

# МОДИФИКАЦИЯ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ И РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ НА НЕСИММЕТРИЧНЫХ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИХ ДЕФЕКТАХ ПРИ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ СЖАТИИ

Ф. Т. Васько\*, М. В. Стриха\*\*

*Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины  
03650, Киев, Украина*

Поступила в редакцию 9 июля 2007 г.

В рамках **кp**-метода изучена модификация локализованных и резонансных состояний на несимметричных короткодействующих дефектах в полупроводниках  $A_3B_5$  под влиянием гидростатического сжатия. Расчет примесного вклада в плотность состояний проведен с использованием многозонного обобщения приближения Костера–Слетера для дефектов, несимметричных вдоль осей [001], [110] или [111]. Исследован переход между резонансным и локализованным состояниями, описан механизм появления и исчезновения пары уровней под действием сжатия. Обсуждены возможности сравнения результатов расчета с экспериментальными данными.

PACS: 71.55.-i, 71.55.Eq, 71.70.Fk

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Гидростатическое сжатие модифицирует электронные состояния на короткодействующих дефектах и является удобным методом исследования их структуры [1, 2]. Отметим, что, в отличие от других внешних воздействий (таких, как одноосная деформация, электрическое либо магнитное поле), гидростатическое сжатие не изменяет симметрии задачи. Поэтому результаты таких исследований легко интерпретировать с учетом известных параметрических зависимостей характеристик полупроводников  $A_3B_5$  от сжатия. Теоретическое рассмотрение вызванных деформацией модификаций электронных состояний на короткодействующих дефектах проводилось в рамках нескольких вычислительных методов, включая приближение сильной связи [3], использование псевдопотенциалов (как эмпирического [4], так и разложенного по плоским волнам [5]) или расчеты функционала плотности (см. ссылки в работе [6]).

В этой работе мы используем наиболее про-

стой многозонный **кp**-метод, в котором деформация учитывается как дополнительное изменение гамильтониана исходного материала [7]. Вклад центра учитывается обычно как короткодействующая ( $\delta$ -образная) скалярная энергия, добавляемая в гамильтониан [8]. Такой подход широко применяется для описания различных электронных процессов с участием состояний на короткодействующих дефектах, энергия которых близка к дну зоны проводимости [9]. Обобщение этого подхода на случай глубоких центров, взаимодействующих с несколькими зонами, проведено в работе [10], а случай центров в деформированных узкозонных полупроводниках рассмотрен в [11]. Недавно проведен [12] учет матричной структуры короткодействующего потенциала в гамильтониане, приводящий к смешиванию различных зонных состояний из-за понижения симметрии центра. Благодаря такому смешиванию возникают модификация связанных состояний и возможность появления резонансного состояния.

Хотя вопрос о матричном характере примесного вклада в **кp**-уравнения возникал уже в первых работах по короткодействующим примесям (см. [1]), до настоящего времени не выделены случаи, где такой вклад является существенным. Сейчас наибольший

\*E-mail: ftvasko@yahoo.com

\*\*E-mail: maksym\_strikha@hotmail.com

интерес представляют нитридные сплавы  $A_3B_5$ , в которых активно исследуются резонансные состояния (см. обзоры [13]). Однако даже изолированная азотная примесь в полупроводниках  $A_3B_5$  до сих пор полностью не изучена [14]. Несмотря на малое число прямых экспериментальных свидетельств наличия резонансных состояний в кристаллах  $A_3B_5$  с предельно малой концентрацией азотной примеси, исследование влияния сжатия на электронные состояния несимметричных дефектов может быть полезным как инструмент идентификации таких дефектов.

Используя восьмизонную модель Кейна, мы провели расчет изменения плотности состояний, принимая во внимание матричный характер потенциальной энергии низкосимметричного центра, приводящий к дополнительному смешиванию зонных состояний. Рассмотрены центры различной симметрии, поскольку обусловленная сжатием модификация их электронных уровней существенно различна. При этом основные особенности, возникающие ввиду смешивания различных зон из-за недиагонального вклада примесного потенциала, подобны. Во-первых, это переход между резонансным и локализованным состояниями, вызванный различными скоростями смещения экстремума зоны и уровня с гидростатическим сжатием. Во-вторых, это обусловленный сжатием механизм появления или исчезновения пары уровней.

Статья имеет следующую структуру. В разд. 2 приведены основные уравнения. В разд. 3 анализируются изменения добавки к плотности состояний, обусловленные влиянием гидростатического сжатия на несимметричные примесные центры. Приближения, использованные в рамках **кp**-метода, а также экспериментальная ситуация обсуждены в Заключение.

## 2. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Как положение локализованного на дефекте уровня, так и зависимость формы резонансного пика от энергии  $E$  определяются вкладом примесей в плотность состояний  $\rho_E$ , которая стандартным образом записывается через функцию Грина:

$$\rho_E = -\text{Im} \int d\mathbf{r} \text{Tr} \hat{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}) / \pi V.$$

Здесь  $V$  — нормирующий объем,  $\text{Tr} \dots$  — след по зонным и спиновым переменным, возникающий при рассмотрении примесных состояний в рам-

ках **кp**-приближения. Матричная функция Грина  $\hat{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  определяется обычным уравнением:

$$\left[ E + i\lambda - \hat{h} - \sum_{\alpha} \Delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\alpha}) \hat{U} \right] \hat{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{I}. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{h}$  — гамильтониан Кейна, описывающий свободное движение с учетом гидростатического сжатия [8],  $\lambda \rightarrow +0$ ,  $\Delta(\mathbf{r}) \hat{U}$  — потенциальная энергия примеси, помещенной в начало координат, причем матрица  $\hat{U}$  недиагональна для низкосимметричных дефектов, а  $\hat{I}$  — единичная матрица. Как и в работе [12],  $\Delta(\mathbf{r})$  — короткодействующая  $\delta$ -образная функция, локализованная в области порядка объема  $a^3$  элементарной ячейки, а  $\mathbf{R}_{\alpha}$  — случайная координата примеси с номером  $\alpha$ . В отсутствие примесей функция Грина свободного электрона,  $\hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ , определяется уравнением

$$(E + i\lambda - \hat{h}) \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{I}. \quad (2)$$

Используя уравнение (2), перепишем (1) в интегральном виде:

$$\hat{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \sum_{\alpha} \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\alpha}) \hat{U} \hat{G}_E(\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}'), \quad (3)$$

где в последнем члене уравнения проводится интегрирование по объему элементарной ячейки  $a^3$ .

Пренебрегая перекрытием соседних центров [11], мы используем приближение Костера–Слетера для описания связанных и резонансных состояний на отдельном дефекте. Подставляя функцию Грина  $\hat{G}_E(\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}')$ , полученную из уравнения (3), в правую часть этого же уравнения, получим решение в виде

$$\hat{G}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \sum_{\alpha} \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\alpha}) \hat{U} \left( 1 - \hat{\Lambda}_E \hat{U} \right)^{-1} \hat{g}_E(\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}'). \quad (4)$$

Здесь мы ввели матрицу  $\hat{\Lambda}_E \equiv \tilde{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ , записанную через функцию Грина свободного электрона с совпадающими аргументами,  $\tilde{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ , где сингулярность при  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  обрезана на расстояниях порядка постоянной решетки. Далее, подставляем выражение (4) в формулу для плотности состояний, причем вклад примесей,  $\Delta\rho_E$ , определяется вторым слагаемым уравнения (4). При перестановке  $\hat{g}_E$  под знаком следа используем равенство

$$\int d\mathbf{r} \hat{g}_E(\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{r}) \hat{g}_E(\mathbf{r}, \mathbf{R}_{\alpha}) = -\frac{d\tilde{g}_E(\mathbf{R}_{\alpha}, \mathbf{R}_{\alpha})}{dE}.$$

Таким образом, выражение для вклада  $\Delta\rho_E$  приводится к виду (см. аналогичные формулы в работе [15])

$$\Delta\rho_E = \frac{n_{im}}{\pi} \text{Im Tr} \left\{ \frac{d\hat{\Lambda}_E}{dE} \hat{U} (1 - \hat{\Lambda}_E \hat{U})^{-1} \right\}, \quad (5)$$

где  $n_{im}$  — концентрация примесей. В результате многозонное описание короткодействующих примесных состояний сводится к вычислению матрицы  $\hat{\Lambda}$  и к суммированию в выражении (5).

Свободная функция Грина может быть записана через решения задачи на собственные значения,

$$\sum_{l\nu} h_{l\nu} \psi_{l\nu}^{(k)} = \varepsilon_{k\nu} \psi_{l\nu}^{(k)}.$$

Здесь  $\varepsilon_{k\nu}$  и  $\psi_{l\nu}^{(k)}$  — энергетический спектр и многокомпонентная огибающая функция для состояния с импульсом  $\mathbf{p}$  в  $k$ -й зоне, где  $k = c, lh, hh, s$  ( $c, lh, hh$  и  $s$  — зоны соответственно проводимости, легких дырок, тяжелых дырок и спин-отщепления). После таких преобразований матрица  $\hat{\Lambda}_E$  приводится к виду

$$\hat{\Lambda}_E = \frac{1}{V} \sum_{k\nu} \frac{\hat{P}_{k\nu}}{E + i\lambda - \varepsilon_{k\nu}}, \quad (6)$$

где операторы проектирования на состояния  $k\nu$ , выродненные по спину, могут быть записаны как

$$(P_{k\nu})_{l\nu} = \sum_{\sigma} \psi_{l\nu}^{(k\sigma)*} \psi_{l\nu}^{(k\sigma)}. \quad (7)$$

Поскольку симметрия задачи не изменяется при гидростатическом давлении, после усреднения по углам и суммирования по спину в выражениях (6), (7) получаем, что матрица  $\hat{\Lambda}_E$  диагональна:

$$\begin{aligned} (\hat{\Lambda}_E)_{11} &= (\hat{\Lambda}_E)_{22} \equiv \lambda_{cE}, \\ (\hat{\Lambda}_E)_{33} &= \dots = (\hat{\Lambda}_E)_{66} \equiv \lambda_{vE}, \\ (\hat{\Lambda}_E)_{77} &= (\hat{\Lambda}_E)_{88} \equiv \lambda_{sE}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь компонента, связанная с зоной проводимости, задается выражением

$$\lambda_{cE} = \frac{1}{V} \sum_{k\nu} \frac{|C_{k\nu}|^2}{E + i\lambda - \varepsilon_{k\nu}}, \quad (9)$$

в то время как компоненты, связанные с валентными ( $v$ ) и спин-отщепленной ( $s$ ) зонами, записываются в виде

$$\begin{aligned} \lambda_{vE} &= \frac{1}{3V} \sum_{k\nu} \frac{|C_{k\nu}|^2 (P\nu)^2}{(E + i\lambda - \varepsilon_{k\nu})(\varepsilon_g + \varepsilon_{k\nu})^2} + \\ &+ \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}} \frac{1}{E + i\lambda - \varepsilon_{h\nu}}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\lambda_{sE} = \frac{1}{V} \sum_{k\nu} \frac{|C_{k\nu}|^2 (P\nu)^2}{(E + i\lambda - \varepsilon_{k\nu})(\varepsilon_g + \Delta + \varepsilon_{k\nu})^2}.$$

Нормирующие множители в выражениях (9), (10) вводятся соотношением

$$\begin{aligned} |C_{k\nu}|^2 &= \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{(P\nu)^2}{(\varepsilon_g + \varepsilon_{k\nu})^2} + \right. \\ &\left. + \frac{(P\nu)^2}{3(\varepsilon_g + \Delta + \varepsilon_{k\nu})^2} \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (11)$$

в котором  $\mathcal{P}$  — межзонная кейновская скорость,  $\varepsilon_g$  и  $\Delta$  — запрещенная зона и энергия спинового расщепления, изменяющиеся под действием гидростатического сжатия. Суммирование по  $k$  включает зонные состояния  $c, lh$  и  $s$ .

Для вычисления  $\Delta\rho_E$  по формуле (5) необходимо также задать матрицу  $\hat{U}$ , которая оказывается недиагональной в случае несимметричного центра. Следуя работе [12], запишем  $8 \times 8$ -матрицу  $\hat{U}$  для дефектов, несимметричных вдоль осей [001] (случай А), [110] (случай В) и [111] (случай С):

$$\hat{U} = \begin{vmatrix} \hat{u}_c & \tilde{u} \\ \tilde{u}^+ & \hat{u}_v \end{vmatrix}, \quad (12)$$

$$\tilde{u}_A = u_z \begin{vmatrix} 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} \\ i\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{-i}{\sqrt{3}} & 0 \end{vmatrix},$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_B &= \\ &= u_d \begin{vmatrix} \frac{-ie_+}{\sqrt{3}} & 0 & ie_- & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}}e_+ & 0 \\ 0 & \frac{-ie_-}{\sqrt{3}} & 0 & -ie_+ & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}}e_- \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_C &= \\ &= u_o \begin{vmatrix} \frac{-ie_+}{\sqrt{3}} & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & ie_- & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}}e_+ & \frac{i}{\sqrt{3}} \\ i\sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{-ie_-}{\sqrt{3}} & 0 & -ie_+ & \frac{-i}{\sqrt{3}} & -i\sqrt{\frac{2}{3}}e_- \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь  $\hat{u}_c$  и  $\hat{u}_v$  пропорциональны единичным матрицам размерностью соответственно  $2 \times 2$  и  $6 \times 6$ ,  $\hat{u}_c \equiv \hat{1}u_c$  и  $\hat{u}_v \equiv \hat{1}u_v$ , где  $u_c = \langle S|\delta U|S \rangle$  и  $u_v = \langle X|\delta U|X \rangle$ . Они записываются как матричные элементы микроскопического потенциала  $\delta U$  дефекта (подробнее см. работу [12]), вычисленные на базисных функциях  $|S\rangle$ ,  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  и  $|Z\rangle$ . Недиагональная часть  $\hat{U}$  выражается через матрицы  $\tilde{u}_{A,B,C}$  размерностью  $6 \times 2$ , где  $e_{\pm} = (1 \pm i)/\sqrt{2}$ . Коэффициенты в матрицах  $\tilde{u}_{A,B,C}$  введены как  $u_z \equiv \langle S|\delta U|Z \rangle \neq 0$ , где  $\langle S|\delta U|X \rangle = \langle S|\delta U|Y \rangle = 0$  (случай А),  $u_d \equiv \langle S|\delta U|X \rangle = \langle S|\delta U|Y \rangle \neq 0$ , где  $\langle S|\delta U|Z \rangle = 0$  (случай В), и  $u_o \equiv \langle S|\delta U|X \rangle = \langle S|\delta U|Y \rangle = \langle S|\delta U|Z \rangle \neq 0$  (случай С).

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Используя выражения для матриц (8), (12) и проводя матричные вычисления в формуле (5), мы по-

лучаем примесный вклад в плотность состояний через логарифмическую производную характеристической функции  $\mathcal{L}_E$  [16],

$$\Delta\rho_E = \frac{2n_{im}}{\pi} \operatorname{Im} \frac{d\mathcal{L}_E/dE}{\mathcal{L}_E}, \quad (13)$$

причем функция  $\mathcal{L}_E$  выражается через величины  $\lambda_{cE}$ ,  $\lambda_{vE}$  и  $\lambda_{sE}$  в выражениях (9) и (10). Ее можно записать как  $\mathcal{L}_E = \bar{\mathcal{L}}_E + \Delta\mathcal{L}_E$ , где мы выделили член

$$\bar{\mathcal{L}}_E = (1 - \lambda_{cE}u_c)(1 - \lambda_{vE}u_v)^2(1 - \lambda_{sE}u_s), \quad (14)$$

отвечающий вкладу симметричного центра. Вклад несимметричного центра  $\Delta\mathcal{L}_E$  для трех рассматриваемых случаев (А–С) равен

$$\Delta\mathcal{L}_E = \begin{cases} -\frac{u_z^2}{3}\lambda_{cE}(1 - \lambda_{vE}u_v)[2\lambda_{vE}(1 - \lambda_{sE}u_s) + \lambda_{sE}(1 - \lambda_{vE}u_v)], & \text{(A)} \\ u_d^2\lambda_{cE}[u_v\lambda_{vE}(4\lambda_{sE} + 2\lambda_{vE} - 3\lambda_{vE}\lambda_{sE}u_s) - 2\lambda_{vE} - \lambda_{sE}], & \text{(B)} \\ u_o^2\lambda_{cE}\left[u_v\lambda_{vE}\left(\frac{8}{3}\lambda_{sE} + \frac{4}{3}\lambda_{vE} - 2\lambda_{vE}\lambda_{sE}u_s\right) - \frac{4}{3}\lambda_{vE} - \frac{2}{3}\lambda_{sE}\right]. & \text{(C)} \end{cases} \quad (15)$$

Зависимость функций  $\bar{\mathcal{L}}_E$  и  $\Delta\mathcal{L}_E$  от энергии определяется комплексными компонентами  $\lambda_{kE}$ , которые даются выражениями (9) и (10). Действительные части,  $\operatorname{Re}\lambda_{kE}$ , расходятся при  $a \rightarrow 0$ , причем  $\operatorname{Re}\lambda_{cE} \propto \hbar/a$ , а  $\operatorname{Re}\lambda_{v,sE} \propto (\hbar/a)^3$ . Поэтому зависимость  $\operatorname{Re}\lambda_{kE}$  от энергии слаба ввиду преобладания вклада от больших  $\mathbf{p}$  и можно использовать линейное разложение  $\operatorname{Re}\lambda_{kE}$  по  $E$ . Мнимые части величин  $\lambda_{kE}$  получаются из соотношений (9), (10):

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\lambda_{cE} &= -\frac{\pi}{2} \sum_k |C_{k,p}|_{\varepsilon_{k,p}=E}^2 D_c(E), \\ \operatorname{Im}\lambda_{vE} &= -\frac{\pi}{4} D_{lh}(E) - \\ &- \frac{\pi}{6} \sum_k \frac{|C_{k,p}|^2 (Pp)^2}{(\varepsilon_{k,p} + \varepsilon_g)^2} \Big|_{\varepsilon_{k,p}=E} D_s(E), \\ \operatorname{Im}\lambda_{sE} &= \\ &= -\frac{\pi}{2} \sum_k \frac{|C_{k,p}|^2 (Pp)^2}{(\varepsilon_{k,p} + \varepsilon_g + \Delta)^2} \Big|_{\varepsilon_{k,p}=E} D_s(E). \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь  $D_k(E)$  — плотность состояний в зоне  $k$  ( $k = c, lh, s$ ). Эти выражения упрощаются для энергий, близких к экстремумам зон. Вблизи дна  $c$ -зоны имеем

$$\operatorname{Im}\lambda_{cE} \approx -\frac{\pi}{2} D_c(E), \quad \operatorname{Im}\lambda_{v,sE} \approx o\left(\frac{E}{\varepsilon_g}\right), \quad (17)$$

а около экстремума  $v$ -зоны получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\lambda_{vE} &\approx -\frac{\pi}{4} D_v(E), \\ \operatorname{Im}\lambda_{cE} &\approx o(|E + \varepsilon_g|/\varepsilon_g), \\ \operatorname{Im}\lambda_{sE} &\approx o(|E + \varepsilon_g|^2/\Delta^2), \end{aligned} \quad (18)$$

где полная плотность состояний в  $v$ -зоне равна  $D_v(E) = D_s(E) + D_{lh}(E)$ . Из выражений (17), (18) следует, что лишь экстремумы ближайших зон дают существенные вклады в выражения для  $\operatorname{Im}\lambda_{c,vE}$ , которые пропорциональны плотностям состояний вблизи этих экстремумов.

Зависимость функции  $\bar{\mathcal{L}}_E + \Delta\mathcal{L}_E$  от гидростатического сжатия  $P$  определяется как сдвигом зонных экстремумов под действием давления, так и изменением параметра  $a$ , возникающего из-за обрезания сумм в исходных уравнениях (1)–(3). Изменения величин  $\varepsilon_g$ ,  $\Delta$  и  $\hbar/a$  для всего диапазона экспериментально актуальных давлений малы, поэтому в разложениях функций  $\lambda_{kE}$  можно ограничиться лишь слагаемыми, линейными по  $E$  и по  $P$ , что для  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E$  дает полином четвертой степени по  $E$ . Коэффициенты в этом полиноме зависят от  $P$  линейно. В окрестности краев  $c$ - и  $v$ -зон малая функция  $\text{Im } \bar{\mathcal{L}}_E$  пропорциональна плотности состояний (более того,  $D_{c,v}(E) \propto \sqrt{E}$ ), и поэтому слабой зависимостью от  $P$  можно пренебречь. В дальнейшем рассмотрим случаи, когда вблизи зонного экстремума реализуется единственный корень уравнения  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E = 0$ , а также когда имеются два корня с близкими энергиями в окрестности зонного экстремума.

### 3.1. Переход между локализованным и резонансным состояниями

Уравнение (13) описывает как примесные состояния с энергией  $E_o$ , определяемой уравнением  $\text{Re } \mathcal{L}_E = 0$ , которые локализованы в запрещенной зоне,  $0 > E_o > -\varepsilon_g$ , так и резонансные состояния вблизи края зоны, когда уровень  $E_o$  оказывается вне запрещенной зоны. Рассматривая состояние с двойным (только по спине) вырождением<sup>1)</sup> и проводя линейное разложение  $\text{Re } \mathcal{L}_E$  вблизи энергии уровня  $E_o$ , который также смещается со сжатием, перепишем знаменатель формулы (13) в виде

$$\mathcal{L}_E = \frac{\partial \text{Re } \mathcal{L}_E}{\partial E} \Big|_{E_o} (E - E_P) - i \text{Im } \mathcal{L}_E. \quad (19)$$

Здесь линейный сдвиг уровня с давлением  $P$  вводится через энергию  $E_P$ :

$$E_P = E_o - \left[ \frac{\partial \text{Re } \mathcal{L}_E}{\partial \varepsilon_g} \Big|_{E_o} \delta\varepsilon_g + \frac{\partial \text{Re } \mathcal{L}_E}{\partial \Delta} \Big|_{E_o} \delta\Delta \right] \left( \frac{\partial \text{Re } \mathcal{L}_E}{\partial E} \Big|_{E_o} \right)^{-1} \equiv E_o - AP. \quad (20)$$

Коэффициент  $A$  содержит вклады от изменений ширины запрещенной зоны,  $\delta\varepsilon_g$ , и энергии спин-орби-

<sup>1)</sup> Четырехкратно вырожденное состояние может быть реализовано для симметричного центра при  $\Delta\mathcal{L}_E = 0$ . Оно возникает благодаря множителю  $(1 - \lambda_{vE} u_v)^2$  в  $\mathcal{L}_E = 0$ .

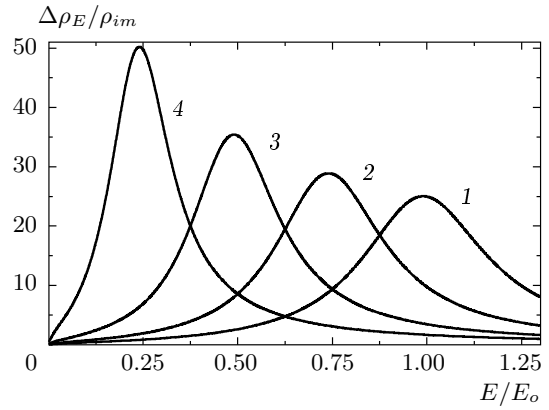


Рис. 1. Изменение формы плотности состояний  $\Delta\rho_E$  при переходе от резонансного к локализованному состоянию вблизи экстремума  $c$ -зоны под действием безразмерного гидростатического сжатия  $AP/E_o = 0$  (1), 0.25 (2), 0.50 (3), 0.75 (4). Используются безразмерные энергия  $E/E_o$ , и характерное уширение  $\Gamma_c(E_o)/E_o = 0.2$ ,  $\rho_{im} = 2n_{im}/\pi E_o$

тального расщепления,  $\delta\Delta$ , которые пропорциональны величине сжатия  $P$ . Ниже мы рассматриваем коэффициент  $A$  как феноменологический параметр, и потому вклад от изменения параметра обрезания со сжатием не включен в уравнение (20).

Подставив разложение (19) в определение (13), получаем лоренцеву форму пика плотности состояний вблизи края зоны  $n$  ( $n = c, v$ ):

$$\Delta\rho_{nE} = \frac{2n_{im}}{\pi} \frac{\Gamma_{nE}}{(E - E_P)^2 + \Gamma_{nE}^2}, \quad (21)$$

$$\Gamma_{nE} = \frac{\text{Im } \mathcal{L}_E}{(\partial \text{Re } \mathcal{L}_E / \partial E)_{E_o}} \equiv g_n D_n(E).$$

Здесь ширина уровня вблизи  $n$ -го экстремума,  $\Gamma_{nE}$ , пропорциональна плотности состояний  $D_n(E)$ , а также введен феноменологический параметр  $g_n$ , поэтому изменение  $\Delta\rho_{nE}$  определяется парой параметров, введенных в выражениях (20), (21). Отметим, что коэффициенты  $A$  и  $g_n$  зависят от параметра обрезания и их нельзя вычислить строго в рамках **кр**-приближения. Однако форма кривой  $\Delta\rho_E$  при переходе от резонансного к локализованному состоянию описывается выражением (21).

Изменения формы кривой  $\Delta\rho_E$  при трансформации от резонансного к локализованному состоянию вблизи края  $c$ -зоны, когда  $E_o > 0$ , и  $A < 0$ , приведены на рис. 1. Вблизи экстремума имеют место резкое сужение ширины пика и увеличение его амплитуды. На рис. 2 изображен обратный переход от локализованного состояния вблизи дна  $c$ -зоны к ре-

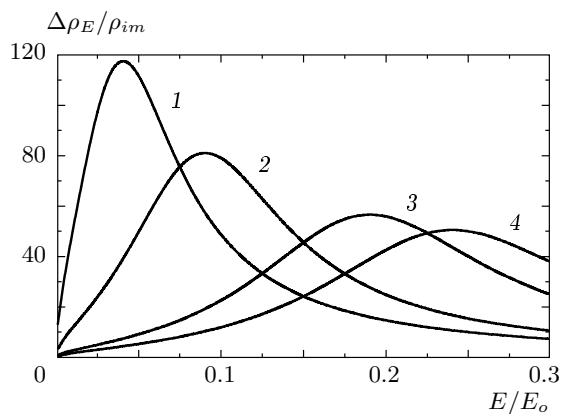


Рис. 2. То же, что на рис. 1, при обратном переходе от локализованного состояния ниже дна *c*-зоны в резонансное под действием сжатия,  $AP/E_0 = 1.05$  (1), 1.10 (2), 1.15 (3), 1.20 (4)

зональному (когда  $E_0 < 0$  и  $A > 0$ ). Важной особенностью энергетических зависимостей, представленных на рис. 1, 2, является существенная несимметричность резонансного пика при его приближении к экстремуму *c*-зоны. Аналогичный характер трансформации кривой  $\Delta\rho_E$  получается при переходе энергии состояния  $E_P$  через экстремум *v*-зоны.

### 3.2. Модификация пары состояний под действием сжатия

Случай модификации пары состояний под действием сжатия может быть реализован для таких несимметричных центров, для которых уравнение  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E = 0$  имеет пару корней в запрещенной зоне. При этом в рассматриваемом диапазоне энергий может быть применено параболическое приближение для  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E$ . В таком случае вместо (19) следует записать

$$\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E \approx \alpha_P E^2 + \beta_P E + \gamma_P, \tag{22}$$

где коэффициенты  $\alpha_P, \beta_P, \gamma_P$  линейно изменяются с давлением  $P$ . Условие существования пары уровней имеет вид  $\beta_P^2 > 4\alpha_P\gamma_P$ . Таким образом, вместе с изменением давления  $P$  может происходить появление или исчезновение пары уровней. Рисунок 3 поясняет этот переход для случая трансформации  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E$  с давлением при  $\alpha_P > 0$  (при  $\alpha_P < 0$  переход аналогичен, но ось энергий пересекает не минимум, а максимум параболы).

Отметим, что разложение (22) с независимыми коэффициентами  $\alpha_P, \beta_P, \gamma_P$  имеет место только

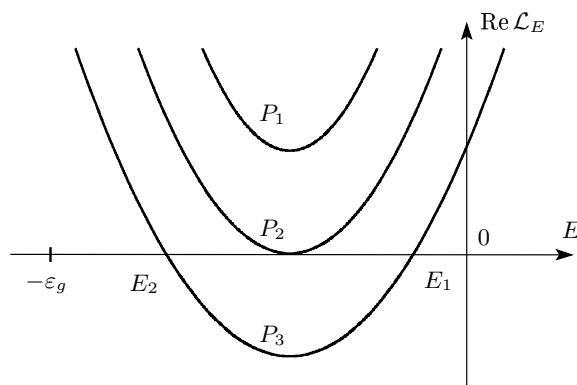


Рис. 3. Появление ( $P_1 < P_2 < P_3$ ) и исчезновение ( $P_3 < P_2 < P_1$ ) пары уровней при изменении  $P$

для несимметричного дефекта, когда  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E$  задается суммой выражений (14) и (15). В случае симметричного дефекта, когда выражение для  $\text{Re } \bar{\mathcal{L}}_E$  может быть разложено на множители, описанная выше согласованная модификация пары уровней не происходит. Модификация пары уровней под действием сжатия наблюдалась экспериментально (см., например, данные для ZnSe:N [17]). Однако экспериментальные данные недостаточны для проверки согласованного поведения уровней при модификации, иллюстрируемой на рис. 3.

### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дано описание электронных состояний на несимметричном короткодействующем центре, основанное на многозонном **кp**-приближении и позволяющее учесть влияние гидростатического сжатия. В отличие от случая симметричного центра, описываемого функцией  $\bar{\mathcal{L}}_E$ , в которой вклады различных зон факторизуются, учет несимметричности центра, описываемой дополнительным членом (15), приводит к перемешиванию этих состояний. При этом в выражении для примесной плотности состояний  $\Delta\rho_{nE}$  возникают дополнительные факторы, зависящие от параметра обрезания, так что **кp**-приближение позволяет описать лишь несимметричную форму резонанса вблизи края зоны. Энергия и ширина уровней с различной симметрией (если рассмотрены случаи несимметричного вдоль направлений [001], [110], [111] потенциала) существенно отличаются друг от друга. Также показано, что с давлением может появляться или исчезать пара уровней.

Основные приближения, использованные в работе, аналогичны обычным ограничениям **кр**-метода (одночастичное описание, учет состояний с энергией порядка  $\varepsilon_g$  и т. д.). Также использовано приближение низких концентраций центров, поскольку не рассматриваются перекрытия состояний (локализованных или резонансных) на различных примесях. Рассмотрение проведено в рамках восьмизонной модели Кейна, т. е. отброшен вклад далеких зон. Поскольку в уравнении (21) возникают феноменологические коэффициенты, эти ограничения не влияют на качественные результаты, полученные в статье. Отметим также, что использована модель короткодействующего центра, которая хорошо описывает ряд экспериментальных ситуаций [13, 14]. При этом результаты, изображенные на рис. 1–3, относятся к состояниям вблизи края зоны, хотя для узкощелевых материалов они могут применяться для области энергий порядка  $\varepsilon_g$ .

Сопоставим теперь физические следствия нашего рассмотрения с недавними экспериментальными данными для GaAs:N. Примеси замещения и кластеры примесей исследовались при низком уровне легирования [18, 19]. Измерения фотолюминесценции позволяют оценить коэффициент  $A$ , который определяет сдвиг локализованного уровня при давлении, причем сделать это возможно для различных фотопереходов, отвечающих уровням различной симметрии. Оцененная из эксперимента величина  $A$  по порядку совпадает с оценкой, даваемой выражением (19). Однако количественное сравнение не может быть проведено ввиду неопределенности, вносимой в задачу параметром обрезания. Насколько нам известно, для образцов с низкой концентрацией центров нет и экспериментальных данных по возбуждению фотолюминесценции, из которых можно было бы восстановить форму плотности состояний (см. рис. 1, 2). Поэтому возможность рассмотрения GaAs, легированного примесью азота, в рамках **кр**-приближения остается предметом дальнейшего изучения, причем качественные черты модификации уровней под действием сжатия (переход между резонансным и локализованным состояниями, появление и исчезновение пары уровней) согласуются с проведенным здесь рассмотрением. В последнее время начаты исследование легированного азотом InSb (см. работу [20] и ссылки в ней). Повышение качества этого материала и проведение детальных измерений в средней ИК-области спектра могут привести к идентификации несимметричных центров, имеющих описанные выше особенности.

Отметим наконец, что проведенное обобщение

**кр**-метода на случай низкосимметричных центров полезно, поскольку в рамках **кр**-приближения можно также исследовать и другие типы возмущений (электрическое и магнитное поля, одноосная деформация и т. д.), которые трудно рассматривать в рамках существующих численных методов. Кроме того, аналитическая модель, развитая в настоящей статье, позволяет описать влияние глубоких центров на кинетические явления (такие расчеты весьма сложны в рамках всех существующих численных подходов).

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. M. Stoneham, *Theory of Defects in Solids*, Oxford Univ. Press, Oxford (2001); M. Lannoo and J. Bourgoin, *Defects in Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin (1983).
2. *Deep Centers in Semiconductors*, ed. by S. T. Pantelidis, Gordon and Breach, Switzerland (1992).
3. H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford et al., *Phys. Rev. Lett.* **44**, 810 (1980).
4. P. R. C. Kent and A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2613 (2001); *Phys. Rev. B* **64**, 115208 (2001).
5. T. Mattila, S.-H. Wei, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **60**, R11245 (1999).
6. C. G. Van de Walle and J. Neugebauer, *J. Appl. Phys.* **95**, 3851 (2004).
7. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972).
8. J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Acad. Press, New York (1967); T. N. Morgan, *Phys. Rev. B* **12**, 5714 (1975).
9. G. Lukovsky, *Sol. St. Comm.* **3**, 299 (1965).
10. В. И. Перель, И. Н. Ясевич, *ЖЭТФ* **87**, 237 (1982).
11. M. V. Strikha and F. T. Vasko, *Phys. Stat. Sol. (b)* **181**, 181, 447 (1994).
12. F. T. Vasko, *Phys. Stat. Sol. (b)* **241**, 329 (2004).
13. *Semicond. Sci. Technol.* **17**, No. 8 (2002), Special Issue: III-IV-V *Semiconductor Alloys*.

14. Y. Zhang and W. Ge, *J. Luminescence* **85**, 247 (2000).
15. Е. В. Баханова, Ф. Т. Васько, *ФТТ* **32**, 86 (1990).
16. E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag, Berlin (1983).
17. I. L. Kuskovsky, G. F. Neumark, J. G. Tischler et al., *Phys. Rev. B* **63**, 161201 (2001).
18. X. Liu, M. E. Pistol, L. Samuelson et al., *Appl. Phys. Lett.* **56**, 1451 (1990); M. S. Tsang, J. N. Wang, W. K. Ge et al., *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3595 (2001).
19. B. S. Ma, F. H. Su, K. Ding et al., *Phys. Rev. B* **71**, 045213 (2005).
20. H. T. Pham, S. F. Yoon, K. H. Tan et al., *Appl. Phys. Lett.* **90**, 092115 (2007).