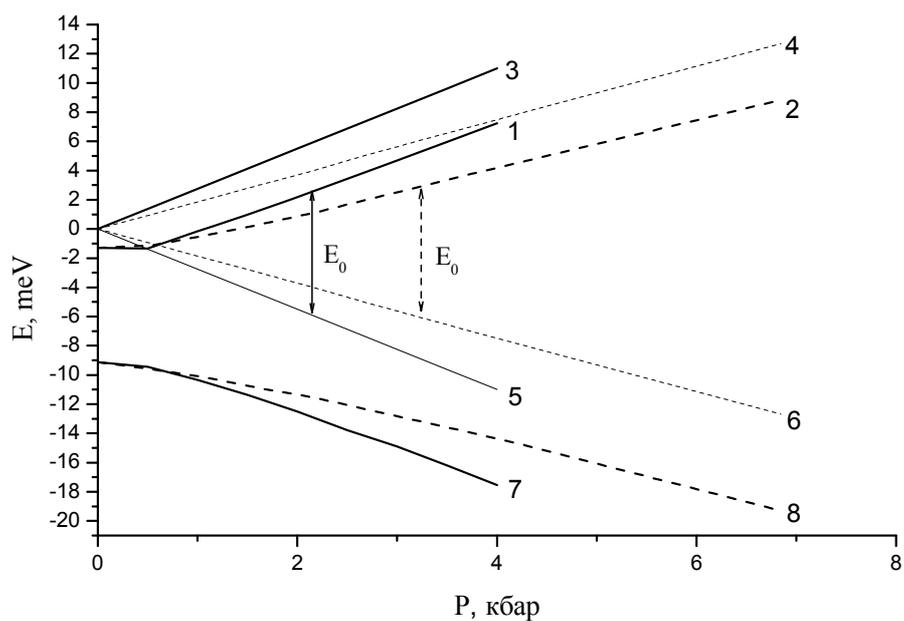


Рис.3.10. Основное и нижнее квазистационарные состояния в одноосно сжатом германии: сплошные линии – сжатие вдоль направления [001], пунктирные линии – сжатие вдоль направления [111]. Цифрами обозначены следующие уровни: 1 и 2 – нижнее квазистационарное состояние, соответствующее  $J = \pm 3/2$ ; 3 и 4 – края подзон тяжелых дырок, 5 и 6 – края подзон легких дырок, 7 и 8 – основное примесное состояние

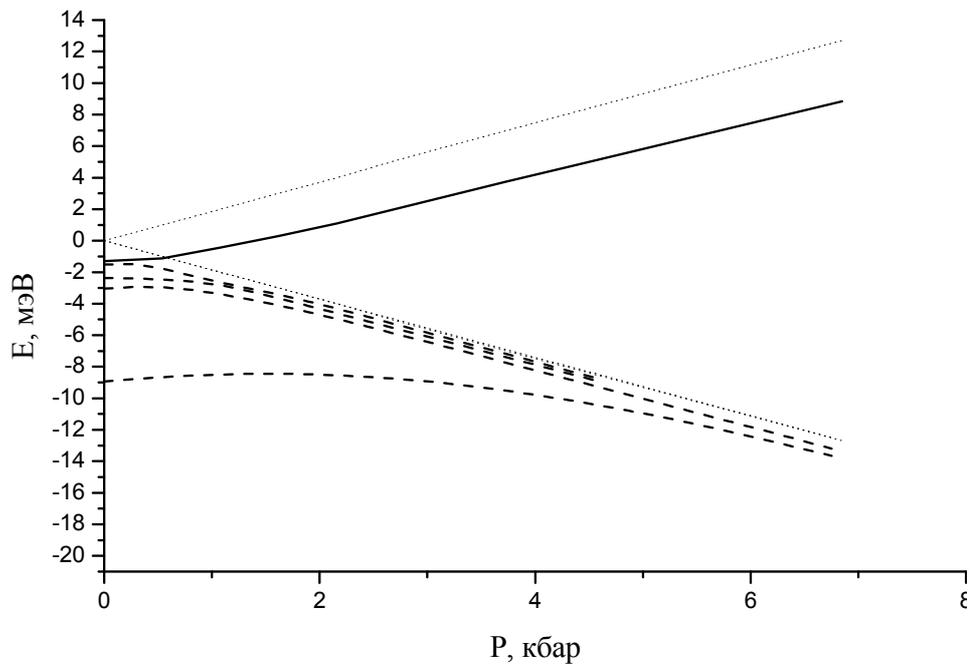


Рис. 3.11. Зависимость от величины давления энергии нескольких акцепторных состояний с одинаковой симметрией ( $J = \pm 3/2$ , четные) в одноосно сжатом германии. Сплошная линия - «основное» квазистационарное состояние. Пунктирные линии – локализованные состояния, происходящие при из состояний, лежащих при  $P = 0$  ниже состояния  $4\Gamma_8^+$  (из которого выходит нижнее квазистационарное). Точечные линии показывают края подзон.

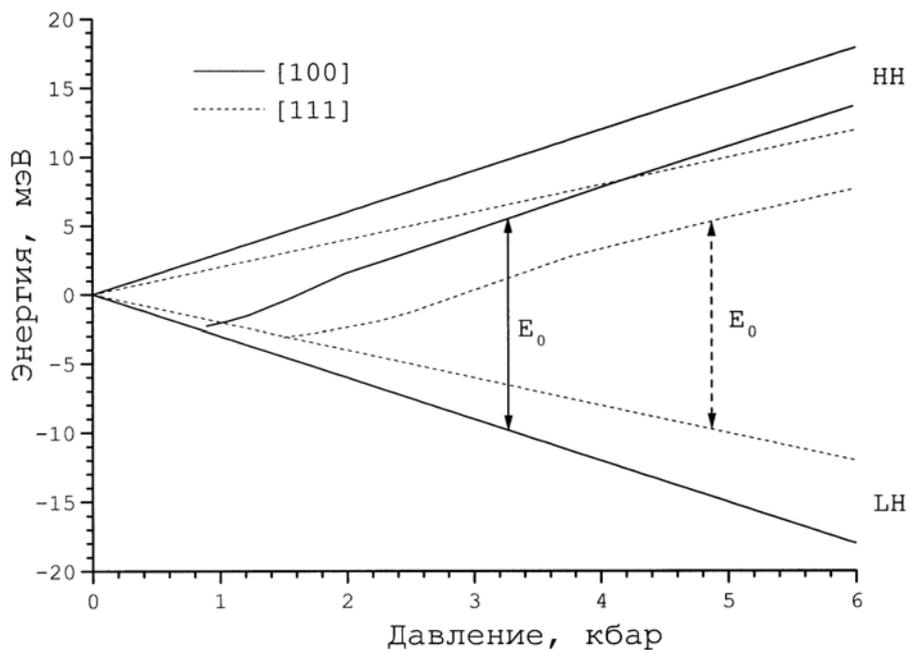


Рис. 3.12. Зависимость расщепления подзон легких и тяжелых дырок, а также положения нижнего квазистационарного уровня от приложенного давления, представленная в [64]. Пунктир – направление давления [001], сплошная линия – направление давления [111].

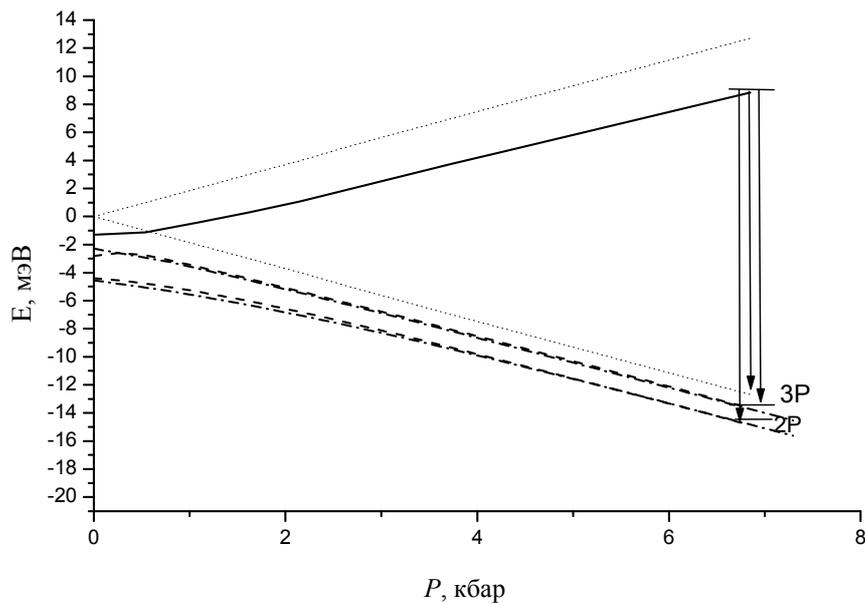


Рис 3.13. Зависимость нижнего квазистационарного (сплошная линия) и нескольких нижних возбужденных локализованных состояний акцепторов в сжатом вдоль оси [111] германии от величина давления. Штрих пунктирная линия показывает состояния с  $J = \pm 1/2$ , нечетные, пунктирная линия соответствует нечетным состояниям с  $J = \pm 5/2$ . Стрелки показывают переходы, которые могут быть представлены в спектре спонтанного излучения, представленном на рис.3.3.

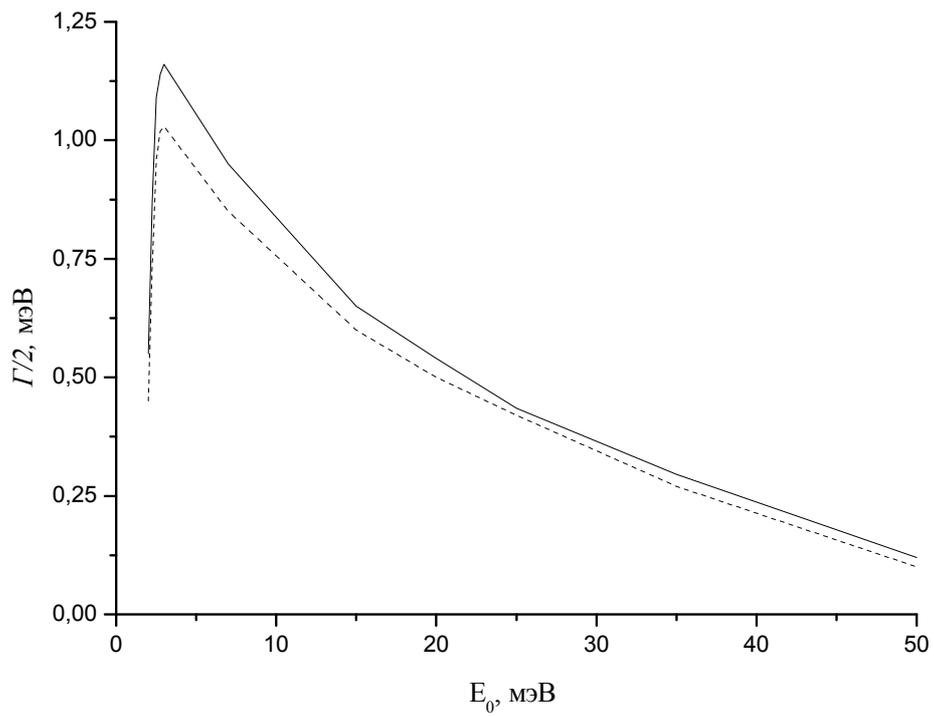


Рис. 3.14. Зависимость полуширины квазистационарного состояния от его положения относительно дна нижней подзоны для двух различных направлений сжатия: пунктир – [001], сплошная линия – [111].

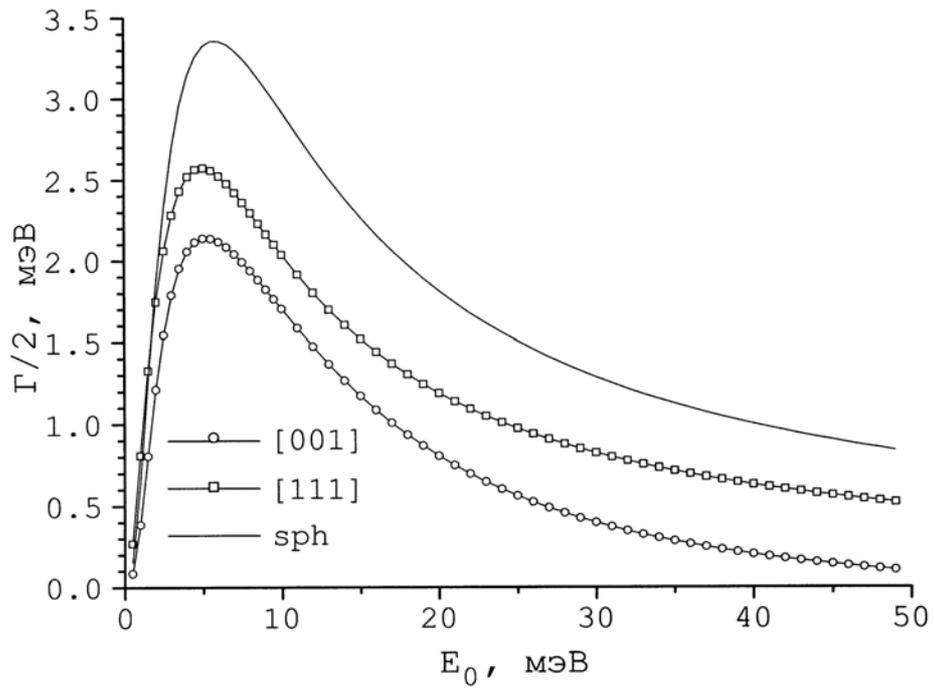


Рис. 3.15. Рассчитанная в работе [64] зависимость полуширины резонансного уровня от его положения относительно дна нижней подзоны в сферическом и цилиндрическом приближениях для двух направлений приложения давления [001] и [111].

### 3.4. Фотопроводимость одноосно деформированного германия и твердого раствора

#### GeSi

В этой части главы представлены расчеты примесной фотопроводимости одноосно сжатого германия, обусловленной переходами на акцепторные уровни, относящиеся к верхней, отщепленной давлением подзоне [A27-A29], а также теоретическое исследование возможности создания длинноволнового приемника с заблокированной проводимостью по примесной зоне на основе сжатого GeSi, выращенного на подложке Ge [A30-A31].

#### 3.4.1. Фотопроводимость одноосно сжатого германия, связанная с переходами в состоянии, относящиеся к верхней подзоне

Прямым методом исследования квазистационарных состояний мелких примесей является изучение спектров примесного поглощения или фотопроводимости в дальнем ИК диапазоне длин волн, связанных с переходами из основного локализованного в квазистационарные состояния. В главе 2 рассказывалось об обнаружении оптических переходов из основного локализованного в квазистационарные (связанные со 2-ой и 3-ей подзонами размерного квантования) состояния мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi и InGaAs/GaAs с квантовыми ямами. Несмотря на большое количество работ по пьезоспектроскопии мелких акцепторов в Ge, все исследования проводились в спектральной области, соответствующей переходам между локализованными состояниями, а более высокочастотная область вблизи переходов в верхнюю отщепленную подзону не исследовалась.

Спектры примесной фотопроводимости одноосно сжатых образцов p-Ge исследовались с помощью фурье-спектрометра BOMEM DA3.36. Измерения проводились в спектральном диапазоне  $40\text{-}500\text{ см}^{-1}$ , источником излучения служил глобар, светоделителем – майларовая пленка толщиной 6 мкм. Образец располагался в световодном модуле, погружаемом в транспортный гелиевый сосуд Дьюара СТГ-40. Прошедшее через интерферометр излучение подводилось к исследуемому образцу с помощью полированных трубок из нержавеющей стали, сопрягающего конуса и двух поворотных (на  $90^\circ$ ) зеркал (КРС-6 на выходе из спектрометра и металлическое зеркало с жидком гелии вблизи образца). Исследуемые образцы имели форму прямоугольных параллелепипедов размерами  $1 \times 1.8 \times 6\text{ мм}^3$ , вырезанных вдоль направлений типа  $\langle 100 \rangle$  из германия марки ГДГ-45 ( $N_A - N_D \approx 5 \times 10^{13}\text{ см}^{-3}$ ). Омические контакты наносились на грани  $1 \times 6\text{ мм}^2$ . Давление прикладывалось в направлении ребер длиной 6 мм с помощью поршня. Усилие на поршень передавалось с помощью рычага с соотношением плеч 1:10. К длинному плечу рычага подвешивалась платформа, на которой размещались калиброванные грузы, что позволяло прикладывать к исследуемым образцам давление до 5.5 кбар. Образец через тонкие изолирующие про-

кладки из тефлона зажимался в одноразовых пуансонах из отожженной меди. Приложение давления контролировалось по уменьшению сопротивления образца и поля примесного пробоя. Для записи спектра фотопроводимости к образцу прикладывалось напряжение смещения несколько меньшее напряжения примесного пробоя.

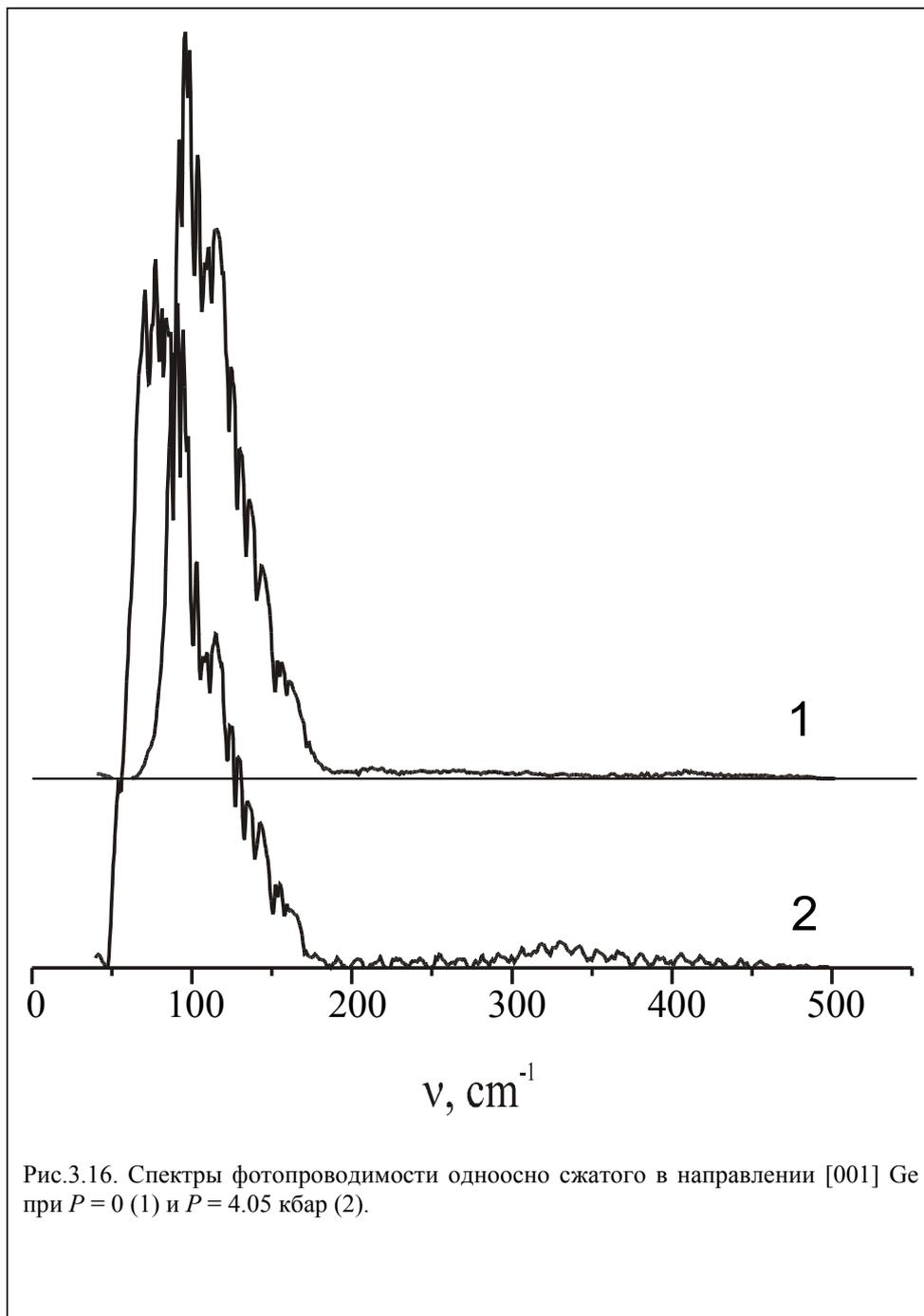
На рис.3.16 представлены спектры фотопроводимости образца  $p$ -Ge, измеренные в отсутствие одноосной деформации и при  $P = 4.05$  кбар. В отсутствие деформации спектр состоит из одной полосы фотопроводимости с максимумом в районе  $100 \text{ см}^{-1}$ . Длинноволновая граница фотоотклика определяется энергией ионизации примеси Ga в Ge, составляющей 11,3 мэВ, что соответствует  $90 \text{ см}^{-1}$ . Слабая фотопроводимость в области частот менее  $90 \text{ см}^{-1}$  связана с оптическими переходами с основного на возбужденные состояния акцептора, откуда дырки могут возбудиться в валентную зону за счет электрон-электронного или электрон-фононного взаимодействия. С ростом частоты при энергиях квантов больше энергии ионизации сигнал фотопроводимости возрастает, что связано с ростом плотности состояний в валентной зоне с энергией, а затем достигает максимума и начинает уменьшаться. Это падение сигнала фотопроводимости с ростом частоты связано с конечным размером волновой функции основного состояния акцептора, что обуславливает соответствующую неопределенность волнового вектора  $\Delta k$  дырки, связанной на акцепторе. С ростом частоты поглощаемого света волновой вектор дырки в конечном состоянии в валентной зоне при вертикальных оптических переходах тоже возрастает и в какой-то момент сравнивается с  $\Delta k$ , что примерно соответствует максимуму в спектрах поглощения и фотопроводимости. При дальнейшем увеличении энергии кванта вероятность таких переходов естественным образом падает.

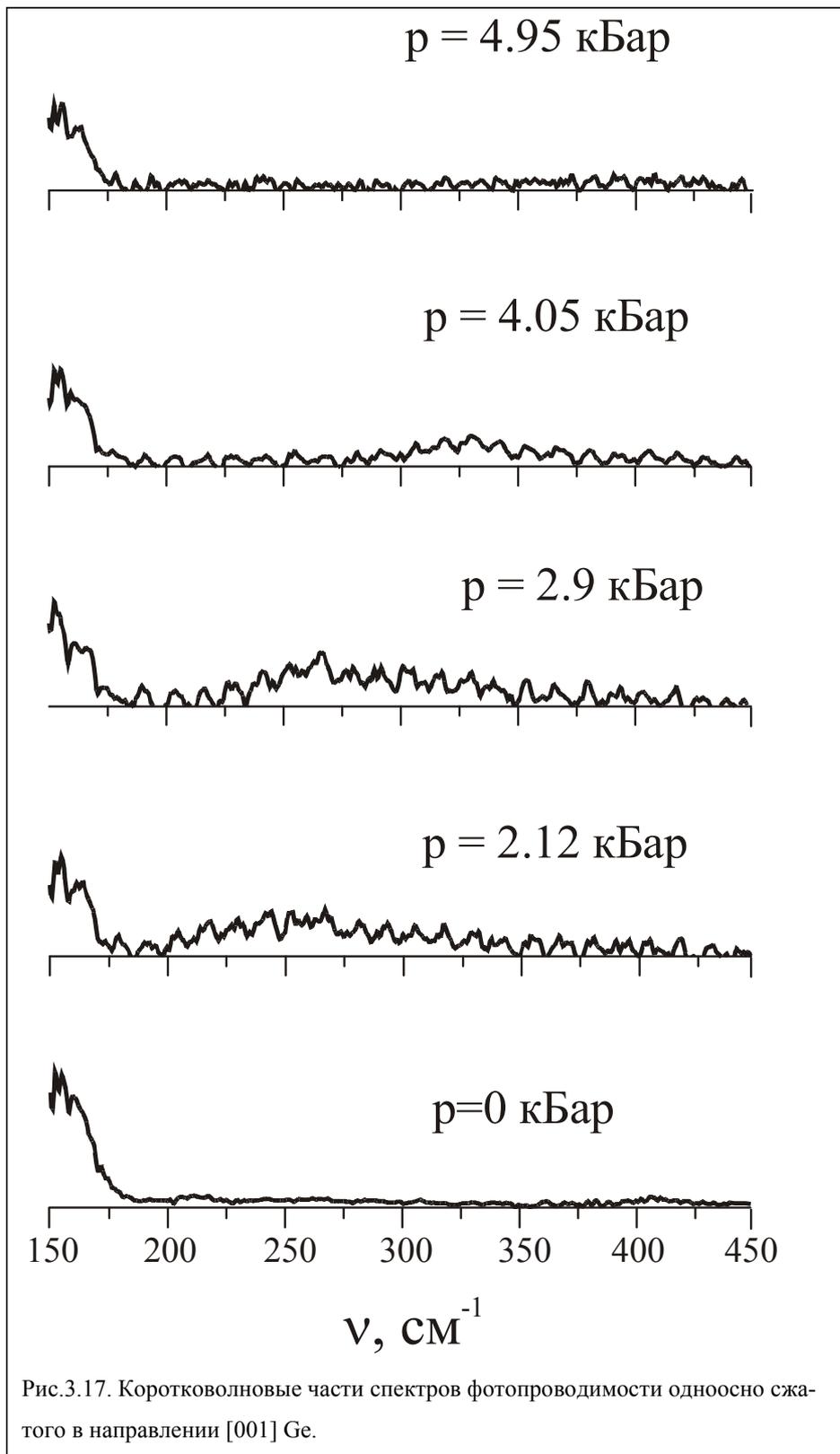
Как хорошо видно из рис.3.16, при одноосном сжатии образца длинноволновая граница и максимум фотопроводимости смещаются в длинноволновую область (см. также рис. 3.10), что связано с уменьшением энергии связи акцептора при одноосной деформации вследствие расщепления подзон и уменьшения эффективных масс дырок в нижней подзоне. Другим заметным эффектом одноосного сжатия является возникновение коротковолновой полосы фотопроводимости, которая отсутствует в недеформированном  $p$ -Ge – рис.3.16. Как видно из рис.3.17, эта полоса смещается с ростом давления в коротковолновую область. Естественно предположить, что она обусловлена переходами из основного состояния акцептора в верхнюю отщепленную давлением подзону дырок. Отметим, что сигнал в коротковолновом максимуме фотопроводимости много меньше, чем в длинноволновом максимуме; с ростом давления его величина падает. Это обусловлено тем обстоятельством, что в предельном случае больших давлений эти переходы становятся запрещенными, поскольку в этом случае волновая функция основного состояния акцептора

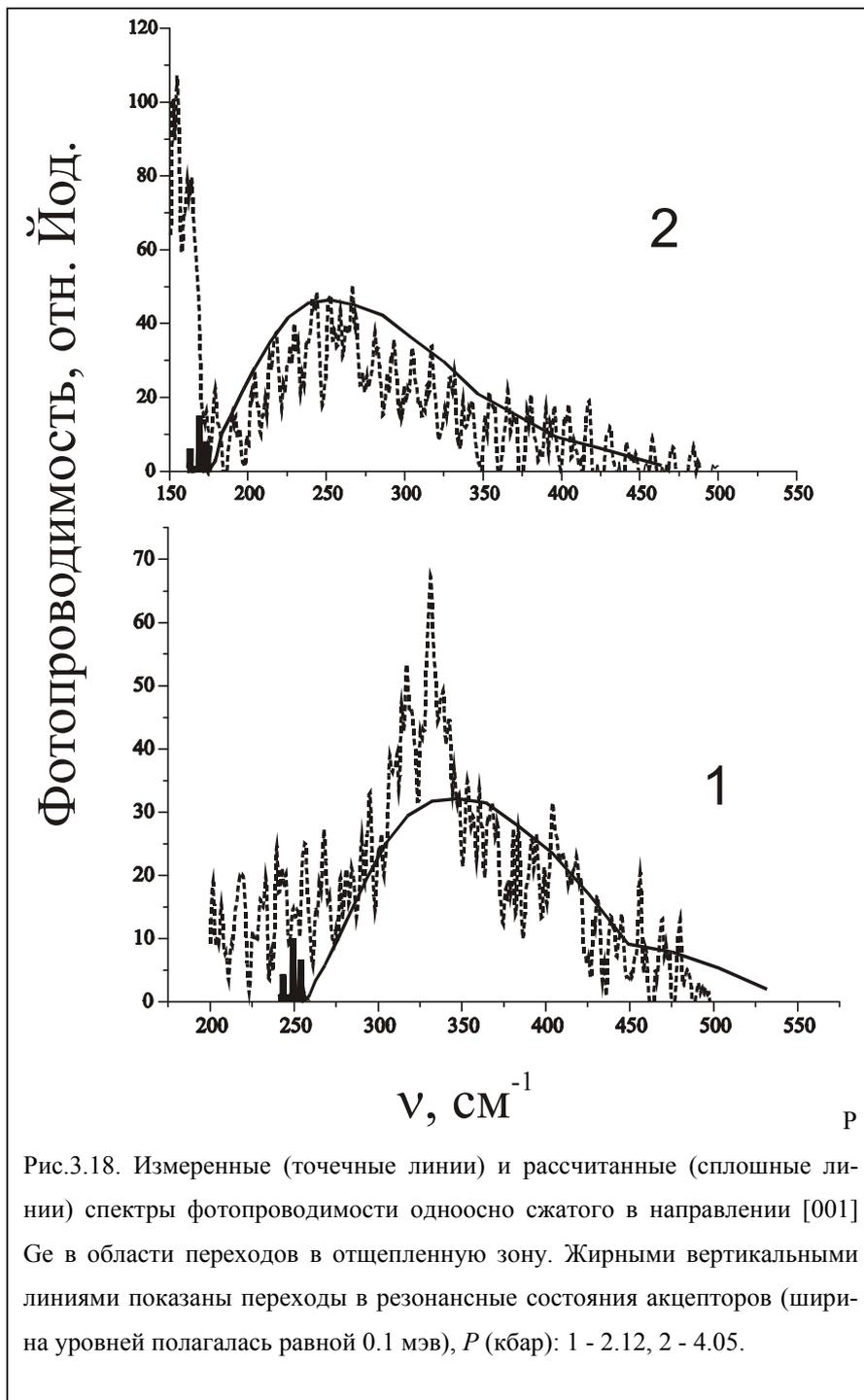
«строится» только из волновых функций дырок в нижней подзоне, и интеграл перекрытия с верхней подзоной стремится к нулю.

Как уже отмечалось, развитый численный метод расчета акцепторных состояний в деформированном германии позволяет находить волновые функции как локализованных состояний, так и состояний, попадающих в непрерывный спектр, что сделало возможным расчет вероятностей дипольно-оптических переходов между примесными уровнями вне рамок борновского приближения. Для интерпретации полученных экспериментальных результатов были проведены численные расчеты спектров примесной фотопроводимости по методике детально описанной в главе 1. На рис. 3.18 показаны более детально коротковолновые участки спектров для двух значений давления, для сравнения представлены также рассчитанные спектры примесной фотопроводимости для этих значений давления. В этих расчетах величина химического сдвига для основного состояния полагалась равной 1,5 мэВ (химический сдвиг для Ga в недеформированном германии). Видно, что имеет место удовлетворительное согласие эксперимента и расчета, как по положению спектрального максимума (который имеет ту же природу, что и для переходов в нижнюю подзону), так и по ширине полосы фотопроводимости.

Как видно из рис.3.16-3.18, в измеренных спектрах не удалось обнаружить каких-либо признаков спектральных линий, слева от коротковолновой полосы поглощения, которые можно было бы связать с переходами из основного состояния акцептора, на резонансные примесные состояния, связанные с отщепленной зоной. Видятся две возможные причины отсутствия этих линий в спектрах. Во-первых, как следует из численных расчетов (см. рис.3.18), интенсивность этих переходов в 2,5-3 раза меньше интенсивности переходов в непрерывный спектр, и соответствующие линии просто теряются в шумах. Во-вторых, не исключено, что деформация образца не является вполне однородной. Нетрудно понять, что неоднородность давления, скажем в 5% (т.е. 0.25 кбар), практически мало скажется на спектрах переходов в локализованные состояния и в нижнюю подзону, поскольку в пределе сильных давлений эти энергетические зазоры не меняются с давлением. С другой стороны, расщепление подзон составляет 6 мэВ на кбар, что при неоднородности давления в 0.25 кбар дает уширение резонансных состояний и спектра переходов в верхнюю подзону 1.5 мэВ или  $12 \text{ см}^{-1}$ . Такое уширение, как видно из рис.1-3, может привести к незначительному уширению спектра переходов в верхнюю подзону и размытию длинноволновой границы этого спектра. С другой стороны, оно будет катастрофичным для наблюдения линий переходов в резонансные состояния.







### 3.4.2. Фотодетектор с блокированной проводимостью по примесной зоне

#### на основе GeSi

Разработанный метод расчета спектра фотопроводимости объемного деформированного алмазоподобного полупроводника может быть применен для изучения устройств, предназначенных для детектирования излучения дальнего инфракрасного диапазона.

Типичный приемник с блокированной проводимостью по примесной зоне (Blocked Impurity Band – BIB), созданный на основе *p*-Ge или *p*-Si, состоит из нескольких эпитаксиальных слоев: активного слоя (5-20 мкм с уровнем легирования  $10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$  для кремниевых BIB-структур и порядка  $10^{16} \text{ см}^{-3}$  - для германиевых), блокирующего слоя (толщиной порядка нескольких микрон, состоящего из практически нелегированного материала), а также из двух сильно легированных контактов (см., например, [69,70]). Большая степень легирования активного слоя обеспечивает высокую квантовую эффективность приемника при его малых размерах. Однако при этом в области рабочих (гелиевых) температур, когда происходит вымораживание носителей на примесях, темновая проводимость активного слоя может быть существенной, вследствие прыжкового переноса носителей по примесной зоне. Введение блокирующего слоя с одной стороны повышает темновое сопротивление структуры, а с другой стороны, при определенной полярности внешнего напряжения приводит к образованию в активном слое области пространственного заряда (ОПЗ), в которой присутствует сильное электрическое поле и возможно лавинное умножение носителей посредством ударной ионизации.

BIB-приемники, созданные на основе дырочного германия (см., например [70]), имеют чувствительность в дальнем инфракрасном диапазоне ( $\lambda = 70 - 200 \text{ мкм}$ ). Как уже отмечалось (см. главу 3), при деформации кристалла Ge энергия связи акцепторов уменьшается. Соответственно полоса чувствительности фотоприемника из деформированного материала смещается в длинноволновую область. Слой  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ , выращенный на подложке Ge оказывается деформированным, поэтому несмотря на присутствие в растворе Si, и следовательно большую эффективную массу дырок, энергия связи акцептора в таком слое может быть меньше, чем в недеформированном объемном германии.

Как известно, из-за рассогласования постоянных решеток слой твердого раствора кремния в германии  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ , выращенный на подложке Ge, оказывается двучосно растянутым в плоскости, перпендикулярной направлению роста. Как уже отмечалось, такая деформация по действию на акцепторный спектр эквивалентна одноосному сжатию (вдоль направления роста слоя). Деформация зависит от доли кремния ( $x$ ) в твердом растворе, максимально возможная величина относительной деформации  $\epsilon$  выращенного слоя составляет  $0.04x$ .

При выращивании слоя на подложке, упругая энергия растёт линейно с его толщиной  $d$ , и при некоторой критической толщине  $d = d_c$  энергетически более выгодной оказывается неупругая релаксация напряжений через образование дислокаций на границе слой/подложка. После начала релаксации постоянная решётки слоя в плоскости роста  $a_{||}$  уже не совпадает с постоянной решётки подложки  $a_s$  и величина упругой деформации слоя уменьшается по сравнению со случаем  $d < d_c$ . Критическая толщина  $d_c$  уменьшается с ростом рассогласования

$$f = (a_{||} - a_s)/a_s. \quad (3.34)$$

Зависимость  $d_c(f)$  изучена теоретически и экспериментально [19,71,72]. В [19] было показано, что значения  $d_c$  для слоев, выращенных в неравновесных условиях, могут превышать теоретически полученные равновесные значения (см. рис.3.19).

Как уже отмечалось, деформация приводит к уменьшению энергии связи акцепторов в твердом растворе. С другой стороны, для увеличения деформации необходимо увеличивать долю кремния в растворе, что приводит к увеличению энергии связи акцепторной примеси. На рис.3.20 представлена рассчитанная зависимость энергий основного и нескольких нижних возбужденных состояний от доли кремния в твердом растворе, при этом деформация полагалась максимально возможной (т.е. толщина слоя предполагалась меньше критической  $d_{GeSi} < d_c$ ). Метод расчета энергий и волновых функций акцепторных состояний изложен в п.3.3.1. Нужно отметить, что поскольку доля кремния в слое GeSi предполагалась небольшой, для расчета спектра акцепторов в таком слое была использована та же модель, что и при расчете спектра в одноосно деформированном германии, т.е. не учитывались эффекты анизотропии закона дисперсии дырок в плоскости роста слоя и влияние спин-отщепленной подзоны.

Из рис.3.20 видно, что зависимость имеет немонотонный характер, и минимальная энергия ионизации соответствует  $x = 0.12$ . По сравнению с чистым германием энергия связи акцептора уменьшается примерно на 1.9 мэВ и 2.3 мэВ, для слоев твердого раствора выращенных на подложках Ge (111) и Ge (001) соответственно.

Максимальный фотоотклик в германиевых ВІВ-структурах наблюдается при длине волны падающего излучения  $\lambda = 140$  мкм, что соответствует D – линии в спектре фотопроводимости Ge:Ga (переход с основного состояния на второе возбужденное) [70]. Нужно отметить, что линии в спектре фотопроводимости, представленном в [70] сильно размыты: самые мощные линии (D и C), расстояние между которыми в спектре поглощения слаболегированного германия составляет 0.8 мэВ, практически сливаются. Этот эффект вероятно связан с сильным легированием активного слоя ( $N_A = 3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ), приводящим к возникновению достаточно широких “возбужденных” примесных зон. В своих дальней-

ших расчетах мы ориентировались на параметры типичной германиевой ВІВ–структуры [70]: толщина блокирующего слоя  $d_{BL} = 3.5$  мкм, толщина области пространственного заряда 2 мкм при рабочем напряжении 40 мВ (при большем напряжении быстро растет темновой ток, при меньшем – падает чувствительность).

Как уже отмечалось, заметный сдвиг полосы чувствительности приемника в длинноволновую область за счет использования в ВІВ–структуре напряженных слоев  $Ge_{1-x}Si_x$  может быть достигнут только при толщинах меньше критической  $d_{GeSi} < d_c$ , что накладывает ограничения на размер прибора и долю кремния в твердом растворе. Например, при “оптимальном”  $x = 0.12$  критическая толщина не превышает 2 мкм [19], что значительно меньше размеров используемых ВІВ–структур на основе Ge. Очевидно, что для напряженной структуры с параметрами, близкими к параметрам описанной выше структуры,  $d_c$  не должна быть меньше 5-6 мкм. Как следует из работы [19] при использовании оптимальной технологии на подложке Ge можно вырастить слой  $Ge_{1-x}Si_x$  требуемой толщины, если доля кремния в растворе не будет превышать 0.05. Энергия ионизации акцепторов в таком материале, рассчитанная методом разложения по плоским волнам, составляет примерно 8.2 мэВ (энергия ионизации мелкого акцептора в чистом германии составляет без учета химического сдвига 9.6 мэВ).

На рис.3.21 представлены рассчитанные спектры фотопроводимости двух ВІВ–структур: недеформированного Ge и структуры из  $Ge_{0.95}Si_{0.05}$  с максимально возможной деформацией  $\epsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ . При расчете спектров предполагалось, что вероятность ионизации носителей в активном слое с возбужденных состояний в валентную зону близка к единице. Введя дополнительное уширение примесных уровней, мы учли размытие возбужденных состояний из-за взаимодействия примесных центров (при  $N_A = 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  среднее расстояние между примесными ионами составляет около 400 Å). Это дополнительное уширение было подгоночным параметром, с помощью которого удалось добиться хорошего совпадения формы рассчитанного спектра фотопроводимости германиевой ВІВ–структуры с измеренным спектром фоточувствительности Ge:Ga ВІВ–детектора [70]. Полуширина возбужденных состояний составила при этом 0.4 мэВ. Из рис.3.21 видно, что основной максимум фотопроводимости ВІВ–структуры из напряженного  $Ge_{0.95}Si_{0.05}$  смещается по сравнению со структурой на основе Ge примерно на 1.8 мэВ и 2.2 мэВ, для подложек (111) и (001) соответственно. Таким образом, использование ВІВ–структур на основе напряженного твердого раствора  $Ge_{1-x}Si_x$  позволяет расширить рабочий диапазон чувствительности приемника в область  $\lambda > 200$  мкм.

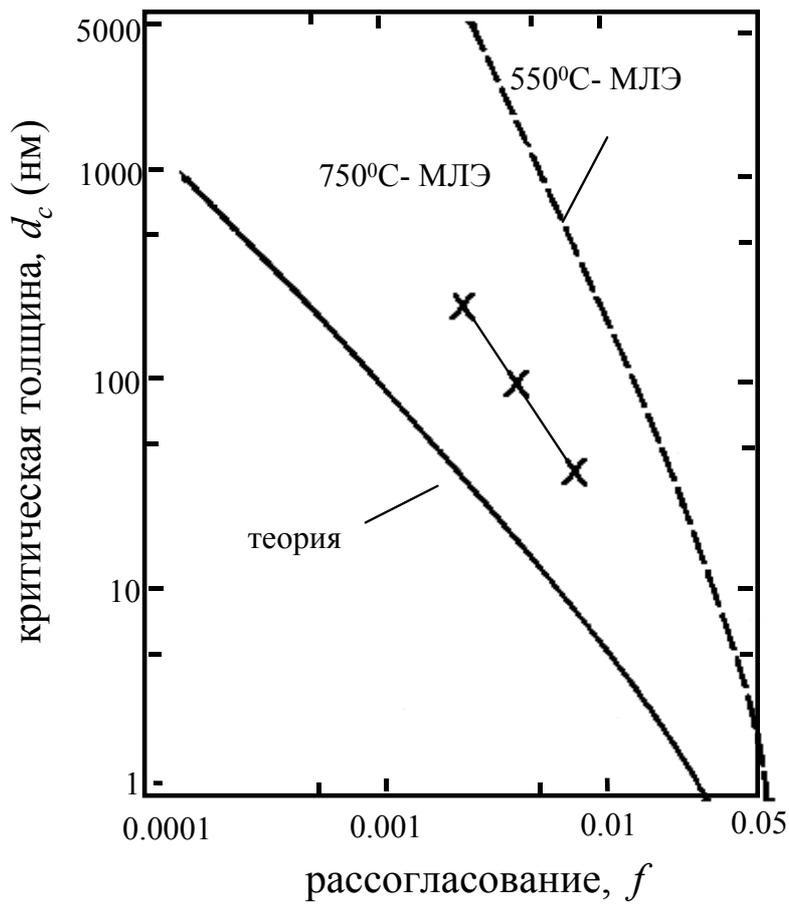


Рис.3.19. Зависимость критической толщины гетероэпитаксиального слоя  $d_c$  от величины рассогласования  $f$ . Сплошной линией показана зависимость, рассчитанная из условия минимума энергии структуры в равновесных условиях; пунктирными линиями и точками показаны зависимости, полученные экспериментально при молекулярно-лучевой эпитаксии слоёв SiGe на подложке Si при двух различных температурах роста [14].

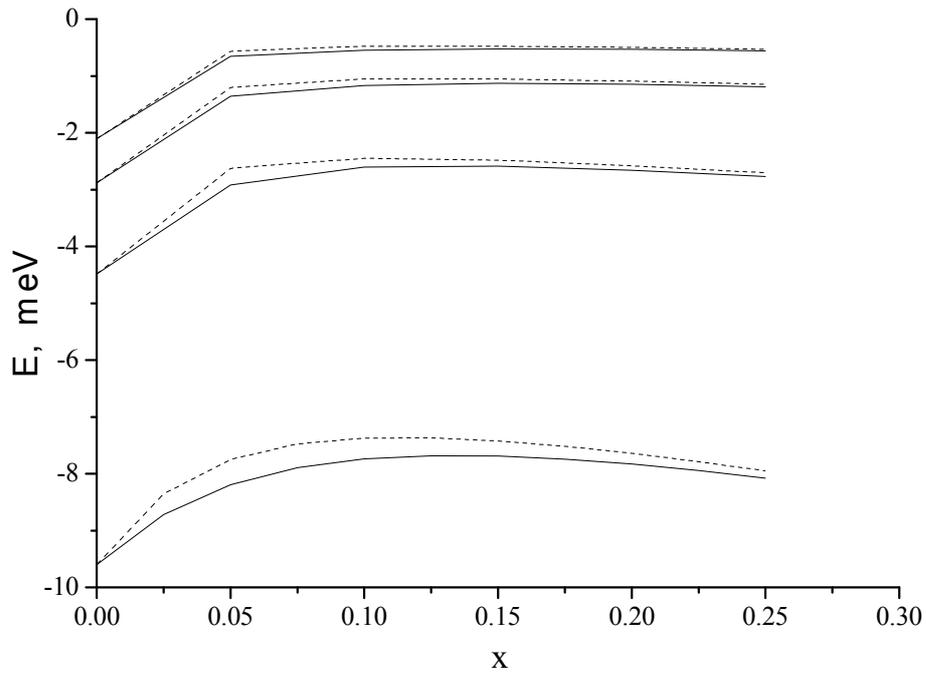


Рис.3.20. Зависимость энергии основного и нескольких возбужденных состояний акцепторов в слое  $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ , выращенном на подложке Ge от доли кремния в твердом растворе  $x$ . Сплошная линия соответствует структуре, выращенной на подложке Ge (111), пунктирная линия – выращенной на подложке (001). Деформация материала  $\varepsilon = 0.04x$ .

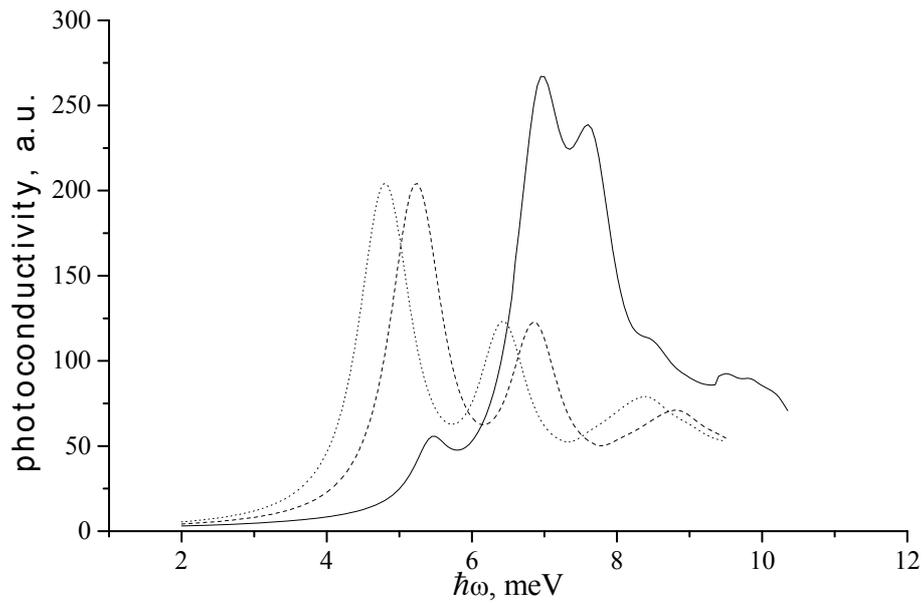


Рис.3.21. Рассчитанные спектры фотопроводимости ВІВ-структур. Сплошная линия - структура из недеформированного Ge, пунктирная и точечная линии - Ge<sub>0.95</sub>Si<sub>0.05</sub> с деформацией  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-3}$ , выращенный на разных подложках Ge: пунктирная линия – (111), точечная линия – (001). Полуширина примесных уровней полагалась равной 0.4 мэВ.

## Глава 4. Акцепторы в гетероструктурах Si/SiGe с квантовыми ямами

### 4.1. Мелкие акцепторы в структурах на основе Si и SiGe

Интерес к исследованиям мелких акцепторов в гетероструктурах на основе кремния связан с обнаружением в гетероструктурах SiGe/Si:B с квантовыми ямами стимулированного излучения в дальнем ИК диапазоне в условиях латерального транспорта носителей в сильных электрических полях, которое связывается с оптическими переходами между состояниями примеси бора [16-18]. Типичное содержание Ge в сплаве составляло 15% при ширине квантовой ямы (слоя GeSi) около 200 Å. На рис.4.1 представлена зависимость интенсивности излучения от тока в изучавшейся структуре [16]. При некотором значении тока происходит скачок интенсивности излучения не менее чем на порядок. Авторы [16-18] связывают это излучение с переходами дырок между резонансными и локализованными уровнями примеси бора (см. рис. 4.2). Важную роль в механизме формирования инверсии играет, по мнению авторов [16], искривление зон, которое возникает вследствие захвата дырок на поверхностные состояния и возникновения заряда на поверхности. Нужно отметить, что, делая оценки расщепления основного уровня акцепторов в слое GeSi, авторы [16] не учитывали размерное квантование, которое в квантовой яме шириной 200 Å может быть давать заметный вклад в величину этого расщепления.

В этой связи возникает необходимость точного расчета акцепторного спектра в гетероструктурах Si/SiGe. Нужно отметить, что к настоящему времени акцепторы в таких структурах плохо изучены как экспериментально, так и теоретически. Первые расчеты спектра мелких акцепторов в Si/SiGe был сделаны в работе [73] вариационным методом с использованием двухзонной модели Латтинжера в аксиальном приближении (аналогично [9]). Однако, как уже отмечалось, при расчете спектра акцепторов в структурах Si/SiGe, в отличие от расчета для структур на основе германия, нельзя пренебрегать спин-отщепленной дырочной подзоной. Кроме того, поскольку закон дисперсии дырок в кремнии существенно анизотропен, использование аксиального приближения представляется неправомерным.

#### 4.1.1. Структура валентной зоны в гетероструктурах Si/SiGe

Валентные зоны объемных Ge, Si и твердого раствора GeSi имеют похожую структуру: потолок валентных зон в этих материалах соответствует  $\mathbf{k} = 0$  (Г-точка), зоны состоят из трех ветвей, две из которых вырождены в точке  $\mathbf{k} = 0$ . Исследуемые структуры растились псевдоморфно (т.е. постоянная решетки в плоскости роста структуры  $a_{//} = a_{Si}$ ) на подложке Si в направлении [001]. При этом толщина структуры была значительно меньше критической. На рис 4.1 представлена зонная диаграмма такой гетероструктуры

Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>, рассчитанная в работе [74] из первых принципов. В работе [74] были вычислены “усредненные” разрывы валентных зон (нижняя пунктирная линия на рис 4.3). Усреднение означало, что положение края валентной зоны определялось без учета расщепления, связанного со спин-орбитальными взаимодействиями и одноосной деформации, однако с учетом всесторонней составляющей деформации (как уже отмечалось в главе 3, двuosную деформацию можно представить как сумму всесторонней и одноосной). Далее, пользуясь известными величинами спин-орбитального расщепления и констант деформационного потенциала для Ge и Si и используя для раствора GeSi интерполяции этих величин [75], можно найти положение каждой дырочной подзоны. Положение краев подзон с учетом одноосного растяжения слоя GeSi и спин-орбитального расщепления показано на рис.4.3 сплошными линиями. В настоящей работе для определения глубины квантовых ям для дырок в гетероструктурах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> для определенных значений  $x$  мы использовали результаты полученные в работе [74] и представленные на рис.4.3.

Поскольку величина спинового расщепления валентной зоны в слоях Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> с высоким содержанием Si может быть порядка энергии ионизации акцептора, то при расчете акцепторных состояний необходимо учитывать спин-отщепленную зону. Поэтому гамильтониан, описывающий кинетическую энергию дырок, является матрицей 6×6 и имеет вид [26]:

$$H_L = \begin{pmatrix} F & H & I & 0 & \frac{iH}{\sqrt{2}} & -i\sqrt{2}I \\ H^* & G & 0 & I & \frac{(G-F)i}{\sqrt{2}} & \frac{i\sqrt{3}H}{\sqrt{2}} \\ I^* & 0 & G & -H & -i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & \frac{(G-F)i}{\sqrt{2}} \\ 0 & I^* & -H^* & F & -i\sqrt{2}I^* & -\frac{iH^*}{\sqrt{2}} \\ -\frac{iH^*}{\sqrt{2}} & -\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}} & i\sqrt{\frac{3}{2}}H & -i\sqrt{2}I & \frac{(F+G)}{2} - \Delta_{S.O.} & 0 \\ i\sqrt{2}I^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}H^* & -\frac{(G-F)i}{\sqrt{2}} & \frac{iH}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{(F+G)}{2} - \Delta_{S.O.} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Вид элементов матрицы (4.1) был дан выражениями (1.10)-(1.13).

По аналогии с двухзонной моделью Латтинжера (см. (3.9), (3.10)) деформационный потенциал для одноосно растянутого слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> с высоким содержанием Si имеет вид:

$$H_d = \begin{vmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & -i\frac{\Delta}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & -i\frac{\Delta}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 \\ 0 & i\frac{\Delta}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i\frac{\Delta}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \quad (4.2)$$

где согласно [26,59]:

$$\Delta = 2(-2.33(1-x)-2.08x)\left(1 + 2\frac{C_{11}}{C_{12}}\right)\varepsilon_{xx}, \quad (4.3)$$

$$C_{11}=167.7(1-x)+131.1x, \quad (4.4)$$

$$C_{12}=64.98(1-x)+49.2x, \quad (4.5)$$

$$\varepsilon_{xx} = \frac{a_{Si}}{a_{SiGe}} - 1, \quad (4.6)$$

$x$ –доля германия в твердом растворе,  $a_{Si,SiGe}$  – постоянная решетки кремния и недеформированного твердого раствора соответственно.

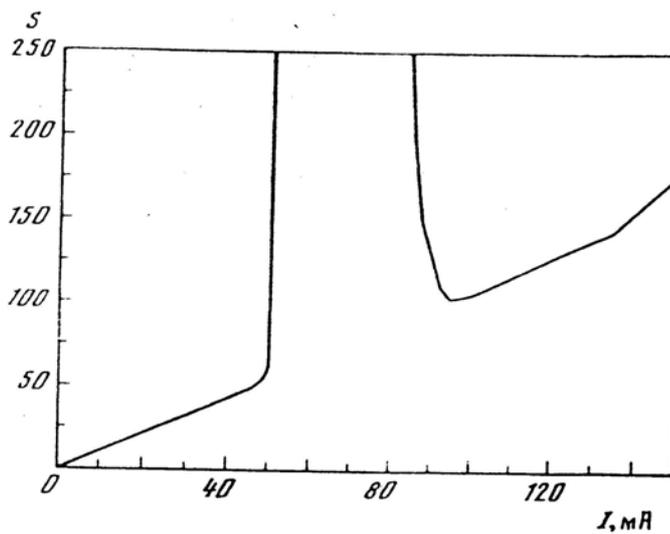


Рис. 4.1. Зависимость интенсивности  $S$  (произвольные единицы) дальнего ИК излучения от продольного тока  $I$  в квантовой яме GeSi [16].

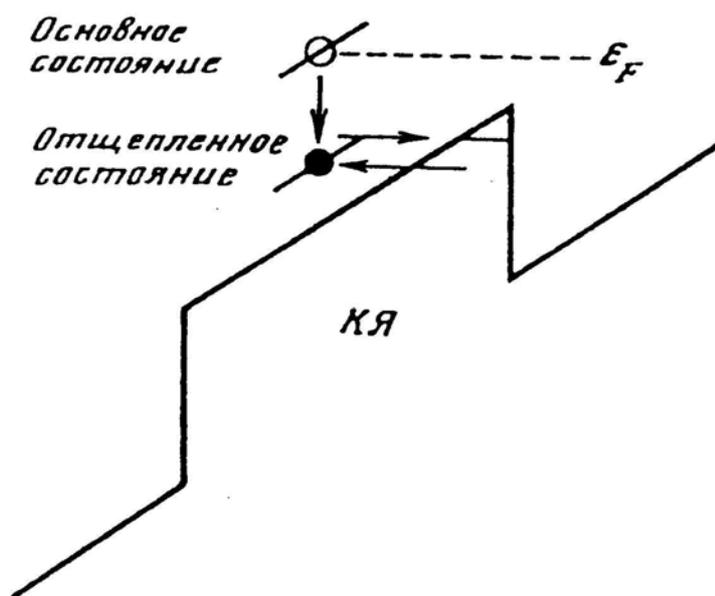


Рис.4.2. Схема возникновения инверсии ( $\epsilon_F$  – энергия Ферми) в гетероструктуре Si/SiGe [16].

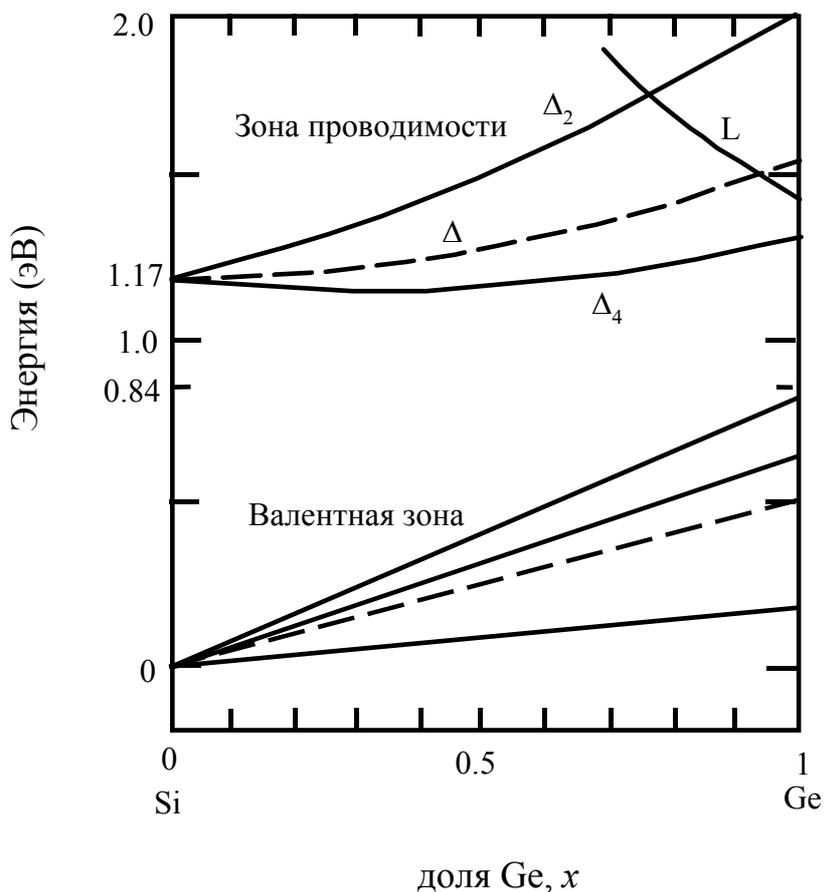


Рис.4.3. Зависимости краёв валентной зоны и зоны проводимости слоя Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>, псевдоморфно выращенного на подложке Si в направлении [001] от доли германия в сплаве. Энергия отсчитывается от дна валентной зоны в объёмном Si. Пунктирными линиями показаны края валентной зоны и зоны проводимости без учёта расщепления на подзоны за счёт всесторонней деформации; сплошными линиями - расщепившиеся под действием одноосной деформации подзоны тяжёлых и лёгких дырок, спин-отщеплённая подзона дырок, а также минимумы  $\Delta_2$  и  $\Delta_4$  в зоне проводимости. Из работы [74].

#### 4.2. Расчет спектра мелких акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe

В этом разделе представлены исследования мелких акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe с напряженными квантовыми ямами из твердого раствора SiGe, выращенных на кремниевых (001) подложках, изложенные в работах [A32-A35].

Для расчета спектра акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe был предложен численный метод, который является модификацией метода разложения по плоским волнам, описанного в главах 1 и 3. Использовался гамильтониан  $6 \times 6$ , представляющий собой сумму гамильтониана (4.1), потенциальной энергии дырки в прямоугольной квантовой яме, члена, описывающего эффекты деформации (4.2), и энергии кулоновского взаимодействия с заряженным акцептором. Сначала были найдены волновые функции дырок в квантовой яме без учета кулоновского потенциала. Волновая функция акцептора разлагалась по базису из огибающих волновых функций свободных дырок в квантовой яме  $g_n^s(\mathbf{k}, z) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p})$ , которые являются собственными функциями гамильтониана в отсутствие кулоновского потенциала

$$F^s(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} R_n(\mathbf{k}) g_n^s(\mathbf{k}, z) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}), \quad (4.7)$$

где  $n$  - номер подзоны размерного квантования,  $\mathbf{r}$  - радиус-вектор,  $\mathbf{p}$  - радиус-вектор в плоскости квантовой ямы,  $\mathbf{k}$  - волновой вектор дырки а  $s = \{-3/2, -1/2, 1/2, 3/2\}$  - проекция спина на ось  $z$ . Коэффициенты разложения здесь зависят как от модуля волнового вектора дырки  $k$  так и от его направления, характеризуемого углом  $\alpha$ . Отметим, что при повороте вокруг оси  $z$  на угол  $\pi/4$  волновые функции преобразуются следующим образом:

$$C_4 [R_n(k, \alpha) g_n^s(k, \alpha, z)] = R_n(k, \alpha) g_n^s(k, \alpha, z) \exp(im \frac{\pi}{4}), \quad (4.8)$$

где  $m = \pm 3$  или  $\pm 1$ .

Подставляя разложение (4.7) в уравнение эффективной массы, получаем интегральное уравнение для коэффициентов разложения. Далее интеграл может быть заменен дискретной суммой по  $k$  и  $\alpha$ . При этом шаг по  $k$  выбирался меньше обратного боровского радиуса, чтобы подынтегральная функция мало менялась на одном шаге. Шаг по  $\alpha$  был выбран равным  $\pi/4$ . Суммирование по  $k$  может быть оборвано при величинах волнового вектора много больших обратного боровского радиуса. Таким образом, задача сводится к диагонализации конечномерной эрмитовой матрицы.

Чтобы оценить погрешность расчета, связанную с выбором большого шага по углу  $\alpha$  был проведен по такой же процедуре (волновая функция акцептора разлагалась по базису из волновых функций свободных дырок) расчет энергий  $p$ -подобных возбужденных со-

стояний акцепторов, для которых химический сдвиг несущественен, в объемном Si. Было проведено сравнение с экспериментальными данными из работы [67]. Сравнение показало, что точность расчета для нижнего возбужденного состояния составляет около 3%.

В таблице 4.1 представлен рассчитанный спектр мелких акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы гетероструктуры Si/SiGe в сравнении с акцепторным спектром в объемном кремнии. В обоих случаях химический сдвиг не учитывался. Видно, что энергия связи акцепторов в квантовой яме напряженной гетероструктуры заметно меньше энергии ионизации акцепторов в объемном материале.

**Таблица 4.1. Спектр акцепторов в центре квантовой ямы гетероструктуры Si/SiGe в сравнении со спектром в объемном Si.**

	Гетероструктура Si/Ge <sub>0,2</sub> Si <sub>0,8</sub> ( $\epsilon = 5 \times 10^{-3}$ , $d_{QW} = 180 \text{ \AA}$ )	Объемный Si (приближение эффективной массы)
Основное состояние ( <i>s</i> -подобное)	17.0 мэВ	31.5 мэВ [56]
1 <sup>ое</sup> возбужденное состояние ( <i>p</i> -подобное)	6.5 мэВ	15.6 мэВ [67]
2 <sup>ое</sup> возбужденное состояние ( <i>p</i> -подобное)	3.0 мэВ	11.4 мэВ [67]

На рис.4.4 представлены энергии основного и нижнего возбужденного акцепторных состояний в зависимости от ширины квантовой ямы. Видно, что имеется минимум энергии ионизации (16.5 мэВ), соответствующий ширине ямы  $d_{QW} = 150 \text{ \AA}$ . Такая немонотонная зависимость энергии связи от ширины ямы отражает обсуждавшийся во введении двойственный характер влияния пространственного ограничения на энергию связи мелкого акцептора. С одной стороны, пространственное ограничение волновой функции барьерами приводит к ее дополнительной локализации около примесного иона и, тем самым, увеличивает энергию связи по сравнению с объемным полупроводником. С другой стороны, из-за эффектов размерного квантования уменьшается эффективная масса дырок в нижней подзоне, что должно приводить к уменьшению энергии ионизации.

На рис.4.5 представлены зависимости энергии основного состояния от положения акцептора в квантовой яме. Хорошо видно, что энергия ионизации акцептора при смеще-

нии от центра ямы к гетерогранице уменьшается в 1.5-2 раза, что связано с уменьшением кулоновской энергии.

В таблице 4.2 представлены энергии «основного» и нескольких возбужденных акцепторных резонансных состояний в гетероструктуре #349 Si/Ge<sub>0.24</sub>Si<sub>0.76</sub> ( $\epsilon = 6 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 122 \text{ \AA}$ ), Энергия отсчитывается от края второй подзоны ( $hh_2$ ) к которой относятся рассчитанные примесные уровни.

Таблица 4.2. Энергии нескольких акцепторных состояний, связанных со второй подзоной размерного квантования в гетероструктуре #349 Si/Ge<sub>0.24</sub>Si<sub>0.76</sub> ( $\epsilon = 6 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 122 \text{ \AA}$ ). Вторая подзона отстоит от нижней на 20 мэВ.

	Энергия уровня, отсчитанная от края второй подзоны размерного квантования.
Основное состояние ( $2p_0$ – подобное)	-19.5 мэВ
$3p_0$ –подобное состояние	-8.7 мэВ
$3d_{\pm 1}$ – подобное состояние	-8.4 мэВ

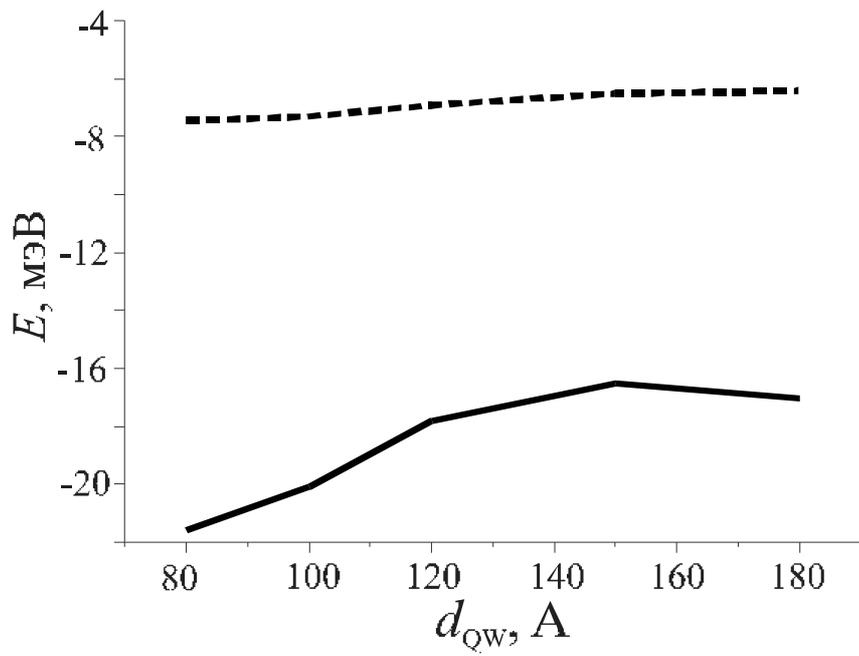


Рис.4.4. Рассчитанные энергии основного и нижнего возбужденного состояний мелких акцепторов, помещенных в центр квантовой ямы гетероструктуры Si/Si<sub>0.8</sub>Ge<sub>0.2</sub> ( $\epsilon_{xx} = 5 \times 10^{-3}$ ) в зависимости от ширины квантовой ямы. Сплошная линия - основное состояние, пунктирная линия: нижнее возбужденное  $p$ -подобное состояние.

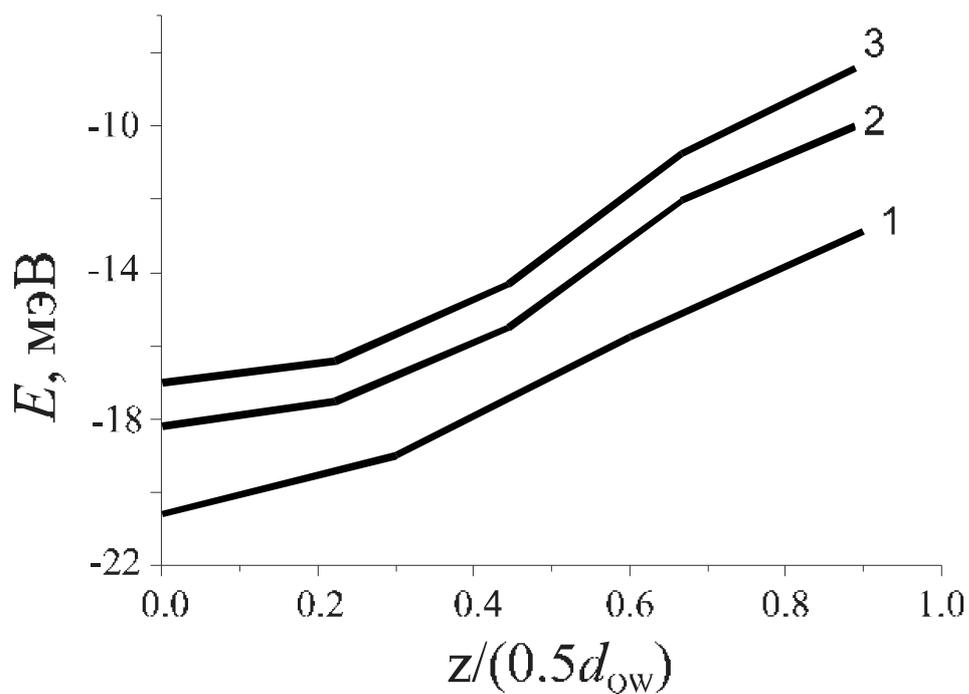


Рис.4.5. Рассчитанные энергии основного состояния акцепторов в некоторых гетероструктурах в зависимости от расстояния примеси до центра квантовой ямы. Линия 1 соответствует гетероструктуре Si/Ge<sub>0.15</sub>Si<sub>0.85</sub> ( $\epsilon_{xx} = 3.75 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 100 \text{ \AA}$ ), линия 2 - Si/Ge<sub>0.15</sub>Si<sub>0.85</sub>  $\epsilon_{xx} = 3.75 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 180 \text{ \AA}$ , линия 3 - Si/Ge<sub>0.2</sub>Si<sub>0.8</sub>  $\epsilon_{xx} = 5 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 180 \text{ \AA}$ .

### 4.3. Оценка химического сдвига для акцепторов в гетероструктурах Si/SiGe

Чтобы сравнить результаты расчетов с известными экспериментальными данными, необходимо учесть химический сдвиг, который оказывается существенным для акцепторов в кремнии. Наименьший химический сдвиг в объемном кремнии наблюдается для примеси бора:  $\Delta E_{\text{chm}} = 15.2$  мэВ [67].

Для мелкого акцептора в гетероструктуре можно грубо оценить химический сдвиг, пользуясь приведенными ниже простыми рассуждениями. Сдвиг определяется амплитудой волновой функции акцептора в месте расположения примесного иона [68]:  $\Delta E_{\text{chm}} \sim f^2(r=0)$ . Следовательно, химическим сдвигом для  $p$ -подобных состояний можно пренебречь. Для  $s$ -подобных состояний из условий нормировки следует:  $f^2(r=0) \sim 1/a^3$ , где  $a$  – боровский радиус. С другой стороны,  $E_i \sim 1/a^2$  где  $E_i$  – энергия связи. Таким образом,  $\Delta E_{\text{chm}} \sim E_i^{3/2}$ . Следовательно, для основного состояния бора в центре квантовой ямы гетероструктуры Si/Ge<sub>0.2</sub>Si<sub>0.8</sub> (1<sup>ая</sup> линия на рис.4.5) химический сдвиг можно оценить как  $(20\text{мэВ}/31.5\text{мэВ})^{3/2} * 15.2\text{мэВ} \approx 9.7$  мэВ. Нужно отметить, что такая простая оценка возможна только для примеси помещенной в центр квантовой ямы, поскольку в других случаях максимум волновой функции основного ( $s$ -подобного) состояния мелкого акцептора может не совпадать с местом положения иона примеси.

Чтобы оценить химический сдвиг для акцептора, помещенного в произвольную точку гетероструктуры, в работе использовался аналогично [76] модельный потенциал, существенный в окрестности акцепторного иона:

$$\Delta V = \frac{e^{-\alpha r}}{\kappa_{\text{eff}} r},$$

где  $1 < \kappa_{\text{eff}} < 11.4$  - эффективная диэлектрическая проницаемость.  $\kappa_{\text{eff}}$  и  $\alpha$  являются подгоночными параметрами, которые подбирали, решая задачу о спектре акцепторов в кремнии и сопоставляя результаты расчета с экспериментальными данными [67]. В таблице 4.3 представлены параметры  $\kappa_{\text{eff}}$  и  $\alpha$  для настоящего расчета

**Таблица. 4.3. Параметры модельного потенциала, полученные из сравнения результатов расчета энергии ионизации мелкого акцептора в объемном кремнии с экспериментальными данными.**

Примесь	$\kappa_{\text{eff}}$	$\alpha$ (Å)
<b>B</b>	<b>1.5</b>	<b>5.25</b>
<b>Al</b>	<b>1.</b>	<b>5.25</b>

<b>Ga</b>	<b>1.</b>	<b>5.8</b>
-----------	-----------	------------

Рис.4.6 демонстрирует изменение спектра  $s$  – подобных состояний акцепторов в гетероструктуре Si/Ge<sub>0.15</sub>Si<sub>0.85</sub> ( $\epsilon = 3.75 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 100 \text{ \AA}$ ) вследствие химического сдвига. Заметим, что расхождение расчета с помощью модельного потенциала с грубой оценкой, сделанной для химического сдвига основного состояния акцептора, помещенного в центр квантовой ямы, составляет около 20 %.

Отметим сильную зависимость энергии основного состояния от положения акцептора в квантовой яме. Хорошо видно, что энергия ионизации акцептора (рассчитанная в приближении эффективной массы) при смещении от центра ямы к гетерогранице уменьшается в 1.5-2 раза, что связано с уменьшением кулоновской энергии.

Расчет показывает, что химический сдвиг значителен для акцепторов в центре квантовой ямы (около 12 мэВ для бора), но оказывается незначительным для примеси на гетероинтерфейсе. Этот эффект связан с уменьшением амплитуды волновой функции акцептора в месте расположения примесного иона при приближении этого иона к гетерогранице.

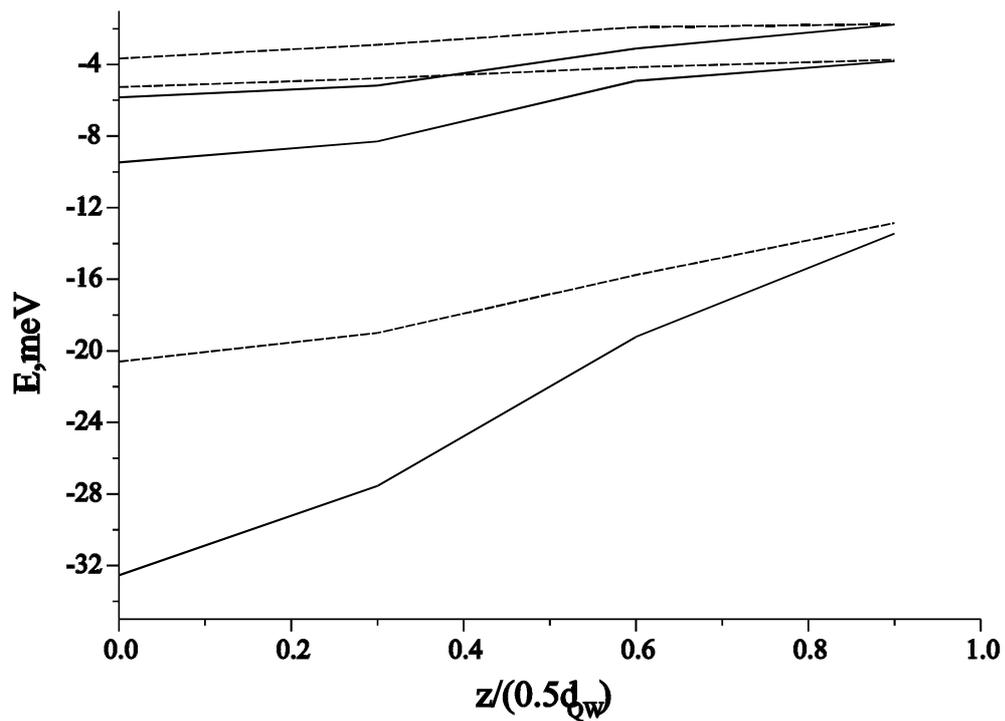


Рис. 4.6. Рассчитанные энергии основного и нескольких возбужденных  $s$  – подобных состояний акцепторов в гетероструктуре Si/Ge<sub>0.15</sub>Si<sub>0.85</sub> ( $\epsilon_{xx} = 3.75 \times 10^{-3}$ ,  $d_{QW} = 100 \text{ \AA}$ ) в зависимости от расстояния примеси до центра квантовой ямы. Пунктирные линии – расчет без учета химического сдвига. Сплошные линии – расчет состояний бора.

## Заключение

Сформулируем основные результаты работы:

1. Развита численный метод, позволяющий рассчитывать спектр мелких акцепторов в гетероструктурах с квантовыми ямами, основанный на разложении акцепторной волновой функции по базису из волновых функций свободных дырок в квантовых ямах. Метод позволяет находить энергии и волновые функции как локализованных состояний, так и состояний, попадающих в непрерывный спектр.
2. Изучена зависимость спектра мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi от параметров структур (от ширины и деформации слоев квантовых ям) и от положения в них примесного иона. Показано, что эффекты размерного квантования могут уменьшать энергию ионизации акцепторов. Так в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> ( $d_{\text{Ge}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $P_{\text{equiv.}} = 4 \text{ кбар}$ ) энергия связи акцептора в центре квантовой ямы составляет 6.3 мэВ, в то время как в объемном Ge при такой же деформации – 7 мэВ. Увеличение упругой деформации слоев гетероструктур также приводит к уменьшению энергии ионизации акцепторов. Сочетание размерного квантования и деформации приводит к тому, что энергия ионизации мелких акцепторов в гетероструктурах значительно уменьшается по сравнению с энергией ионизации в объемных полупроводниках. Так в гетероструктуре Ge/Ge<sub>0.88</sub>Si<sub>0.12</sub> ( $d_{\text{Ge}} = 200 \text{ \AA}$ ,  $P_{\text{equiv.}} = 4 \text{ кбар}$ ) энергия связи акцептора, помещенного в центр квантовой ямы, составляет 7.3 мэВ (при энергии ионизации мелкого акцептора в объемном германии около 9.8 мэВ) и уменьшается до 4 мэВ при перемещении примесного иона к гетерогранице. При перемещении иона акцептора в квантовый барьер сохраняются связанные состояния под нижней подзоной размерного квантования. Такие состояния являются состояниями дырок, находящихся в квантовой яме и взаимодействующих с примесным ионом, помещенным в барьер. Энергия ионизации состояний акцептора, помещенного в центр квантового барьера, для гетероструктур Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> ( $x = 0.1 \div 0.12$ ,  $d_{\text{Ge}} = 200 \div 350 \text{ \AA}$ ,  $d_{\text{GeSi}} = 200 \text{ \AA}$ ) составляет 1.8-2.2 мэВ, что примерно в 4 раза меньше энергии ионизации акцептора в центре квантовой ямы аналогичных структур. Проведены расчеты спектров фотопроводимости гетероструктур Ge/GeSi, позволившие объяснить наблюдаемые спектральные особенности фототермической ионизацией распределенных по структуре остаточных акцепторов.
3. Рассчитаны зависимости энергии мелких акцепторных уровней в гетероструктурах Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> ( $x = 0.1 \div 0.2$ ) от ширины квантовых ям. Показано, что зависимость энергии ионизации акцептора от ширины квантовой ямы является немонотонной и минимум реализуется при ширине квантовых ям около 150  $\text{\AA}$ .

4. Выполнены расчеты величины химического сдвига для акцепторов в гетероструктурах  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  ( $x = 0.1 \div 0.2$ ). Показано, что химический сдвиг максимален для акцепторов в центре квантовой ямы (около 12 мэВ для примеси бора), но оказывается незначительным для примеси на гетероинтерфейсе (меньше 1 мэВ), что связано с уменьшением амплитуды волновой функции акцептора в месте расположения примесного иона при приближении иона к гетерогранице.
5. Рассчитаны спектры поглощения гетероструктур  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  и  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$  с учетом квазистационарных примесных состояний, что позволило объяснить наблюдаемые особенности в коротковолновых областях спектров фотопроводимости гетероструктур  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  ( $18 \div 20$  мэВ) и  $\text{GaAs}/\text{InGaAs}$  (около 37 мэВ) переходами на квазистационарные энергетические уровни, связанные с верхними подзонами размерного квантования.
6. Развита численный метод расчета состояний мелких акцепторов в объемных полупроводниках, основанный на разложении волновой функции примесного центра по базису из волновых функций свободных дырок, позволяющий находить энергии, времена жизни и волновые функции квазистационарных состояний. Расхождение рассчитанных (для проверки точности метода) и экспериментально полученных значений энергии связи составляет 12% для основного и 7.5% для состояния  $2\Gamma_8^+$ , в то время как для других возбужденных состояний (для которых величина химического сдвига мала) расхождение результатов расчета и эксперимента находится в пределах 4-5%.
7. Изучена зависимость энергии нижнего квазистационарного состояния мелкого акцептора в одноосно сжатом германии от величины приложенного давления. Показано, что это состояние происходит из возбужденного состояния  $4\Gamma_8^+$  с энергией связи 1.3 мэВ (в отсутствие деформации), а не из основного состояния, как полагалось ранее. Верхнее отщепившееся от основного уровня состояние не испытывает антипересечений и не выходит в непрерывный спектр с ростом давления. Нижнее квазистационарное состояние выходит в непрерывный спектр при давлении  $P = 0.4$  кбар для сжатия вдоль оси  $[001]$  и при  $P = 0.6$  кбар для сжатия вдоль оси  $[111]$ . При выходе в непрерывный спектр полуширина этого состояния быстро достигает максимального значения 1–1.15 мэВ, а затем монотонно убывает при увеличении давления.
8. Рассчитаны спектры примесной фотопроводимости одноосно сжатого  $p\text{-Ge}$  ( $P \parallel [001]$ ). Показано что наблюдаемая при  $P = 2 \div 5$  кбар коротковолновая полоса фотопроводимости в области  $200 \div 450 \text{ см}^{-1}$  связана с переходами в верхнюю дырочную подзону, отщепленную давлением. Интенсивность переходов в резонансные состояния, связанные с верхней подзоной в 2.5-3 раза меньше интенсивности переходов в непрерывный спектр этой подзоны.

В заключение автор считает приятным долгом поблагодарить своих научных руководителей В.И.Гавриленко и В.Я.Алешкина за интересную предложенную тему, постоянное внимание к работе, терпение и ценные обсуждения полученных результатов. Автор благодарен В.Я.Алёшкину за предоставление результатов расчетов энергий и волновых функций свободных дырок в гетероструктурах с квантовыми ямами, А.В.Антонову, Д.М.Гапоновой, И.В.Ерофеевой, М.Д.Молдавской, Д.Г.Ревину за предоставление экспериментальных данных по измерению примесной фотопроводимости и фотолюменесценции гетероструктур и полезные обсуждения, И.Н.Ясиевич и М.С.Кагану - за интересные обсуждения и дискуссии. Автор очень признателен А.М.Сатанину за конструктивную критику диссертационной работы, приведшую к значительному улучшению диссертации.

## Приложение 1. Угловая зависимость коэффициентов разложения по функциям свободных частиц в аксиальном приближении.

1) Случай простой зоны (донорная примесь, например в GaAs/AlGaAs).

Волновая функция примеси является собственной функцией оператора проекции момента импульса на ось  $z$  и в цилиндрических координатах  $(\rho, \varphi)$  имеет вид

$$\Psi(\rho, \varphi) = \exp(-im\varphi)\Phi(\rho), \quad (\text{A1.1})$$

где  $m$  – целое (собственное значение оператора  $J$  в единицах  $\hbar$ ).

Найдем коэффициент разложения по плоским волнам  $C(k, \alpha)$ , где  $\alpha$  – угол, характеризующий направление волнового вектора:

$$C(k, \alpha, z) = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \Phi(\rho, z) \rho \exp(-ik\rho \cos(\varphi - \alpha)) d\rho d\varphi \quad (\text{A1.2})$$

$$C(k, \alpha, z) = \int_0^\infty \Phi(\rho, z) \rho d\rho \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \exp(-ik\rho \cos(\varphi - \alpha)) d\varphi. \quad (\text{A1.3})$$

После замены переменных  $\chi = \varphi - \alpha$  выражение (A1.3) принимает вид:

$$C(k, \alpha, z) = e^{im\alpha} \int_0^\infty \Phi(\rho, z) \rho d\rho \int_{-\alpha}^{2\pi-\alpha} e^{im\chi} \exp(-ik\rho \cos(\chi)) d\chi. \quad (\text{A1.4})$$

Рассмотрим интеграл  $\int_{-\alpha}^{2\pi-\alpha} e^{im\chi} \exp(-ik\rho \cos(\chi)) d\chi$ . Подынтегральные функции имеют пе-

риод кратный  $2\pi$ , поэтому интеграл по периоду  $2\pi$ , не будет зависеть от начальной точки интегрирования, следовательно, выражение (A1.4) можно записать в виде:

$$C(k, \alpha, z) = e^{im\alpha} \int_0^\infty \Phi(\rho, z) \rho d\rho \int_0^{2\pi} e^{im\chi} \exp(-ik\rho \cos(\chi)) d\chi. \quad (\text{A1.5})$$

Внутренний интеграл от угла  $\alpha$  не зависит, таким образом, коэффициенты разложения волновой функции по функциям  $\exp(-i\mathbf{k}\rho)$  при наличии аксиальной симметрии будут иметь вид

$$C(k, \alpha, z) = e^{im\alpha} \tilde{C}(k, z), \quad (\text{A1.6})$$

где  $m$  – собственное значение оператора проекции момента импульса. Отметим, что внутренний интеграл в выражении (A1.5) пропорционален функции Бесселя  $m$ -ного порядка  $J_m(k\rho)$ , т.е. коэффициент  $\tilde{C}(k)$  можно считать коэффициентом разложения волновой функции по функциям Бесселя.

2) Случай акцепторов в Ge или в GaAs.

При наличии аксиальной симметрии акцепторная вектор-функция имеет вид

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = \exp(i(m - \frac{3}{2})\varphi) \begin{pmatrix} \Phi_1(\rho, z)e^{\frac{3}{2}i\varphi} \\ \Phi_2(\rho, z)e^{\frac{1}{2}i\varphi} \\ \Phi_3(\rho, z)e^{-\frac{1}{2}i\varphi} \\ \Phi_4(\rho, z)e^{-\frac{3}{2}i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (\text{A1.7})$$

Разложим такую функцию по волновым функциям свободных дырок, которая при нали-

чии аксиальной симметрии имеет вид  $\begin{pmatrix} g_1(k, z)e^{-\frac{3}{2}i\alpha} \\ g_2(k, z)e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \\ g_3(k, z)e^{\frac{1}{2}i\alpha} \\ g_4(k, z)e^{\frac{3}{2}i\alpha} \end{pmatrix} \exp(-i\mathbf{k}\rho)$ , где  $k, \alpha$  - цилиндрические

координаты волнового вектора. Коэффициенты разложения имеют вид

$$\begin{aligned} C(\mathbf{k}, z) = & g_1(k, z)e^{-\frac{3}{2}i\alpha} \left( \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) \Phi_1(\rho, z) e^{ik\rho \cos(\varphi-\alpha)} \right) + \\ & + g_2(k, z)e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \left( \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) \Phi_2(\rho, z) e^{i\varphi} e^{ik\rho \cos(\varphi-\alpha)} \right) + \\ & + g_3(k, z)e^{\frac{1}{2}i\alpha} \left( \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) \Phi_3(\rho, z) e^{2i\varphi} e^{ik\rho \cos(\varphi-\alpha)} \right) + \\ & + g_4(k, z)e^{\frac{3}{2}i\alpha} \left( \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\varphi \exp(im\varphi) \Phi_4(\rho, z) e^{3i\varphi} e^{ik\rho \cos(\varphi-\alpha)} \right) \end{aligned} \quad (\text{A1.8})$$

Сравнивая выражение (A1.8) с выражением (A1.3), видим, что все четыре слагаемых в выражении (A1.8) будут иметь одинаковую зависимость от  $\alpha$ , и коэффициент  $C(\mathbf{k}, z)$  будет иметь вид

$$C(\mathbf{k}, z) = C(k, z) \exp\left[i\alpha\left(m - \frac{3}{2}\right)\right], \quad (\text{A1.9})$$

что соответствует формуле (1.21).

**Приложение 2. О численном решении интегрального уравнения (1.22) для нахождения акцепторного спектра**

Волновые функции дырок в отсутствии примесного иона имеют вид:

$$\mathbf{g}(k, n, s, \mathbf{r}) = \mathbf{g}(k, n, s, z) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{A2.1})$$

где ось  $z$  выбрана вдоль роста структуры,  $\mathbf{r}$  - радиус- вектор в плоскости квантовой ямы.

Тогда уравнение (1.22) с ядром (1.23) запишется в виде:

$$\begin{aligned} & [\varepsilon(k, n) - E] C_J(k, n, s) - \frac{e^2}{2\pi\chi} \sum_{n', s'} \int_0^\infty dk' \sqrt{kk'} C_J(k', n', s') \int_0^{2\pi} d\beta \exp\left[i\beta\left(J - \frac{3}{2}\right)\right] \times \\ & \times \int_{-\infty}^\infty dz F(n, z, k) F^*(n', z, k') \frac{\exp(-K|z - z_i|)}{K} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A2.2})$$

где:

$$K = \sqrt{(k - k')^2 + 2kk'(1 - \cos \beta)} \quad (\text{A2.3})$$

Как уже отмечалось, интеграл по  $k'$  заменяется конечной суммой:

$$\begin{aligned} & [\varepsilon(k_m, n) - E] C_J(k_m, n, s) - \frac{e^2}{2\pi\chi} \sum_{n', s'} \sum_i^N \Delta k \sqrt{k_m k_i} C_J(k_i, n', s') \int_0^{2\pi} d\beta \exp\left[i\beta\left(J - \frac{3}{2}\right)\right] \times \\ & \times \int_{-\infty}^\infty dz F(n, z, k_m) F^*(n', z, k_i) \frac{\exp(-K|z - z_i|)}{K} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A2.4})$$

При этом был выбран эквидистантный ряд значений  $k$ :  $k_i = \Delta k(i-1)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , где  $N$

$= \frac{k_{fin}}{\Delta k}$ ,  $k_{fin}$  - значение  $k$  для данной подзоны, при котором обрывается суммирование, т.е.

“число точек на подзоне”,  $s = 1, 2$ . Таким образом, задача сводится к решению системы линейных однородных уравнений для набора коэффициентов разложения  $C_J(k_i, n', s')$

$$\sum_{j=1}^{2Nn_0} A_{l,j} C_j = E C_l, \quad (\text{A2.5})$$

где  $n_0$  - число подзон размерного квантования в квантовой яме гетероструктуры:

$$C_j = C_J(k_i, n', s'), \quad j = i + (s'-1)N + 2N(n'-1), \quad l = m + (s-1)N + 2N(n-1),$$

$$\begin{aligned} & A_{j,l} = \varepsilon(k_m, n) \delta_{j,l} - \\ & \frac{e^2}{2\pi\chi} \Delta k \sqrt{k_m k_i} \int_0^{2\pi} d\beta \exp\left[i\beta\left(J - \frac{3}{2}\right)\right] \int_{-\infty}^\infty dz F(n, z, k_m) F^*(n', z, k_i) \frac{\exp(-K|z - z_i|)}{K} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A2.6})$$

При этом должно выполняться условие нормировки:

$$\sum_{n', s'} \sum_i^N |C_J(k_i, n', s')|^2 = 1. \quad (\text{A2.7})$$

Уравнение (A2.5) решалось с помощью диагонализации матрицы (A2.6), при этом получившийся набор собственных значений матрицы представляет собой спектр энергий.

Из выражений (A2.3), (A2.4) видно, что подынтегральное выражение в (A2.4) имеет сингулярность при  $k_i = k_m$ . Для того, чтобы избежать сингулярности, был применен следующий прием: Кулоновский потенциал был заменен на экранированный потенциал, т.е.

$\frac{e^2}{\chi r}$  заменили на  $\frac{e^2}{\chi r} \exp(-\frac{r}{\lambda})$ , при этом выражение (A2.3) принимает вид:

$$K = \sqrt{(k - k')^2 + 2kk'(1 - \cos \beta) + (1/\lambda)^2} \quad (A2.8)$$

Затем длина экранирования  $\lambda$  выбиралась достаточно большой, чтобы не оказывать влияния на акцепторный спектр. Для расчета акцепторного спектра в гетероструктурах Ge/GeSi длина экранирования выбиралась равной 300000 Å. Численный расчет показывает, что при дальнейшем увеличении  $\lambda$  энергии основного и нижних возбужденных состояний изменяются меньше чем на 0.3 %.

Точность расчета повышается также, если брать большие значения  $N$ , но при этом возрастает размерность диагонализуемой матрицы и, соответственно, время машинного счета. Было определено оптимальное значение  $N$  так, чтобы при увеличении числа точек по  $k$  вдвое энергии акцепторных уровней менялись менее чем на 1 %. Для акцепторов в Ge/GeSi значение  $N$  бралось равным 100 – 150.

Развитая численная процедура была протестирована на точно решаемой задаче: описанным выше методом был рассчитан спектр двумерного атома водорода. Для такой задачи выражение для элементов матрицы (A2.6) принимает вид:

$$A_{j,l} = \varepsilon(k_m) \delta_{j,l} - \frac{e^2}{2\pi\chi} \Delta k \sqrt{k_m k_i} \int_0^{2\pi} d\beta \exp[i\beta J] \frac{1}{K} = 0. \quad (A2.8)$$

Отметим, что  $J = 0$  для основного состояния. Численный расчет показал, что при диагонализации матрицы 100×100 численно рассчитанная энергия основного состояния двумерного атома водорода отличается от истинного значения примерно на 1.2 %, а энергии нижних возбужденных состояний примерно на 0.3-0.5 %.

## Литература

1. Far-infrared spectroscopy of minibands and confined donors in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As superlattices/ M.Helm, F.M.Peeters, F.DeRosa, E.Colas, J.P.Harbison and L.T.Florez. // Phys. Rev.B. - 1991. - Vol. 43; № 17. - pp.13983-13991.
2. Greene Ronald L., Bajaj K.K. Binding energy of the  $2p_0$  – like level of a hydrogenic donor in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum – well structures // Phys. Rev.B. - 1985. - Vol. 31; № 6. - pp.4006-4008.
3. Ronald L. Greene and Pat Lane. Far-infrared absorption by shallow donors in multiple – well GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterostructures// Phys. Rev.B. – 1986.- Vol. 34; № 12. – pp.8639–8643.
4. Far-infrared spectroscopy of subbands, minibands and donors in GaAs/AlGaAs superlattices/ M.Helm, F.M.Peeters, F.DeRosa, E.Colas, J.P.Harbison and L.T.Florez. // Surface Science, 1992. - Vol. 263; №1-3. - pp.518-526.
5. Yip Y.T. and Kok W.C. Donor energies in a quantum well: A perturbation approach // Phys.Rev.B. - 1999. - Vol.59; № 24. – pp.15825–15835.
6. Pasquarello A., Andreani L.C., Buczko R. Binding energies of excited shallow acceptor states in GaAs-AlGaAs quantum wells // Phys.Rev.B. – 1989. - Vol.40; № 8. - pp.5602-5612.
7. Fraizzoli S., Pasquarello A. Binding energies of ground and excited shallow acceptors in GaAs-AlGaAs quantum wells // Phys.Rev.B. – 1990. - Vol. 42; № 8. - pp.5349-5352.
8. Reeder A.A., Mercy J.-M., McCombe B.D. Effects of confinement on shallow donors and acceptors in GaAs/AlGaAs quantum wells // IEEE J.Quantum Electron. - 1988. - Vol.24. pp.1690-1698.
9. Loehr J.P. and Singh J. Effect of biaxial strain on acceptor-level energies in InGaAs/AlGaAs (on GaAs) quantum wells // Phys.Rev.B. - 1990. - Vol.41; № 8. - pp.3695-3701.
10. Дальнее ИК излучение горячих дырок из одноосно сжатого германия / И.В.Алтухов, М.С.Каган, К.А.Королев, В.П.Синис, Ф.А.Смирнов // ЖЭТФ. – 1992. – Том 101; вып.2. – С.756-763.
11. Дальнее ИК излучение горячих дырок германия при взаимно перпендикулярных направлениях давления и электрического поля/ В.М.Бондар, Л.Е.Воробьев, А.Т.Далакян, В.Н.Тулупенко, Д.А.Фирсов // Письма ЖЭТФ – 1999.- Том 70; вып.4. - С.257-261.
12. Far- infrared stimulated emission in p-Ge under high uniaxial pressure/ I.V.Altukhov, E.G.Chirkova, M.S.Kagan, K.A.Korolev, V.P.Sinis, I.N.Yassievich // phys. stat. sol. (b) – 1996. - Vol. 198. - pp.35-40.

13. Резонансные акцепторные состояния и терагерцовая стимулированная эмиссия в одноосно сжатом p-Ge/ И.В.Алтухов, М.С.Каган, К.А.Королев, М.А.Однблюдов, В.П.Синис, Е.Г.Чиркова, И.Н.Яссиевич // ЖЭТФ. – 1999. – Том 115; вып.1. - С.89-100.
14. Резонансные акцепторные состояния в одноосно-деформированных полупроводниках/ М.А.Однблюдов, А.А.Пахомов, В.М.Чистяков, И.Н.Яссиевич // ФТП. – 1997. – Том 31; вып.10. - С.1180-1186.
15. Однблюдов М.А., Прокофьев А.А., Яссиевич И.Н. Резонансные акцепторные состояния в одноосно деформированных полупроводниках// ЖЭТФ – 2002. – Том 121; вып.3. - С.692-702.
16. Дальнее инфракрасное излучение квантовых ям GeSi/Si/ И.В.Алтухов, М.С.Каган, К.А.Королев, В.П.Синис, Ш.Дж.Томас, К.Л.Ванг // Известия АН, серия физическая. - 2000. – Том 64; № 2. - С. 242-244.
17. Towards Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> quantum-well resonant-state terahertz laser/ I.V.Altukhov, E.G.Chirkova, V.P.Sinis, M.S.Kagan, Yu.P.Gousev, S.G.Thomas, K.L.Wang, M.A.Odnoblyudov and I.N.Yassievich. // Appl.Phys.Lett. – 2001. - Vol.79; №24. - pp.3909-3911.
18. Terahertz emission of SiGe/Si quantum wells/ M.S.Kagan, I.V.Altukhov, V.P.Sinis, S.G.Thomas, K.L.Wang, K.L.Chao, I.N.Yassievich // Thin Solid Films – 2000. - Vol.380; №1-2. - pp.237-239.
19. Kasper E.. Growth and properties of Si/SiGe superlattices // Surf. Sci. – 1986. -Vol.174; №1-3. - pp.630-639.
20. Masselink T., Chang Y.-C., Morkos H. Acceptor spectra of Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As-GaAs quantum wells in external fields: electric, magnetic, and uniaxial stress // Phys. Rev.B., - 1985. - Vol. 32; №8. - pp. 5190–5201.
21. Einevoll T., Chang Y.-C. Effective bond-orbital model for shallow acceptors in GaAs-AlGaAs quantum wells and superlattices // Phys.Rev.B. 1990. - Vol.41; №3. - pp.1447-1460.
22. Far-infrared study of confinement effects on acceptors in GaAs/AlGaAs quantum wells / A.A.Reeder, B.D.McCombe, F.A.Chambers, G.P.Devane. // Phys.Rev.B. 1988. - Vol.38; №6. - pp.4318-4321.
23. Kasper E. and Schaffler F. Group IV Compounds// Semiconductors and Semimetals, Academic Press, Boston, ed. By P.Pearsell. - 1991.
24. Effect of coherent strain on hydrogenic acceptor levels in In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well structures / J.P.Loehr, Y.C.Chen, D.Biswas, P.Bhattacharya, J.Singh// Appl. Phys. Lett. – 1990. – Vol. 57; № 2. – pp.180-182.
25. Luttinger J.M. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: general theory//

- Phys.Rev. – 1955. - Vol.102; №4. - pp.1030-1041.
- 26.Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. – М.: Наука, 1972. – С.293.
- 27.Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. - М.: Наука, 1987. – С.159.
- 28.Мелкие акцепторы в напряженных многослойных гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами/ В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, А.Л.Коротков, З.Ф.Красильник, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская, В.В.Никоноров, Л.В.Парамонов. // Письма ЖЭТФ. - 1997. – Том 65. - С.194-198.
- 29.Far IR impurity photoconductivity in strained MQW Ge/GeSi heterostructures/ V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, A.Korotkov, Z.F.Krasil'nik, O.A.Kuznetsov, M.D.Moldavskaya, V.V.Nikonorov, L.V.Paramonov // Inst. Phys. Conf. Ser. №155, IOP Publishing, Bristol. - 1997. - P.133-136
- 30.Лифшиц Т.М. Фототермоионизационная спектроскопия примесей в полупроводниках // ПТЭ. – 1993. - №1. - С.10-64.
- 31.Фототермоионизационная спектроскопия примесей в германии и кремнии/ Б.А.Андреев, Т.М.Лифшиц // Высокочистые вещества. - 1990. - №5. - С.7-20.
- 32.Берман Л.В., Коган Ш.М. Применение фотоэлектрической спектроскопии примесей для оценки качества полупроводниковых материалов// ФТП. - 1987. – Том 21. - С.1537-1553.
- 33.Cyclotron resonance investigation of multi-quantum-well heterostructures Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> / V.Ya.Aleshkin, N.A.Bekin, I.V.Erofeeva, V.I.Gavrilenko, Z.F.Krasil'nik, O.A.Kuznetsov, M.D.Moldavskaya, V.V.Nikonorov, L.V.Paramonov and V.M.Tsvetkov // Abst. Int.. Symp. “Nanostructures: physics and technology”, (St.Petersburg, 1995), Ioffe Institute, St.Petersburg 1995. - pp.271-273
- 34.Осутин А.В. Лазерная спектроскопия мелких доноров в арсениде галлия: Дисс...канд. физ.-мат. наук./ Физико-технический институт им А.Ф. Иоффе АН СССР, Ленинград, 1988, - С.10.
- 35.Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М.. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. - М.: Наука, 1966. – С.162.
- 36.Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts// Phys.Rev. – 1961. - Vol.124; №6. - pp.1866-1878.
- 37.Nonlinear far-infrared magnetoabsorbtion and optically detected magnetoimpurity effect in n-GaAs/ C.R.Pidgeon, A.Vass, G.R.Allan and W.Prettl // Phys. Rev. Lett. – 1983. - Vol. 50; №17. - pp.1309-1312.

38. Identification and ionization energies of shallow donor metastable states in GaAs:Si/ A.V.Klarenbosh, T.O.Klassen, W.Th.Wenckebach and C.T.Foxon. // J.Appl.Phys. – 1990. - Vol.67; №10. - pp.6323-6328.
39. Магнитоспектроскопия резонансных примесных состояний в полупроводниках/ В.Г.Голубев, В.И.Иванов-Омский, А.В.Осутин, Р.П.Сейсян, Ал.Л.Эфос, Т.В.Язева // ФТП. – 1988. – Том 22; вып.8. - С.1416-1421.
40. Magnetic field dependence of photothermal conductivity spectra in the far infrared of the boron acceptor in germanium/ H.W.H.M.Jongbloets, M.J.H. van de Steeg, J.H.M.Stoelinga and P.Wyder // J. Phys. C. - 1980. - Vol.13. - pp.4769-4777.
41. Энергетический спектр и квазисвязанные кулоновские состояния легких дырок в германии в магнитном поле/ В.Ф.Гантмахер, Б.Л.Гельмонт, В.Н. Зверев, Ал.Л.Эфос. // ЖЭТФ. - 1983.- Том 84; вып.3. - С.1129-1139.
42. Гантмахер В.Ф., Зверев В.Н. Резонансная рекомбинация в магнитном поле фотовозбужденных легких дырок в германии.// ЖЭТФ.- 1980. - Том 79; вып.6. - С.2291-2301.
43. Дипольные переходы электронов между локализованными и резонансными состояниями мелких доноров в квантовых ямах/ В.Я.Алешкин, Л.В.Красильникова// Материалы совещания “Нанофотоника” Н.Новгород, ИФМ РАН, 2003, - Том 2. - С.347-350.
44. Одноблудов М.А., Прокофьев А.А., Ясиевич И.Н. Метод конфигурационного взаимодействия в задачах о резонансных состояниях в полупроводниках и полупроводниковых наноструктурах.// Известия АН, Серия физическая. - 2002.– Том 66; №2. - С.235-238.
45. Configuration interaction applied to resonant states in semiconductors and semiconductor nanostructures/ A.Blom, A.A.Prokofiev, M.A.Odnobludov, K.A.Chao and I.N.Yassievich.// Nanotechnology - 2001. - Vol.12; №4. - pp.457-461.
46. Configuration interaction applied to resonant states in semiconductors and semiconductor nanostructures/ A.Blom, A.A.Prokofiev, M.A.Odnobludov, K.A.Chao and I.N.Yassievich.// Physica B.- 2001. - Vol. 308-310. - pp.1129-1132
47. Impurity induced resonant states in modulation doped nanostructures/ A.Blom, M.A.Odnobludov, K.A.Chao and I.N.Yassievich // Proc. 10<sup>th</sup> Int. Symp. “Nanostructures: Physics and Technology”. St.Petersburg, 2002. - pp.453-456.
48. Holm R.T., Gibson J.W., Palik E.D. Infrared reflectance studies of bulk and epitaxial film n-type GaAs// J. Appl. Phys. - 1977. - Vol.48; №1. - pp.212-223.
49. Goni A.R., Syassen K., Gardona M. Effect of pressure on the refractive index of Ge and GaAs// Phys. Rev. B – 1990. - V.41; №14. - pp.10104 – 10110.

50. Rao K.V., Smakola A. Dielectric anomalies in silicon single crystals// *J. Appl. Phys.* – 1966. - Vol.37. - pp. 2840-2842.
51. Schechter D.J. Theory of shallow acceptor states in Si and Ge// *J. Phys. Chem. Solids* – 1962. - Vol.23. - pp.237-247.
52. Jones R.L., Fisher P. Excitation spectra of group III impurities in germanium// *J. Phys. Chem. Solids* - 1965. - Vol.26, № 7. - pp.1125-1131.
53. Absorption spectra of impurities in silicon – I. Group - III acceptors/ E.Burstein, G.Picus, B.Henvis, R.Wallis // *J. Phys. Chem. Solids* - 1956. - Vol. 1; № 1/2. - pp.65-74.
54. Hensel J.C., Suzuki K. Quantum resonances in the valence bands of germanium. II. Cyclotron resonances in uniaxially stressed crystals// *Phys. Rev. B* – 1974. – Vol.9; №10. – pp.4219-4257.
55. Бобровников Ю.А., Казакова В.М., Фистуль В.И. Квантовый гармонический резонанс в кремнии// *ФТП*. - 1988. – Том 22; вып.2. - С.301-306.
56. Baldereshi A. and Lipari N.O. Spherical Model of Shallow Acceptor States in Semiconductors// *Phys. Rev. B* – 1973 - Vol.8; №6. - pp.2697-2709.
57. Меркулов И.А., Родина А.В. Волновые функции и энергия связи дырки в основном состоянии акцептора в алмазоподобных полупроводниках// *ФТП*. - 1994. - Том 28; вып.2. - С.321- 331.
58. Dargys A., Kundrotas J. Handbook on physical properties of Ge, Si, GaAs and InP // Vilnius, Science and Encyclopedia Publishers. - 1994. – p.32.
59. Полякова А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов// М., Энергия, 1979. – 167с.
60. Broeckx J. and Vennik J.. Interpretation of acceptor excitation spectra in uniaxially stressed germanium// *Phys. Rev. B*, - 1987. - Vol.35; №12. - pp.6165-6168.
61. Onton A., Fisher P., Ramdas A.K. Spectroscopic investigation of group-III acceptor states in silicon.// *Phys. Rev.* – 1967. -Vol.163; № 3. - pp. 686-703.
62. Ramdas A.K., Rodriguez S. Spectroscopy of the solid-state analogues of hydrogen atom: donors and acceptor in semiconductors// *Rep. Prog. Phys.* – 1981. - Vol.44; № 12. - pp.1297-1387.
63. Одноблюдов М.А., Чистяков В.М. Расчет энергетических уровней мелкого акцептора в одноосно деформированном германии// *ФТП*. – 1998. – Том.32; вып.7. – С.799-802.
64. Прокофьев А.А.. Резонансные акцепторные состояния в напряженных полупроводниках полупроводниковых структурах: Дисс... канд. физ.-мат. наук./ Физико-технический институт им А.Ф. Иоффе РАН, С.Петербург, 2003. - С.42-43.

65. R.L. Jones and P. Fisher. Excitation spectra of group III impurities in Germanium // J. Phys. Chem. Solids. - 1965. - Vol. 26. - pp.1125-1131.
66. Haller E.E., Hansen W. High resolution Fourier transform spectroscopy of shallow acceptors in ultra-pure germanium // Solid State Communications. - 1974. - Vol.15; №4. - pp.687-692.
67. Липари Н.О., Бальдерeschi А., Альтарелли М. Последние достижения теории экситонов и примесей в полупроводниках/ Известия АН СССР, серия физическая. - 1978. - Том 42; №6. - С.1179-1188.
68. Энергетический спектр мелких акцепторов в сильно одноосно деформированном германии./ Е.И.Воеводин, Е.М.Гершензон, Г.Н.Гольцман, Н.Г.Птицина.// ФТП - 1989, -Том 23, вып. 8 - С.1356-1361.
69. Вольт-амперные характеристики структур на основе Si:B с блокированной проводимостью по примесной зоне в режиме ограничения фотоотклика прыжковым транспортом/ Б.А.Аранзон., Д.Ю.Ковалев, А.М.Козлов, Ж.Леотен, В.В.Рыльков// ФТП. - 1998. – Том 32; вып.2. - С.192-199.
70. Dan M Watson., James E.Huffman. Germanium blocked-impurity-band detectors. // Appl. Phys. Lett. - 1988. - Vol.52; № 19. - pp.1602-1604.
71. Kohama Y., Fukida Y., Seki M. Determination of the critical layer thickness of SiGe/Si heterostructures by direct observation of misfit dislocations // Appl.Phys.Lett. - 1988, Vol.52. pp.380-382.
72. Strained relaxation phenomena in  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  strained structures/ R.Hill., J.C.Bean, D.J.Eaglesham et al. // Thin Solid Films - 1989. - Vol.183. - pp.117-132.
73. Zhao Q.X. and Willander M. Theoretical investigation of shallow acceptors confined in  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  quantum well structures.// Appl. Phys. Lett., - 2001. - Vol.79, № 6. - pp.713-715.
74. Van de Walle C.G., Martin R.M. Theoretical calculation of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system // Phys.Rev B. - 1986. -Vol.34; №8. - pp.5621-5634.
75. Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium // Ed. by E.Kasper, IEE, Inspec. - 1994. – p.227.
76. Lipary N.O., Baldereschi A., Thewalt M.L.W. Central cell effects on acceptor spectra in Si and Ge // Solid State Communications. – 1980. - Vol.33. - p.277–279.

## Список работ автора по теме диссертации

- A1. Shallow acceptors in Ge/GeSi multi-quantum well heterostructures / V.Ya.Aleshkin, B.A. Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov, M.D.Moldavskaya, A.V.Novikov// Physica E – 2000. - Vol. 7; №3-4. - pp.608-611.
- A2. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, Б.А.Андреев, А.В.Антонов, В.И.Гавриленко, Д.М.Гапонова, И.В.Ерофеева, Б.Н.Звонков, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская, Д.Г.Ревин// Материалы совещания «Нанофотоника». - Н.Новгород, ИФМ РАН. – 1999. - С. 274-277.
- A3. Localized and resonant states of shallow acceptors in strained Ge/GeSi MQW heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, B.A.Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov// Physica E – 2002. - Vol.13; №2-4, - p.317-320.
- A4. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, Б.А.Андреев, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов. // ФТП. - 2000. – Том 34; вып.5. - С.582-587.
- A5. Resonant acceptors states in Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> MQW heterostructures / V.Ya.Aleshkin, B.A. Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov // Nanotechnology. – 2000. - Vol.11; №4. - pp.348-350.
- A6. Резонансные состояния мелких акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами / В.Я.Алешкин, Б.А.Андреев, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева., Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов // Известия академии наук, серия физическая. – 2001. – Том 65; №2 - С.249-251.
- A7. Localized and resonant states of shallow acceptors in strained Ge/GeSi MQW heterostructures / V.Ya.Aleshkin, B.A.Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov // Abst. of the 10th Int. Conf. on Modulated Semiconductor Structures, Linz, Austria. - 2001 - Thp58.
- A8. Shallow acceptors in Ge/GeSi multi-quantum well heterostructures / V.Ya.Aleshkin, B.A. Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov, M.D.Moldavskaya, A.V.Novikov. // Digest of the 9th Int. Conf. on Modulated Semiconductor Structures, Fukuoka, Japan – 1999. - p.289
- A9. Резонансные состояния акцепторов в гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, Б.А.Андреев, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов// Материалы совещания «Нанофотоника». - Н.Новгород, ИФМ РАН. – 2000.- С.114-117

- A10. Resonant acceptors states in Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> MQW heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, B.A.Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov // Proc. 8<sup>th</sup> Int. Symp. "Nanostructures: physics and technology", St.Petersburg. – 2000. - pp.464-467.
- A11. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, В.И.Гавриленко Д.В.Козлов// Тезисы Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и нанoeлектронике. С.Петербург. - 1999. - с. 67.
- A12. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi / В.Я.Алешкин, Б.А.Андреев, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская// Тезисы 4-ой Всероссийской конференции по физике полупроводников. Новосибирск. – 1999. - с. 85.
- A13. Localized and resonant states of shallow acceptors in strained Ge/GeSi MQW heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, B.A.Andreev, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov // Proc. 25th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, Japan, 2000. Springer Proc. in Physics. - vol.87; Part II. - pp.1385-1386.
- A14. Наблюдение резонансных состояний акцепторов в InGaAs/GaAs гетероструктурах с δ-легированными квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, Д.М.Гапонова, В.И.Гавриленко, Р.Х.Жукавин, Д.В.Козлов, В.Н.Шагин, Б.Н.Звонков, Е.А.Ускова// Материалы совещания "Нанофотоника", Н.Новгород, ИФМ РАН. - 2002. - С.232-235.
- A15. V.Ya.Aleshkin, D.M.Gaponova, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov, V.N.Shastin, R.Kh.Zhukavin, B.N.Zvonkov, E.A.Uskova, J.N.Hovenier, A.F.G. van der Meer. Resonant states of carbon acceptor in p-InGaAs/GaAs δ-doped quantum well heterostructure // Proc. 10<sup>th</sup> Int. Symp. "Nanostructures: physics and technology", St.Petersburg. - 2002. - pp.221-224.
- A16. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах Ge/GeSi. // Физика и техника полупроводников/ В.Я.Алешкин, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская// ФТП. - 1998. - Том.32; вып. 10 - С.1240-1245.
- A17. Far infrared spectroscopy of shallow acceptors in strained Ge/GeSi quantum well heterostructures. / V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, A.L.Korotkov, O.A.Kuznetsov and M.D.Moldavskaya // phys. stat. sol. (b). – 1998. - Vol.210; №2 - pp.649-653.
- A18. Примесная фотопроводимость в напряженных гетероструктурах Ge/Ge<sub>1-x</sub>Si<sub>x</sub> с квантовыми ямами / В.Я.Алешкин, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, З.Ф. Красильник, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская, В.В.Никонов// Тез. докл. 3-ей Всеросс. конф. по физике полупроводников. – Москва. -1997. - с. 232.

- A19. Мелкие акцепторы в напряженных гетероструктурах  $\text{Ge}/\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$  с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, В.И.Гавриленко, И.В.Ерофеева, Д.В.Козлов, О.А.Кузнецов, М.Д.Молдавская// Материалы всероссийского совещания «Наноструктуры на основе кремния и германия». – Н.Новгород, ИФМ РАН. – 1998. - С.50-55.
- A20. Far infrared spectroscopy of shallow acceptors in strained  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  quantum well heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, A.L.Korotkov, O.A.Kuznetsov and M.D.Moldavskaya // 8<sup>th</sup> Int. Conf. on Shallow-Level Centers in Semiconductors, Programme and Abstracts, Montpellier, France. - 1998.- p.57.
- A21. Shallow acceptors in strained  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  heterostructures with wide quantum wells/ V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov and M.D.Moldavskaya // Proc. 6<sup>th</sup> Int. Symp. "Nanostructures: physics and technology", St.Petersburg, - 1998. - pp.473-476.
- A22. Shallow acceptors in strained  $\text{Ge}/\text{GeSi}$  quantum well heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, I.V.Erofeeva, D.V.Kozlov, O.A.Kuznetsov, M.D.Moldavskaya// Abstr. 24th Int. Conf. Phys. Semicond., Jerusalem, Israel. – 1998. - Vol.1 - Tu-P156.
- A23. Алешкин В.Я., Гавриленко В.И., Козлов Д.В. Резонансные состояния мелких акцепторов в одноосно сжатом германии// ЖЭТФ, - 2001. - Том 120; №6 - С.1495-1502.
- A24. Резонансные состояния мелких акцепторов в одноосно сжатом германии/ В.Я. Алешкин, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов.// Материалы совещания "Нанофотоника", Н.Новгород, ИФМ РАН. - 2001 - С.212-216.
- A25. The resonant states of shallow acceptors in uniaxially compressed  $\text{Ge}/$  V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov // The 26<sup>th</sup> Int. Conf. on Infrared and Millimeter Waves. Toulouse, France. – 2001. - p.66.
- A26. Резонансные состояния мелких акцепторов в одноосно сжатом германии/ В.Я. Алешкин, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов // Тез. докл. 5ой Всероссийской конференции по физике полупроводников, Нижний Новгород. – 2001 - с.367.
- A27. On the impurity photoconductivity of uniaxially stressed p- $\text{Ge}/$  V.Ya.Aleshkin, A.V.Gavrilenko, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov, A.T.Dalakjan, V.N.Tulupenko// phys. stat. sol. (c). – 2003- Vol.0; №2. - pp.680-682.
- A28. Примесная фотопроводимость одноосно деформированного p- $\text{Ge}$  обусловленная переходами в отщепленную зону/ В.Я.Алешкин, А.В.Гавриленко, В.И.Гавриленко, Д.В.Козлов, А.Т.Далакян, В.Н.Тулупенко// Материалы совещания "Нанофотоника", Н.Новгород, ИФМ РАН. – 2002. - С.70-73.
- A29. On the impurity photoconductivity of uniaxially stressed p- $\text{Ge}/$  V.Ya.Aleshkin, A.V.Gavrilenko, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov, A.T.Dalakjan, V.N.Tulupenko // 10<sup>th</sup> Int.

- Conf. on Shallow-Level Centers in Semiconductors, Program & Abstracts. Warsaw, Poland. – 2002. - p.63.
- A30. Фотодетектор с заблокированной проводимостью по примесной зоне/ В.Я. Алешкин, В.И. Гавриленко, Д.В. Козлов, Ж. Леотен// Материалы совещания "Нанофотоника", Н.Новгород, ИФМ РАН. - 2001. - С. 217-219.
- A31. GeSi – based blocked impurity band detector/ V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov, J. Leotin// The 26<sup>th</sup> Int. Conf. on Infrared and Millimeter Waves. Toulouse, France. – 2001. - p.33.
- A32. Aleshkin V.Ya., Gavrilenko V.I., Kozlov D.V. Shallow acceptors in Si/SiGe quantum well heterostructures. // phys. stat. sol. (c) - 2003. - Vol.0; №2 - pp.687-689.
- A33. Мелкие акцепторы в гетероструктурах Si/SiGe с квантовыми ямами/ В.Я.Алешкин, В.И.Гавриленко, Д.В.Козлов// Материалы совещания "Нанофотоника", Н.Новгород, ИФМ РАН. - 2002. - С.165-168.
- A34. Shallow acceptors in Si/SiGe quantum well heterostructures/ V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov// 10<sup>th</sup> Int. Conf. on Shallow-Level Centers in Semiconductors, Program & Abstracts. Warsaw, Poland. – 2002. - p.39.
- A35. V.Ya.Aleshkin, V.I.Gavrilenko, D.V.Kozlov. Shallow acceptors in Si/SiGe quantum well heterostructures. // Proc. 10<sup>th</sup> Int. Symp. "Nanostructures: physics and technology", St.Petersburg. - 2002. - pp.464-467.