

СПЕКТРЫ МЕЛКИХ ДОНОРОВ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

И.Л.Бейнихес, Ш.М.Коган

Вычислен спектр энергий нечетных возбужденных состояний мелких доноров в многодолинных полупроводниках в зависимости от отношения $\gamma = m_{\perp}/m_l$ поперечной и продольной эффективных масс электронов. Полученная картина спектра полностью согласуется с многочисленными экспериментами и предсказывает новые линии в Ge, которые проявляются в спектрах, но ранее не отмечались.

Как известно, из-за анизотропии эффективной массы электронов ($\gamma < 1$) в уравнении Шредингера, описывающем в приближении эффективной массы (ПЭМ) мелкие доноры в многодолинных полупроводниках, переменные не разделяются и аналитическое решение невозможно. Спектры оптических переходов в мелких донорах в Ge и Si (см. обзор ¹), измеренные после 1969 г., интерпретированы на основе результатов вариационных расчетов Фолкнера ². В таблице приводятся измеренные в ^{3, 4} энергии возбуждения некоторых мелких доноров в Ge за вычетом измеренной же энергии перехода в $2P_{\pm}$, а также интерпретация линий и соответствующие энергии по ². Несоответствие между измеренными энергиями и вычисленными в ² энергиями не только значительно выходит за пределы погрешности эксперимента, составляющей $\lesssim 5$ мкэВ, но в некоторых случаях ($(5p_{\pm}), (6p_{\pm})$) разница между теорией ² и экспериментом порядка и больше расстояния между соседними уровнями. Поскольку указанная в ² точность расчетов довольно высокая (3 знака), плохое согласие ² с опытом (оно отмечалось и в ⁴) является довольно принципиальным: оно может указывать на то, что даже нечетные возбужденные состояния плохо описываются ПЭМ, и на существование каких-то неучтенных эффектов. Поэтому мы предприняли расчет энергий нечетных состояний мелких доноров в интервале изменения γ от 1 (водородоподобный атом) до $\gamma_{Ge} = 0,05134$ методом переноса условия ограниченности ^{5, 6}. Этот метод характеризуется, во-первых, высокой точностью расчета энергетических уровней, а во-вторых, – возможностью с высокой же точностью вычислять волновые функции, что позволяет находить силы осцилляторов (СО) переходов и с большей достоверностью идентифицировать спектральные линии.

На рис. 1 изображены (сплошными кривыми) зависимости от γ энергий нечетных состояний с $M = \pm 1$ (они обозначены nP_{\pm} , где $n = 2, 3, \dots$, в скобках даны обозначения по ²)

ицах $E_d = m_i e^4 / \hbar^2 \epsilon^2$, где ϵ — диэлектрическая проницаемость. Наименьшее значение $\gamma = \gamma_{Ge}$. Штрихами показаны результаты ², слева сплошными горизонтальными чертами — измеренные значения уровней доноров в Ge, пунктиром — уровни, полученные в настоящей работе, но не отмеченные в экспериментальных работах. На рис. 2 показаны СО оптических переходов из основного уровня на уровни nP_{\pm} (обозначения уровней, не отмеченных в экспериментах, подчеркнуты). В таблице даны вычисленные нами и измеренные значения разностей $E(nP_{\pm}) - E(2P_{\pm})$. Точность настоящего расчета безразмерных энергий связи E/E_d примерно $3 \cdot 10^{-5}$, т. е. при известной E_d точность энергий связи в Ge $\sim 0,3$ мкэВ. Точность расчета волновых функций 3 знака.

**Уровни энергии состояний nP_{\pm} доноров в Ge,
отсчитанные от $2P_{\pm}$, (в мэВ) и их интерпретация**

Измерения на различных примесях				Расчет		Интерпретация	
Sb ⁴	P ⁴	Li - O ³	"D" ³	Настоящий	Фолкнера ²	Настоящая	На основе ²
0,682 (4)	0,688 (8)	0,684 (5)	0,684 (5)	0,6828	0,70	$3P_{\pm}$ ($3p_{\pm}$)	($3p_{\pm}$)
0,962 (4)	0,971 (8)	0,971 (5)	0,972 (5)	0,9694	1,00	$4P_{\pm}$ ($4p_{\pm}$)	($4p_{\pm}$)
1,116 (4)	1,106 (8)	1,112 (5)	1,113 (5)	1,1129	1,12	$5P_{\pm}$ ($4f_{\pm}$)	($4f_{\pm}$)
...	1,1465	—	$6P_{\pm}$ ($5p_{\pm}$)	—
1,241 (6)	1,252 (8)	1,251 (5)	1,252 (5)	1,2531	1,20	$7P_{\pm}$ ($5f_{\pm}$)	($5p_{\pm}$)
1,322 (6)	1,328 (8)	1,320 (5)	1,322 (5)	1,3212	1,32	$8P_{\pm}$ ($6p_{\pm}$)	($5f_{\pm}$)
...	1,3361	—	$9P_{\pm}$ ($6f_{\pm}$)	—
1,389 (6)	—	1,387 (5)	1,391 (5)	1,3921	1,35	$10P_{\pm}$ ($6h_{\pm}$)	($6p_{\pm}$)
1,407 (6)	—	—	—	1,4067	1,41	$11P_{\pm}$ ($7p_{\pm}$)	($6f_{\pm}$)

Вычисленные в ² энергии уровней по мере уменьшения γ все более отклоняются от вычисленных нами (рис. 1). В случае Si ($\gamma_{Si} = 0,2079$) неточность ² хотя и выше экспериментальной, все же меньше расстояния между соседними уровнями и потому не привела к неправильной идентификации линий. При $\gamma = \gamma_{Ge}$ отклонение вычисленных в ² энергий от экспериментальных и полученных нами значений в случае nP_{\pm} с $n = 3,4$ гораздо больше погрешности эксперимента. При $n > 5$ отклонение становится порядка и больше расстояния между соседними уровнями, что и привело к неправильной идентификации всех переходов, начиная с $6P_{\pm}$. Ошибочность интерпретации спектров доноров в Ge на основе ² оставалась незамеченной до сих пор, в частности, потому, что переходы в состоянии nP_{\pm} с $n = 6$ и 9 были в экспериментальных работах пропущены, а некоторые из вычисленных в ² уровней для Ge ($(5f_{\pm})$ и $(6f_{\pm})$) случайно оказались рядом с экспериментальными точками (рис. 1), отвечающими, в действительности, другим состояниям ($(6p_{\pm})$ и $(7p_{\pm})$ в обозначениях ²). Из рис. 2 видно, что СО пропущенных линий в несколько раз меньше СО близких к ним линий. Однако эти переходы можно усмотреть в экспериментальных спектрах фототермической ионизации различных доноров в Ge: переход на $6P_{\pm}$ в виде небольшого пика, а на $9P_{\pm}$ — в виде плеча на склоне линии $8P_{\pm}$. На рис. 2 показаны также энергии связи и СО уровней доноров в Ge до $17P_{\pm}$.

При малых $1 - \gamma$ состояния, возникающие из уровней $n = 4$ и 5 водорода, содержат практически лишь функции с $L = 1$ и $L = 3$. Интересно, что нижний уровень (np_{\pm}) каждого такого дублета почти целиком f -типа, а верхний (nf_{\pm}) — p -типа, что лишним раз указывает на

то, что принятые в ² обозначения уровней при $\gamma \neq 1$ — чисто условные. В Si CO переходов на нижние уровни дублетов уже выше, чем на верхние, и CO, в основном, монотонно падают с ростом n (отметим, однако, что в Si CO ($6f_{\pm}$) ничтожна по сравнению с ($6h_{\pm}$)). В случае Ge существенные вклады в волновую функцию каждого состояния дает большое число слагаемых с разными (нечетными) L (в случае $17P_{\pm}$ $L = 21$ дает еще заметный вклад), CO изменяются немонотонно с ростом энергии (рис. 2) и CO линий nP_0 с $n > 3$ ничтожны. Все это указывает на то, что мелкий донор в Ge как квантовая система сильно отличается от водородоподобного атома.

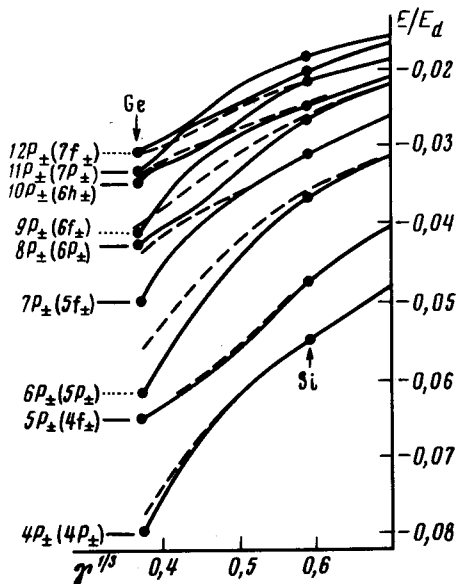


Рис. 1. Зависимость энергии уровня от γ

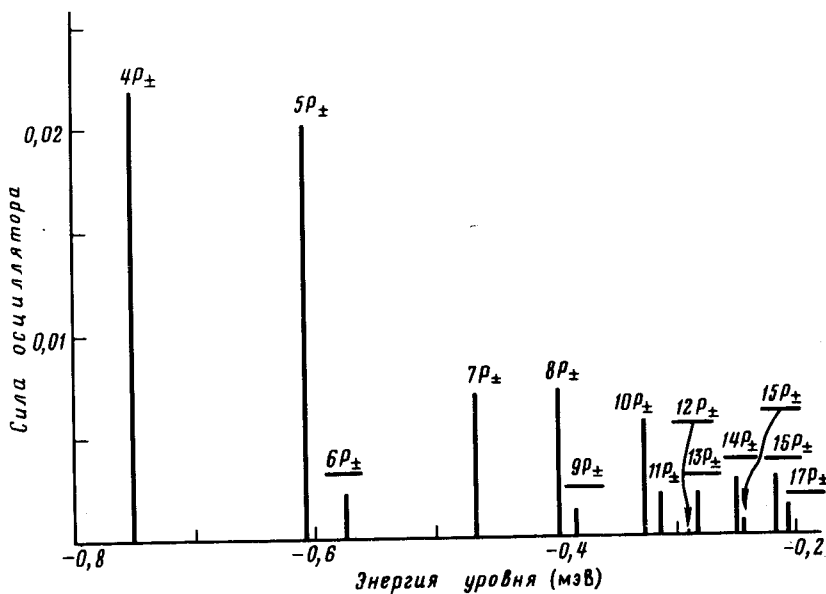


Рис. 2. Силы осцилляторов переходов из основного состояния в Ge

Следуя ², мы нашли ϵ Ge из условия наилучшего совпадения вычисленных уровней с экспериментом: $\epsilon = 15,40$ (в ² $\epsilon = 15,36$ найдена из разности энергий ($2p_{\pm}$) — ($2p_0$)). Из таблицы видно, что при этом значении ϵ полученные в настоящем расчете энергии уровней

nP_{\pm} доноров в Ge совпадают со всеми измеренными в 3 в пределах точности экспериментов ($\lesssim 5$ мкэВ). Это указывает на удивительную точность, с какой ПЭМ описывает нечетные состояния мелких доноров в Ge. Эффекты, выходящие за рамки ПЭМ (например, поляроны), если и есть, то находятся за пределами точности спектроскопических измерений.

Насколько можно судить по экспериментальным спектрам, имеется также полное согласие между вычисленными и наблюдаемыми интенсивностями линий.

Авторы очень благодарны А.Ф.Полупанову и Э.И.Рашба за обсуждение.

Литература

1. Ramdas A.K., Rodriguez S. Rep. Prog. Phys., 1981, **44**, 1297.
2. Faulkner R.A. Phys. Rev., 1969, **184**, 713.
3. Skolnic M.S., Eaves L., Stradling R.A., Portal T.S., Askenasy S. Solid State Comm., 1974, **15**, 1403.
4. Seccombe S.D., Korn D.M. Solid State Comm., 1972, **11**, 1539.
5. Beinikhes I.L., Kogan Sh. M., Polupanov A.F., Taskinboev R. Solid State Comm., 1985, **53**, 1083.
6. Коган Ш.М., Таскинбоев Р. ФТП, 1983, **17**, 1583.

Институт радиотехники и электроники
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
18 мая 1986 г.