

Cálculo de estados aceptores en aleaciones de silicio-germanio

J.T. TELLO MARTÍNEZ, H. NAVARRO-CONTRERAS* Y R.A. BRITO-ORTA

Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"

Universidad Autónoma de Puebla

Apartado postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México

Recibido el 20 de enero de 1992; aceptado el 25 de mayo de 1992

RESUMEN. Se presenta un cálculo de los principales estados cuánticos de impurezasceptoras embebidas en aleaciones de silicio-germanio, para todo el rango de concentraciones de silicio, empezando desde el germanio puro. El cálculo se efectúa en el marco de la teoría de masas efectivas para estos estados, utilizando la agrupación en operadores tensoriales esféricos del hamiltoniano de Kohn y Luttinger para aceptores, introducida en 1973 por Baldereschi y Lipari, en la aproximación esférica e incluyendo las correcciones del término cúbico mediante la teoría de perturbación de primer orden. El modelo requiere el conocimiento de las tres constantes de las bandas de Luttinger y de la constante dieléctrica como parámetros determinantes de los valores energéticos resultantes. Al ser éstos desconocidos, se presenta el cálculo previo de estas cantidades, también para todo el rango de concentraciones de silicio. Los resultados obtenidos podrán servir de apoyo a la interpretación de resultados experimentales en que se usan impurezasceptoras como sonda para estudiar las propiedades de las superredes de $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, que han adquirido enorme relevancia para la realización de dispositivos emisores y detectores de radiación en la región espectral situada entre 1.3 y 1.55 μm , que para las comunicaciones ópticas actuales es tecnológicamente muy relevante.

ABSTRACT. We present a calculation of the main quantum states of acceptor impurities embedded in silicon-germanium alloys for all concentrations of silicon beginning from pure germanium. The calculation is made within the frame of the effective-mass theory using the acceptor Hamiltonian of Kohn and Luttinger in the form written in terms of spherical tensor operators introduced in 1973 by Baldereschi and Lipari. The main quantum levels are calculated in the spherical approximation and corrections due to the cubic term are included using first-order perturbation theory. The model requires the knowledge of the Luttinger parameters for the valence band and the dielectric constant of the alloys as determining parameters of the resulting energetic values. Since these are not known, we present the previous calculation of these quantities, also for all the concentration range of silicon. The results obtained will be useful to interpret experimental measurements in which acceptor impurities are used as a probe to study the properties of $\text{Si}/\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ superlattices. These systems have enormous relevance for the fabrication of devices for emission and detection of radiation in the spectral range located between 1.3 and 1.5 μm , which is very important from the technological viewpoint for the optical communications of today.

PACS:71.55.-i

*También de tiempo parcial en el Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, UASLP, San Luis Potosí, 78000 SLP, México.

1. INTRODUCCIÓN

El estudio de los niveles cuánticos de impurezas aceptoras en semiconductores cúbicos con red de diamante o tipo zinc-blenda fue planteado desde 1955 por Kohn y Luttinger (KL), usando la aproximación de masas efectivas [1]. Sin embargo, una solución numérica adecuada para comparar con los resultados experimentales de aceptores en germanio o silicio sólo se pudo tener hasta la segunda mitad de los setentas, mediante el enfoque de Baldereschi y Lipari (BL) [2,3,4], de agrupar los operadores del hamiltoniano en operadores tensoriales esféricos, lo que permitió una convergencia muy rápida de los cálculos. Siendo posible preparar al Ge y al Si en grandes monocristales de muy alta pureza y calidad cristalina, el estudio de estados aceptores en estos dos materiales, que tienen red del tipo del diamante, ha recibido una gran atención y se conocen las posiciones espectrales de muchos estados excitados con precisiones de hasta 0.01 meV (precisiones de alrededor del 0.1 % del valor de la energía de la transición) [5,6]. La comparación de los resultados teóricos del modelo de Kohn y Luttinger, denominado teoría de masas efectivas (TME), con los resultados experimentales arroja una excelente concordancia para los aceptores en el germanio y adecuada para el caso del silicio [4]. La capacidad predictiva del hamiltoniano de KL con el enfoque de BL es tal que se ha usado incluso en la literatura en la dirección "opuesta": de los resultados experimentales de espectros aceptores (o de excitones libres) se han determinado los valores de los parámetros de bandas de Luttinger en el CdTe [7].

El germanio y el silicio tienen las mismas características de coordinación atómica para la formación de estructuras cristalinas. Esto implica que pueden combinarse para formar aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ para todo el rango de concentraciones posibles de cualquiera de los dos elementos, (*i.e.*, para $0 < x < 1$), sin tendencias a segregarse en regiones de diferentes composiciones. Ambos, el Ge y el Si, son semiconductores de ancho de banda energéticamente prohibido (E_g) de tipo indirecto, y a temperatura ambiente éstos valen 0.67 y 1.14 eV, respectivamente. Estos valores de la energía corresponden a radiación en la región del cercano infrarrojo del espectro electromagnético, longitudes de onda correspondientes a $\lambda = 1.85$ y $1.088 \mu\text{m}$.

Las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ tienen valores de E_g que varían continuamente del valor del silicio al del germanio, cuando x varía de 0 a 1. En consecuencia, se pueden preparar aleaciones de estos materiales con el E_g perfectamente sintonizado energéticamente a las dos longitudes de onda más importantes en las comunicaciones por las fibras ópticas de silicatos actuales: la utilizada comercialmente $\lambda = 1.3 \mu\text{m}$ y la que se encuentra en estudio experimental, $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$. Las aleaciones de SiGe ofrecen así en superredes de Si/SiGe [8] la promesa de proporcionar el material base adecuado para la fabricación de dispositivos eficientes emisores o detectores de radiación de estas longitudes de onda. En particular esto se ha tratado de lograr mediante la fabricación de superredes con periodo muy corto: de 10 a 20 Å, con lo que se espera la transformación de las capas de SiGe a materiales con ancho de banda energético prohibido directo, lo cual incrementaría muchos órdenes de magnitud su eficiencia emisora de radiación a las longitudes de onda deseadas [9].

La fabricación de superredes de Si/SiGe crecidas sobre sustratos de Si (o Ge) con propiedades físicas y calidad adecuada para usarse en dispositivos optoelectrónicos, implica un

conocimiento muy detallado de las propiedades físicas de estas estructuras artificiales [8]. Esto plantea la necesidad de la caracterización física más detallada que sea posible de estas heteroestructuras al ser fabricadas. Superredes y otro tipo de heteroestructuras han sido fabricadas desde mediados de los setentas en el sistema de AlGaAs/GaAs y existen excelentes revisiones de la multitud de técnicas usadas para caracterizarlas [10]. Entre otras técnicas ha sido utilizado con éxito el estudio de la introducción de impurezas tanto donadoras comoceptoras para ser utilizadas como sondas que permiten caracterizar, entre otras cosas, la habilidad en el crecimiento de incorporar en regiones limitadas de la superred a estas impurezas, así como nuestro entendimiento teórico y experimental de las distribuciones de desajustes de bandas ("band offsets" en inglés) que juegan un papel fundamental en las propiedades de conducción y respuesta eléctrica de estos materiales, además del de determinar los valores energéticos de los estados cuánticos de estas impurezas [11].

Las superredes de Si/SiGe fueron sintetizadas de calidad adecuada sólo hasta principios de los ochentas [8]. La diferencia de constante de red atómica entre el Ge y el Si es de un 4.2 %, lo que representa un obstáculo formidable al crecimiento de superredes de anchura arbitraria y esto determinó que en general este sistema de heteroestructuras haya sido bastante menos estudiado que el de las de AlGaAs/GaAs. Sólo recientemente se ha iniciado también el estudio de superredes de Si/SiGe con impurezasceptoras [12], lo que plantea la necesidad imperiosa de extender nuestro conocimiento del espectro de los estados cuánticos de impurezasceptoras en las aleaciones de SiGe en el "bulto" para que puedan servir de referencia en los análisis de los resultados en las heteroestructuras tipo Si/SiGe.

Atendiendo a esta necesidad, en el presente trabajo calculamos los niveles de energía de los estados aceptores poco profundos más importantes en las aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, tomando en cuenta el rango completo de variación de la concentración de silicio ($0 \leq x \leq 1$). Para hacerlo tuvimos que calcular numéricamente los parámetros de las bandas de valencia o parámetros de Luttinger y los valores de la constante dieléctrica como funciones de la fracción de Si, cuyos resultados se presentan también.

En el presente artículo se presenta el material estudiado como sigue: En la Sec. 2 describimos el hamiltoniano de masas efectivas para los estados aceptores poco profundos en los semiconductores usando los métodos de Baldereschi y Lipari [2,3]. Se muestra allí cómo usar la técnica variacional para obtener las energías de los estados aceptores en dichos materiales.

En la Sec. 3 mostramos cómo obtenemos los parámetros de las bandas de valencia del Si y a partir de ellos, los de las aleaciones SiGe. Posteriormente, empleamos dichos parámetros para determinar los coeficientes de "interacción espín-orbita" y de acoplamiento cúbico, necesarios para el hamiltoniano de los aceptores. Mostramos también el método que empleamos para evaluar los elementos de matriz del momento lineal para determinar la variación de la constante dieléctrica con la concentración de Si para las mismas aleaciones.

En la Sec. 4 calculamos la variación de los niveles de energía de los estados aceptores con la concentración de Si en las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$. Después de la discusión correspondiente, resumimos las conclusiones generales del presente trabajo en la Sec. 5 con miras a la aplicación de las heteroestructuras de capas tensionadas de $\text{Si/Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

2. HAMILTONIANO DE MASAS EFECTIVAS PARA ESTADOS ACEPTORES

Tanto en el Ge, en el Si, como en sus aleaciones de SiGe, la estructura de los bordes de las bandas de valencia son cualitativamente similares: los máximos de las bandas de valencia ocurren en el punto $\Gamma(\vec{k} = 0)$. El estado del hueco (o de un electrón) en este punto, tiene una degeneración de orden cuatro caracterizado por la simetría Γ_8^+ [1]. Dicho estado se deriva de los estados $P_{3/2}$ correspondientes del átomo libre, el cual corresponde a $J = 3/2$ y $M_J = \pm 3/2$ y $\pm 1/2$. Debajo de este estado existe otro máximo de la banda de valencia originada por el estado $P_{1/2}$ del átomo libre. Dicho estado tiene la simetría Γ_7^+ y una degeneración de orden dos con $M_J = \pm 1/2$ [1]. La separación del estado Γ_7^+ del estado Γ_8^+ es debida a la interacción espín orbita del espín del electrón con el momento angular de su estado atómico, en el momento de entrar a formar la banda de estados electrónicos.

En la aproximación de masas efectivas, tomando en cuenta que el centro del aceptor está descrito con un potencial de tipo coulombiano apantallado por la constante dieléctrica estática del semiconductor en el cual está inmerso, el hamiltoniano del aceptor es [2,3,4]

$$H = \left(\gamma_1 + \frac{5\gamma_2}{2} \right) \frac{P^2}{2m_0} - \frac{\gamma_2}{m_0} (P_x^2 J_x^2 + P_y^2 J_y^2 + P_z^2 J_z^2) - \frac{2\gamma_3}{m_0} [\{P_x P_y\}\{J_x J_y\} + \{P_y P_z\}\{J_y J_z\} + \{P_z P_x\}\{J_z J_x\}] - \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (1)$$

donde γ_1, γ_2 y γ_3 son los parámetros de Luttinger que describen la relación de dispersión del hueco cerca del centro de la zona de Brillouin; P es el operador de momento lineal del hueco y \vec{J} es el operador de momento angular correspondiente al espín 3/2; $\{ab\} = (ab + ba)/2$; ϵ y m_0 son la constante dieléctrica estática del cristal y la masa del electrón libre respectivamente.

El primer término del hamiltoniano anterior es la energía cinética de la partícula, el segundo y tercer términos representan un tipo de interacción “espín-orbita” y se deduce su forma algebraica al considerar la combinación lineal de términos P_i y J_i , que sean cúbicamente invariantes como lo sugiere la simetría de los estados del punto $k = 0(\Gamma_8^+)$ de la zona de Brillouin, y el último representa al potencial tipo coulombiano debido a la impureza.

El hamiltoniano anterior puede ser separado en términos de las diferentes simetrías que lo constituyen. A este respecto, Baldereschi y Lipari [2,3] aplicaron los siguientes operadores tensoriales cartesianos simétricos de segundo rango y de traza nula

$$P_{ik} = 3P_i P_k - \delta_{ik} P^2 \quad (i, k = 1, 2, 3) \quad (2)$$

y

$$J_{ik} = \frac{3}{2}(J_i J_k + J_k J_i) - \delta_{ik} J^2, \quad (3)$$

con lo que el hamiltoniano para los aceptores poco profundos puede ser escrito de la

manera siguiente

$$H = \frac{\gamma_1}{2m_0} P^2 - \frac{1}{9m_0} [\gamma_3 - (\gamma_3 - \gamma_2)\delta_{ik}] P_{ik} J_{ik} - \frac{e^2}{\epsilon r}. \quad (4)$$

Al descomponer y agrupar los tensores cartesianos anteriores en términos de tensores esféricos irreducibles de rango $L = 0, 1$ y 2 , tomando en cuenta su simetría y que poseen traza nula, las componentes $L = 0$ y $L = 1$ estarán ausentes, con lo que tal descomposición sólo contendrá términos con componentes irreducibles de segundo rango con $q = -2, -1, 0, 1, 2$. Así, el hamiltoniano tendrá la siguiente forma

$$H = \left(\frac{\gamma_1}{2m_0} P^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} \right) - \frac{3\gamma_3 + 2\gamma_2}{45m_0} (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{18m_0} \left\{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^{(4)} + \frac{\sqrt{70}}{5} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{0+}^{(4)} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \right\}, \quad (5)$$

en donde se han empleado las definiciones de los productos escalar y vectorial de tensores esféricos irreducibles dados, por ejemplo, en Edmonds [13].

En vez de utilizar los parámetros de Luttinger de la banda de valencia, se usan los parámetros de acoplamiento esférico μ , definido como:

$$\mu = \frac{6\gamma_3 + 4\gamma_2}{5\gamma_1}, \quad (6)$$

el cual describe la intensidad de una nueva interacción "espín-órbita" esférica, y el parámetro de acoplamiento cúbico δ , calculado a partir de la expresión siguiente

$$\delta = \frac{\gamma_3 - \gamma_2}{\gamma_1}, \quad (7)$$

que mide la magnitud de la contribución cúbica. Además, si se emplean el Rydberg efectivo

$$Ry^* = \frac{e^4 m_0}{2\hbar^2 \epsilon^2 \gamma_1} \quad (8)$$

y el radio de Bohr efectivo

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon \gamma_1}{e^2 m_0} \quad (9)$$

como unidades de energía y longitud, respectivamente, la expresión que se obtiene para el hamiltoniano será

$$H = \frac{P^2}{\hbar^2} - \frac{2}{r} - \frac{\mu}{9\hbar^2} (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \frac{\delta}{9\hbar^2} \left\{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^{(4)} + \frac{\sqrt{70}}{45} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} \right\}, \quad (10)$$

donde ahora la estructura de la banda de valencia está caracterizada por medio de los parámetros μ y δ .

2.1 Aproximación esférica del hamiltoniano de los aceptores en los semiconductores cúbicos

La Ec. (10) del hamiltoniano está escrita en términos de tensores esféricos que pertenecen a representaciones irreducibles del grupo de rotación completo y no del grupo puntual cúbico del cristal. Así, es posible separar el último término que tiene simetría estrictamente cúbica de los anteriores términos, que además de tener simetría cúbica, son también esféricamente invariantes.

En la aproximación esférica [2], se desprecia el último término de la Ec. (10), con lo que el problema de los aceptores en aproximación esférica está representado por el siguiente hamiltoniano

$$H_{\text{esf}} = \frac{P^2}{\hbar^2} - \frac{2}{r} - \frac{\mu}{9\hbar^2} [P^{(2)} \cdot J^{(2)}]; \tag{11}$$

nótese que los primeros dos términos representan al hamiltoniano que describe al átomo de hidrógeno. Así, el hamiltoniano esférico está caracterizado por la representación del átomo de hidrógeno más una perturbación que está dada por el último término de la Ec. (11),

$$-\frac{\mu}{9\hbar^2} [P^{(2)} \cdot J^{(2)}] \tag{12}$$

que puede interpretarse como un término que describe cierta interacción “espín-órbita”.

El hamiltoniano esférico de los aceptores es esféricamente simétrico en los espacios acoplados del momento angular orbital y del espín, donde el momento angular total $\vec{F} = \vec{L} + \vec{J}$ es una constante de movimiento. Con esto, los estados aceptores pueden ser clasificados siguiendo el esquema de acoplamiento $L-S$ empleado para sistemas atómicos.

En el caso de un acoplamiento espín-órbita fuerte ($J = 3/2, \Delta = \infty$) [2] como el considerado en el presente trabajo, y tomando en cuenta sólo los estados aceptores más importantes, los estados hidrogénicos nS dan origen solamente a estados $nS_{3/2}$, mientras que el estado nP se separa en los estados $nP_{1/2}$, $nP_{3/2}$ y $nP_{5/2}$. Como el término de interacción espín-órbita del hamiltoniano esférico acopla estados hidrogénicos para los cuales $\Delta L = 0, \pm 2$, las funciones de onda para dichos estados pueden ser escritas como [2]

$$\phi(S_{3/2}) = f_0(r)|0, 3/2, 3/2, F_z\rangle + g_0(r)|2, 3/2, 3/2, F_z\rangle, \tag{13}$$

$$\phi(P_{1/2}) = f_1(r)|1, 3/2, 1/2, F_z\rangle, \tag{14}$$

$$\phi(P_{3/2}) = f_2(r)|1, 3/2, 3/2, F_z\rangle + g_2(r)|3, 3/2, 3/2, F_z\rangle, \tag{15}$$

$$\phi(P_{5/2}) = f_2(r)|1, 3/2, 5/2, F_z\rangle + g_2(r)|3, 3/2, 5/2, F_z\rangle, \tag{16}$$

donde cada una de las constantes que constituyen al “ket” se relacionan con la siguiente notación:

$$|L, J, F, F_z\rangle, \tag{18}$$

la cual es función propia del momento angular total en el esquema acoplado $L-J$. Las funciones $f_i(r)$ y $g_i(r)$ son funciones radiales definidas de manera que las funciones de onda (13-16) sean funciones propias del hamiltoniano esférico y se propone para propósitos variacionales describirlas de la siguiente manera:

Para el estado $S_{3/2}$

$$f_0(r) = \sum_{i=1}^{21} A_i e^{-\alpha_i r^2} \quad \text{y} \quad g_0(r) = r \sum_{i=1}^{21} B_i e^{-\alpha_i r^2}. \quad (19)$$

Para el estado $P_{1/2}$

$$f_1(r) = r \sum_{i=1}^{21} C_i e^{-\alpha_i r^2}. \quad (20)$$

Para los estados $P_{3/2}$ y $P_{5/2}$ las funciones son

$$f_2(r) = r \sum_{i=1}^{21} C_i e^{-\alpha_i r^2} \quad \text{y} \quad g_2(r) = r \sum_{i=1}^{21} D_i e^{-\alpha_i r^2}. \quad (21)$$

Las constantes A_i, B_i, C_i y D_i se han considerado como los parámetros variacionales que sirven para minimizar la energía del correspondiente estado. Las constantes α_i se calculan a partir de la siguiente progresión geométrica $\alpha_{i+1} = g\alpha_i$, donde $\alpha_1 = 10^{-2}$ y $\alpha_{21} = 5 \times 10^5$ se han elegido de manera que las funciones resultantes representen el rango correspondiente a las energías de los estados aceptores [24].

El cálculo de los elementos de matriz del hamiltoniano se realizó empleando la técnica de elementos de matriz reducidos. Con esto, el elemento de matriz del término hidrogénico es simplemente [2,3]

$$\begin{aligned} & \left\langle L', J, F', F'_z \left| \frac{P^2}{\hbar^2} - \frac{2}{r} \right| L, J, F, F_z \right\rangle \\ &= \left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 - \frac{d}{dr} \right) + \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2}{r} \right] \delta_{LL'} \delta_{FF'} \delta_{F_z F'_z} \quad (22) \end{aligned}$$

mientras que el elemento de matriz correspondiente al término de interacción espín-órbita, expresado en términos de los elementos de matriz reducidos $(J||J^{(2)}||J)$ y $(L'||P^{(2)}||L)$, que están expresados en el Apéndice I, será:

$$\begin{aligned} \langle L', J, F', F'_z | (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) | L, J, F, F_z \rangle &= (-1)^{L+J+F} \begin{Bmatrix} F & J & L' \\ 2 & L & J \end{Bmatrix} \\ &\times (J||J^{(2)}||J)(L'||P^{(2)}||L) \delta_{FF'} \delta_{F_z F'_z}. \quad (23) \end{aligned}$$

Así, el valor esperado del hamiltoniano esférico se obtiene a partir del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales que deben satisfacer tanto $f_i(r)$ como $g_i(r)$:

Para el estado $1S_{3/2}$

$$\begin{vmatrix} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - E & -\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{5}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) \\ -\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) & \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{6}{r^2} + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_0(r) \\ g_0(r) \end{vmatrix} = 0. \tag{24}$$

Para el estado $P_{1/2}$

$$\left[(1 + \mu) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \right] f_1(r) = 0. \tag{25}$$

Para el estado $P_{3/2}$

$$\begin{vmatrix} (1 - \frac{4}{5}\mu) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{3}{5}\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{3}{5}\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & (1 + \frac{4}{5}\mu) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_0(r) \\ g_0(r) \end{vmatrix} = 0. \tag{26}$$

Para el estado $P_{5/2}$

$$\begin{vmatrix} (1 + \frac{1}{5}\mu) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{2}{5}\sqrt{6}\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{2}{5}\sqrt{6}\mu \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & (1 - \frac{1}{5}\mu) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \begin{vmatrix} f_3(r) \\ g_3(r) \end{vmatrix} = 0. \tag{27}$$

Si las funciones de prueba se expresan como

$$F(r) = \sum_i A_i X_i(r, \alpha), \tag{28}$$

al mantener a las cantidades α fijas y variando a las cantidades A , de manera que se pueda minimizar la funcional

$$L = \int F^*(H - E)F d^3x, \tag{29}$$

obtendremos una ecuación matricial de valores propios para E y las variables A , de la siguiente manera

$$HA = ENA, \tag{30}$$

donde

$$H_{ij} = \int X_i^* H X_j d^3 x = H_{ji}, \quad (31)$$

$$N_{ij} = \delta_{ij} \int |X_{ij}|^2 d^3 x, \quad (32)$$

y A es un vector columna cuyos elementos son las A_i . Resolvimos la Ec. (30) por medio del método de Jacobi para diagonalización de matrices [14].

2.2. Modelo cúbico del hamiltoniano de aceptores en semiconductores cúbicos

En este caso, el momento angular total \vec{F} ya no es un buen número cuántico, ya que el término “espín-órbita” [3] acopla todos los estados con momento angular L de una paridad dada, obteniéndose sistemas de ecuaciones diferenciales de orden infinito para el hamiltoniano cuya solución es prácticamente imposible, a menos que pueda reducirse dicho sistema a uno de dimensión finita. Tomando en cuenta que en los semiconductores con estructura zinc-blenda la magnitud del término cúbico es mucho más pequeña que la del parámetro de acoplamiento esférico μ [3], las matrices de los operadores radiales del hamiltoniano se pueden reducir a dimensiones finitas, con lo que su solución es ahora posible.

En el límite de acoplamiento espín-órbita que se ha utilizado en el presente trabajo, los únicos estados que son afectados por el acoplamiento cúbico a primer orden son los estados $P_{5/2}$, en cuyo caso, el término cúbico acopla estados en los cuales $\Delta F_z = 0, \pm 4$. En la Fig. 1, se muestra el desdoblamiento o corrimiento energético cualitativo de los niveles de energía $1S$ y $2P$ de sistemas que están descritos por medio de diferentes hamiltonianos constituidos de adiciones de términos de una simetría dada al hamiltoniano hidrogénico. Los niveles $2P$ se localizan a 0.25 Rydbergs por debajo del nivel de ionización en el átomo de hidrógeno. El caso a) representa al hamiltoniano correspondiente al hidrógeno. El b) representa al sistema esférico, es decir, cuando se ha sumado el acoplamiento “espín-órbita”. El caso c) representa al sistema en el cual la simetría cúbica del hueco ha sido tomada en cuenta.

Las funciones de onda correspondientes al estado $P_{5/2}$ son de la misma forma que las de las Ecs. (17), las cuales son

$$\phi(P_{5/2}) = f_2(r)|1, 3/2, 5/2, F_z\rangle + g_2(r)|3, 3/2, 5/2, F_z\rangle, \quad (33)$$

En este caso el estado $P_{5/2}$ se desdobra en el estado Γ_7^- y en el estado Γ_8^- , correspondientes a diferentes representaciones irreducibles del grupo puntual de simetría del cubo, dando como resultado para el acoplamiento cúbico entre los estados del modelo esférico las funciones de onda

$$\phi(P_{5/2}, \Gamma_7^-) = f_2(r)|1, 3/2, 5/2, \Gamma_7^- \rangle + g_2(r)|3, 3/2, 5/2, \Gamma_7^- \rangle \quad (34)$$

y

$$\phi(P_{5/2}, \Gamma_8^-) = f_2(r)|1, 3/2, 5/2, \Gamma_8^- \rangle + g_2(r)|3, 3/2, 5/2, \Gamma_8^- \rangle. \quad (35)$$

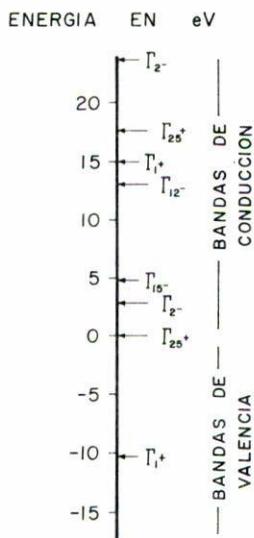


FIGURA 1. Desdoblamiento cualitativo de los niveles de energía de los estados 2P al adicionarse las contribuciones de espín-órbita y cúbica al hamiltoniano hidrogenico.

Los símbolos Γ_7^- y Γ_8^- indican la combinación lineal apropiada de los estados con diferente componente del momento angular total que se transforma de acuerdo a la representación irreducible dada del grupo puntual O_h las cuales son (ver Apéndice II)

$$\begin{aligned} \phi(P_{5/2}, \Gamma_7^-) = & -\frac{f(r)}{\sqrt{6}}|1, 3/2, 5/2, 5/2\rangle + \frac{\sqrt{5} f(r)}{\sqrt{6}}|1, 3/2, 5/2, -3/2\rangle \\ & -\frac{g(r)}{\sqrt{6}}|3, 3/2, 5/2, 5/2\rangle + \frac{\sqrt{5} g(r)}{\sqrt{6}}|3, 3/2, 5/2, -3/2\rangle \end{aligned} \quad (36)$$

para la representación Γ_7^- , y

$$\phi(P_{5/2}, \Gamma_8^-) = f(r)|1, 3/2, 5/2, \pm 1/2\rangle + g(r)|3, 3/2, 5/2, \pm 1/2\rangle \quad (37)$$

para la representación Γ_8^- .

Los elementos de matriz de los operadores correspondientes al término cúbico pueden obtenerse, usando la técnica de elementos de matriz reducidos (Apéndice I) y de la siguiente expresión expuesta en el mismo apéndice:

$$\begin{aligned} & \langle L', J, F', F'_z | [P^{(2)} \times J^{(2)}]_m^{(4)} | L, J, F, F_z \rangle \\ & = 3(-1)^{F-F'_z} (2F+1) \begin{pmatrix} F & 4 & F \\ -F'_z & m & F_z \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} J & J & 2 \\ L' & L & 2 \\ F & F & 4 \end{Bmatrix} (J || J^{(2)} || J) (L' || P^{(2)} || L) \end{aligned} \quad (38)$$

con lo que al tomar en cuenta la contribución cúbica al hamiltoniano del modelo esférico, obtenemos el siguiente hamiltoniano radial para el estado $P_{5/2}(\Gamma_7^-)$

$$\begin{vmatrix} \left(1 + \frac{1}{5}\mu + \frac{24}{25}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{2}{5}\sqrt{6} \left(\mu - \frac{1}{5}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2}\right) \\ -\frac{2}{5}\sqrt{6} \left(\mu - \frac{1}{5}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2}\right) & \left(1 - \frac{1}{5}\mu + \frac{68}{175}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2}\right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} f_3(r) \\ g_3(r) \end{vmatrix} = 0, \tag{39}$$

mientras que para el estado $P_{5/2}(\Gamma_8^-)$

$$\begin{vmatrix} \left(1 + \frac{1}{5}\mu - \frac{12}{25}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{1}{5}\sqrt{6} \left(2\mu + \frac{1}{5}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2}\right) \\ -\frac{1}{5}\sqrt{6} \left(2\mu + \frac{1}{5}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2}\right) & \left(1 - \frac{1}{5}\mu + \frac{34}{175}\delta\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2}\right) + \frac{2}{r} - E \end{vmatrix} \times \begin{vmatrix} f_3(r) \\ g_3(r) \end{vmatrix} = 0. \tag{40}$$

El método empleado para encontrar los valores esperados de los anteriores hamiltonianos es el mismo que se empleó para el caso del hamiltoniano esférico de los aceptores.

Finalmente, para calibrar nuestro manejo del método numérico del hamiltoniano (10), calculamos las energías del estado base de los aceptores poco profundos del Si, Ge, AlSb y GaP, en los cuales se incluyeron todos los estados con $L = 0$ y $L = 2$ (segunda aproximación) en el límite de acoplamiento espín-órbita fuerte, reproduciéndose los resultados que se muestran en los artículos de Lipari y Baldereschi [2,3,24]. En este caso, la expresión para la función de onda incluye una representación de ondas s y d . Lo que conduce a considerar una función de prueba tipo s y cinco tipo d [3], como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} \phi(S_{3/2}) = & f(r)|0, 3/2, 3/2, 3/2\rangle + g_1(r)|2, 3/2, 7/2, 3/2\rangle \\ & + g_2(r)|2, 3/2, 5/2, 3/2\rangle + g_3(r)|2, 3/2, 3/2, 3/2\rangle \\ & + g_4(r)|2, 3/2, 7/2, -5/2\rangle + g_5(r)|2, 3/2, 5/2, -5/2\rangle \end{aligned} \tag{41}$$

3. CÁLCULO DE LOS PARÁMETROS DE LUTTINGER Y DE LA CONSTANTE DIELECTRICA PARA ALEACIONES DE SILICIO-GERMANIO

Para calcular los niveles energéticos de las impurezas aceptoras en aleaciones de SiGe necesitamos conocer los parámetros de Luttinger de la banda de valencia de las aleaciones. Usualmente se determinan los parámetros de banda de un semiconductor a partir de las masas efectivas encontradas experimentalmente mediante mediciones de resonancia

ciclotrónica. Este procedimiento ha sido muchas veces utilizado para encontrar las masas efectivas del Si y del Ge. No se han hecho, sin embargo, mediciones de las masas efectivas de las aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ mas que para casos en los que las concentraciones de Ge son muy altas [16].

Takeda, Taguchi y Sakata [17] han utilizado el método de Lawaetz [18] para estimar teóricamente los parámetros de banda A , B y C propuestos por Dresselhaus, Kip y Kittel [16]. Existen relaciones muy simples entre estos parámetros y los de Luttinger y nosotros utilizaremos el mismo método para determinarlos.

Utilizando la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ hasta segundo orden perturbativo es posible encontrar expresiones para los parámetros de la banda de valencia en términos de elementos de matriz del operador de momento lineal calculados entre estados de $\mathbf{k} = 0$ pertenecientes a la banda de valencia y a las bandas de conducción más cercanas [18]. Dada la naturaleza del operador de momento lineal es de esperarse que sus elementos de matriz sean inversamente proporcionales al valor de la constante de red. Empíricamente se ha observado, sin embargo, que esta correlación no existe. Considerando que la ionicidad y los electrones d del ion pueden alterar los estados entre los que se calcula el elemento de matriz de \mathbf{p} , Lawaetz [18] ha desarrollado un método que permite determinar los elementos de matriz de \mathbf{p} de un semiconductor del grupo IV o de compuestos semiconductores III-V o II-VI a partir de los elementos de matriz de un semiconductor de referencia.

Dado que las aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ son materiales homopolares podemos dejar de lado las consideraciones sobre los efectos de la ionicidad e incluir solamente la dependencia de los elementos de matriz de \mathbf{p} con respecto a la constante de red y a los efectos de los electrones d del ion. Las expresiones de los parámetros de Luttinger γ_1 , γ_2 y γ_3 para la banda de valencia de un material homopolar son

$$\gamma_1 = -\frac{(F + 2G + 2H_1 + 2H_2)}{3} - 1 + \frac{q}{2}, \quad (42)$$

$$\gamma_2 = -\frac{(F + 2G + H_1 - H_2)}{3} - \frac{q}{2}, \quad (43)$$

$$\gamma_3 = -\frac{(F - G + H_1 - H_2)}{6} + \frac{q}{2}, \quad (44)$$

en donde F , G , H_1 y H_2 son parámetros introducidos por Dresselhaus, Kip y Kittel y están dados por

$$F = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_x | \Gamma'_2, j \rangle|^2}{E_j}, \quad (45)$$

$$G = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_x | \Gamma'_{12}, j \rangle|^2}{E_j}, \quad (46)$$

$$H_1 = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_y | \Gamma_{15}, j \rangle|^2}{E_j} \quad (47)$$

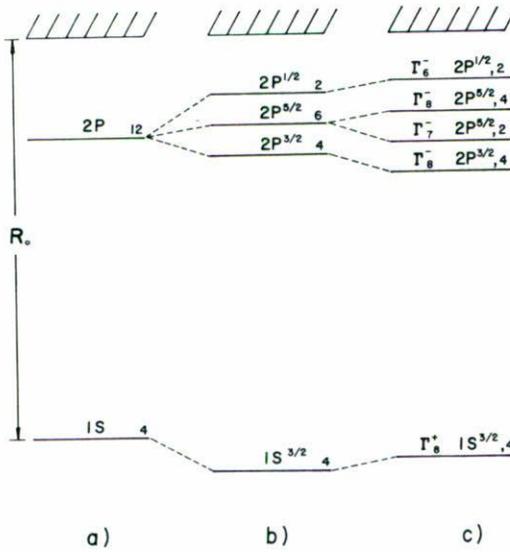


FIGURA 2. Esquema de la secuencia de estados en las bandas de silicio en el punto $\Gamma(\mathbf{k} = 0)$ de la zona de Brillouin recíproca. Para el germanio existe una secuencia similar de estados.

y

$$H_2 = -\frac{2}{m} \sum_j \frac{|\langle X | P_y | \Gamma_{25}, j \rangle|^2}{E_j} \tag{48}$$

En estas expresiones el estado $|X\rangle$ es una función de onda de tipo yz de los estados Γ'_{25} de la banda de valencia cuando se desprecia el acoplamiento espín-órbita y el índice j de las sumas corre sobre las diferentes bandas de conducción con energía electrónica E_j y de la simetría indicada. En la Fig. 2 se indican los estados electrónicos de las bandas de estos materiales relevantes para el presente cálculo. La energía de separación Δ'_{0j} entre las bandas resultantes del desdoblamiento de la banda de conducción Γ_{15} debido al efecto espín-órbita provee el parámetro adicional q dado por

$$q \approx \frac{4}{9m} \sum_j \frac{|\langle X | P_y | \Gamma_{15}, j \rangle|^2 \Delta'_{0j}}{E_j^2} \tag{49}$$

Restringiendo en (50) la suma sobre j , de manera que quede incluido solamente el estado más cercano de la banda de conducción de la simetría indicada, los parámetros F y H_1 pueden escribirse como

$$F = -\frac{E_p}{E_0} \quad \text{y} \quad H_1 = -\frac{E'_p}{E'_0} \tag{50}$$

en donde

$$E_p \equiv \frac{2}{m} |\langle X | P_x | \Gamma'_2 \rangle|^2 \tag{51}$$

y

$$E'_p \equiv \frac{2}{m} |\langle X | P_y | \Gamma'_{15} \rangle|^2 \tag{52}$$

son cantidades con unidades de energía asociadas a los principales elementos de matriz entre bandas del momento lineal, E_0 es la brecha (*gap*) fundamental directo $p - s$ y E'_0 la brecha $p - p$ en el punto Γ . Los parámetros G y H_2 son pequeños comparados con F y H_1 y no se escribirán en forma factorizada. Adicionalmente, q puede simplificarse escribiéndolo como

$$q = -\frac{2H_1\Delta'_0}{9E'_0} \tag{53}$$

Para introducir el efecto de los electrones d del ion sobre los elementos de matriz de p_x sin hacer cálculos de estructura de bandas detallados, Lawaetz nota la relación existente entre E_p y la fuerza de oscilador $f_{ii'}^x$, para una transición óptica desde un estado i de la banda de valencia hasta un estado i' de la banda de conducción. Dicha relación es

$$f_{ii'}^x = \frac{E_p}{3E_0} \tag{54}$$

Dado que las $f_{ii'}^x$ satisfacen la regla de suma

$$\sum_{ii'} f_{ii'}^x = 4\pi^3 ND, \tag{55}$$

en donde N es la concentración ideal de electrones de valencia (8 electrones por volumen diatómico) y D es un factor introducido por Van Vechten [19,20] para tomar en cuenta el efecto de los electrones d sobre los estados de la banda de valencia, de tal manera que ND es igual a la concentración efectiva N_{eff} de electrones de valencia. En el modelo de Penn [21] para la constante dieléctrica de baja frecuencia se encuentra

$$\epsilon(0) = 1 + \frac{4\pi e^2 \hbar^2 N_{\text{eff}} A}{mE_g^2}, \tag{56}$$

en donde $A = 1 - B + B^2/3$, $B = E_g/E_F$, E_F es la energía de Fermi de un gas de electrones libres y E_g es una banda prohibida promedio que varía como la constante de red elevada a la -2.48 . La expresión (56) fue obtenida por Penn [21] partiendo del modelo isótropo de dos bandas para un material covalente en el que se supone que el sistema electrónico no perturbado es un gas de electrones libres al que se aplica una generalización en tres dimensiones de los resultados perturbativos para una dimensión. El parámetro D fue encontrado por Van Vechten [20] comparando la Ec. (56) con sus valores experimentales.

Aunque la regla de suma considera la totalidad de los $f_{ii'}^x$, es razonable suponer que el mismo factor se aplica a cada uno de los $f_{ii'}^x$. Lawaetz escribe entonces

$$E_p = E_p(\text{Si})\delta_L, \tag{57}$$

TABLA I. Cantidades características del silicio que se utilizaron para el cálculo de los parámetros de Luttinger.

$E_p(\text{Si}) = 21.6 \text{ eV}$ [22]	
$E'_p(\text{Si}) = 14.4 \text{ eV}$ [22]	
$E_0(\text{Si}) = 4.07$ [19]	$E_0(\text{Ge}) = 0.89$ [22]
$E'_0(\text{Si}) = 3.4$ [22]	$E'_0(\text{Ge}) = 3.14$ [22]
$G(\text{Si}) = -0.75$ [22]	
$H_2(\text{Si}) = -0.19$ [22]	
$\Delta_0(\text{Si}) = 0.044$ [24]	$\Delta_0(\text{Ge}) = 0.296$ [22]
$E_g(\text{Si}) = 4.8$ [20]	
$a_0(\text{Si}) = 5.43$ [18]	
$\epsilon(\text{Si}) = 11.4$ [2,3]	
$\alpha = 1.23$ [18]	

con

$$\delta_L = [1 + \alpha(D - 1)] \left(\frac{a_{\text{Si}}}{a} \right)^2, \quad (58)$$

en donde $\alpha = 1.23$. Como el efecto de los electrones d afecta a los estados del borde de la banda de valencia, el mismo factor de escala δ_L puede ser usado también para E'_p , G y H_2 .

Utilizando valores de la banda prohibida E_0 que son conocidos con precisión, la expresión aproximada para E'_0 , debida a Van Vechten,

$$E'_0 = (3.40 \text{ eV}) \left(\frac{a}{a_{\text{Si}}} \right)^{-1.92}, \quad (59)$$

y la aproximación

$$\Delta'_0 \approx 0.64\Delta_0, \quad (60)$$

en donde Δ_0 es la separación de la banda de valencia en el punto Γ debida al efecto espín-órbita, Lawaetz [18] determinó los valores de E_p , E'_p , G y H_2 para el Si a partir de los parámetros de la banda de valencia del Ge medidos por Hensel y Susuki [22] por ser estos últimos los parámetros más precisos disponibles. Los valores encontrados son

$$\begin{aligned} E_p &= 21.6 \text{ eV}, & E'_p &= 14.4 \text{ eV}, \\ H_2 &= -0.19 & \text{y} & G = -0.75. \end{aligned} \quad (61)$$

Para poder aplicar el método de Lawaetz al cálculo de los parámetros de bandas de las aleaciones SiGe suponemos, como lo hacen Takeda, *et al.* [17], que la constante de red a de las aleaciones está dada por la regla de Vegard [23],

$$a = xa_{\text{Si}} + (1 - x)a_{\text{Ge}}, \quad (62)$$

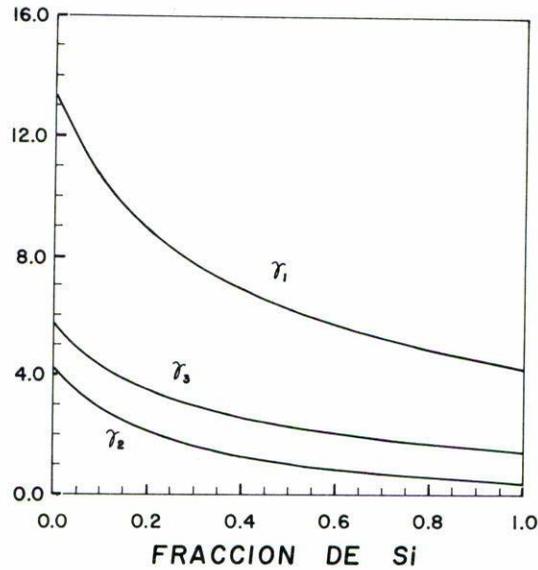


FIGURA 3. Los tres parámetros de Luttinger de las bandas de valencia calculados para las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

en donde a_{Si} (a_{Ge}) es la constante de red del Si (Ge) y x es la concentración de Si en la aleación. Suponemos también que la dependencia del parámetro D y de Δ_0 con respecto a la concentración de Si están dadas por expresiones similares,

$$D = xD_{\text{Si}} + (1 - x)D_{\text{Ge}} \quad (63)$$

y

$$\Delta_0 = x\Delta_{0,\text{Si}} + (1 - x)\Delta_{0,\text{Ge}}, \quad (64)$$

con $D_{\text{Si}} = 1$ y $D_{\text{Ge}} = 1.26$, $\Delta_{0,\text{Si}}$ y $\Delta_{0,\text{Ge}}$ se dan en la Tabla I.

Utilizando las Ecs. (42) a (64) es posible calcular los parámetros de Luttinger y la constante dieléctrica para cualquier valor de la concentración de Si en las aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$. Los resultados que hemos obtenido se muestran en las Figs. 3 y 4. En el cálculo de las constantes dieléctricas se empezó con el valor para el silicio usado por LA [2,3,4] y se calculó para todos los valores de fracciones de Ge hasta llegar al Ge puro. Nuestros resultados reproducen dentro de un 0.8 % el valor de la constante dieléctrica del Ge puro. Los valores numéricos correspondientes se presentan en la Tabla II.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Una vez conocidos los parámetros de Luttinger, para las diferentes concentraciones de Si en las citadas aleaciones, empleamos el modelo esférico del hamiltoniano de los aceptores Ec. (11) para calcular las energías de los estados $1S_{3/2}$, $2P_{1/2}$, $2P_{3/2}$ y $2P_{5/2}$. En las Figs. 5 y 6 se muestran los niveles de energía en meV y en Rydbergs, también reportados en las

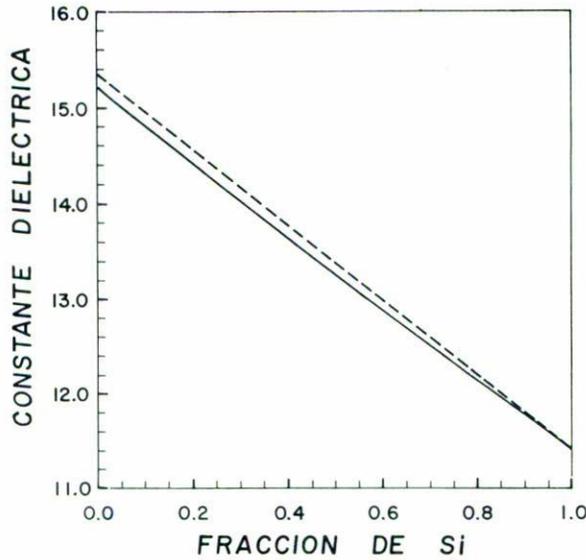


FIGURA 4. Constante dieléctrica estática calculada para las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, línea sólida. Para propósitos de comparación se muestra en la línea de trazos una simple interpolación lineal entre las constantes dieléctricas conocidas para el Si y el Ge.

Tablas III y IV. El cálculo efectuado en el presente trabajo dentro del modelo esférico se inicia desde el caso del silicio es decir de la aleación con fracción x de silicio igual a 1. Se disminuyó la concentración x del Si hasta llegar al Ge puro. Comparados con los resultados publicados para los estados aceptores de Si y del Ge, concuerdan hasta en dos o tres partes por diez mil [3].

Cuando incluimos la contribución cúbica al hamiltoniano esférico, consideramos sólo los estados que son afectados a primer orden. En este caso, son los estados $\phi(P_{5/2}, \Gamma_7^-)$ y $\phi(P_{5/2}, \Gamma_8^-)$ cuyas funciones de onda están definidas de la forma de las Ecs. (36) y (37), respectivamente. Finalmente, los elementos de matriz del término cúbico se calcularon a partir de la relación (38). La contribución del término cúbico del hamiltoniano depende de la magnitud relativa de los parámetros μ y δ . Por lo tanto es importante calcular y compararlos para las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

En la Fig. 7 presentamos la variación de los parámetros μ y δ del hamiltoniano (10) en función de la concentración de silicio. Se ve que la relación μ/δ varía desde ≈ 7 a ≈ 2 desde el extremo del germanio puro hasta el del Si, acercándose a ese último valor para concentraciones de Si de 50% en adelante. Como la intensidad relativa entre estos dos términos determina la importancia de la contribución del término cúbico del hamiltoniano (10), se ve que ésta es de mayor importancia relativa para las aleaciones del $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ con concentraciones de Ge menores al 50%.

La Fig. 8 muestra los resultados para las energías de los estados $2P_{5/2}(\Gamma_7^-, \Gamma_8^-)$ que obtuvimos al incluir las contribuciones cúbicas al hamiltoniano esférico, comparándolos con el resultado esférico los respectivos datos. En la Tabla V se presentan los datos respectivos con las energías reportadas expresadas en Rydbergs y meV. Se ve que la separación entre los dos estados en que se rompe este nivel $2P_{5/2}$ va desde el orden de 0.9 meV hasta más

TABLA II. Constante dieléctrica, parámetros de Luttinger y parámetros reducidos, para aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

x	ϵ_0	γ_1	γ_2	γ_3	μ	δ
.00	15.22	13.35	4.220	5.694	.7646	.1104
.05	15.02	11.74	3.451	4.903	.7363	.1236
.10	14.82	10.54	2.888	4.316	.7107	.1356
.15	14.62	9.603	2.457	3.864	.6876	.1464
.20	14.42	8.851	2.119	3.503	.6664	.1564
.25	14.22	8.231	1.846	3.208	.6470	.1655
.30	14.02	7.708	1.621	2.961	.6293	.1738
.35	13.83	7.259	1.434	2.752	.6130	.1815
.40	13.63	6.868	1.276	2.572	.5980	.1887
.45	13.44	6.524	1.140	2.415	.5840	.1953
.50	13.25	6.216	1.024	2.276	.5712	.2015
.55	13.06	5.939	.9218	2.153	.5593	.2073
.60	12.87	5.687	.8326	2.043	.5481	.2128
.65	12.68	5.456	.7539	1.943	.5378	.2179
.70	12.49	5.243	.6841	1.852	.5283	.2227
.75	12.31	5.045	.6219	1.769	.5193	.2273
.80	12.12	4.861	.5663	1.692	.5110	.2316
.85	11.94	4.687	.5162	1.622	.5032	.2358
.90	11.76	4.524	.4711	1.556	.4960	.2398
.95	11.58	4.370	.4303	1.495	.4892	.2436
1.00	11.40	4.223	.3933	1.437	.4829	.2472

de 3 meV, al ir desde el Ge hasta el Si, lo que en realidad son correcciones importantes (del orden de ≈ 0.1 Ry) para estos niveles. La corrección esperada para los otros niveles es inferior en magnitud [2]. Para el estado base se espera que sea medianamente importante, y es del orden de 0.2 meV para el caso del estado $1S_{3/2}$ en el Ge, del orden de 1 meV para concentraciones del 50% de Si en la aleación de SiGe, y 2.5 meV para el Si puro [25].

De las Figs. 5 y 6 se ve que partiendo del Si existe un cambio inicialmente casi lineal para bajas concentraciones de Ge para la energía de ionización del estado base $1S_{3/2}$. De hecho, calculamos que el cambio en esta energía de ionización es de 5.5, 10.7, 15.5, 20.1, 24.5 y 28.4% para el estado base, con respecto a la del mismo estado en el silicio, para aleaciones de SiGe con fracciones de Ge de 5, 10, 15, 20, 25 y 30%, respectivamente. Esta casi coincidencia cuantitativa entre el cambio porcentual de la energía de ionización del estado base y el de la fracción de átomos de Ge en la aleación $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ se mantiene para el caso en que se hace el cálculo de la misma energía de ionización incluyendo el término cúbico [25].

Es bien sabido que el modelo de la teoría de masas efectivas proporciona una energía de ionización de los estados excitados con buena exactitud [1,2,3], lo cual es particularmente cierto para el caso de los aceptores en el Ge [4]. Sin embargo, para el estado base este modelo no da resultados correctos debido a que la función de onda $1S_{3/2}$ tiene una proba-

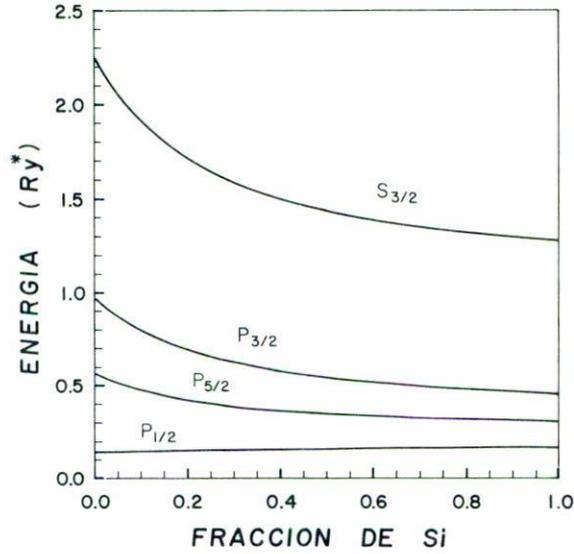


FIGURA 5. Resultados del hamiltoniano "esférico" para los estados $1S_{3/2}$, $2P_{1/2}$, $2P_{3/2}$ y $2P_{5/2}$ de aceptores para las aleaciones de Si_xGe_{1-x} , expresados en Rydbergs.

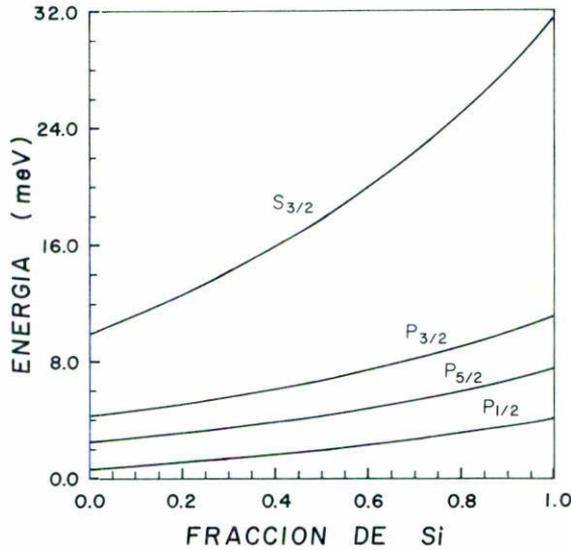


FIGURA 6. Resultados del hamiltoniano "esférico" para los estados $1S_{3/2}$, $2P_{1/2}$, $2P_{3/2}$ y $2P_{5/2}$ de aceptores para las aleaciones de Si_xGe_{1-x} , expresados en unidades de meV.

bilidad finita de encontrarse en el volumen del ion aceptor, sujetando en consecuencia al hueco a todo el detalle de la estructura del potencial electrostático de este ion, la cual varía con la naturaleza química del mismo [1,2,3]. Esto se traduce en el hecho de que diferentes átomos aceptores en el Si o el Ge, tienden a tener diferentes energías de ionización pero casi idéntico espectro de estados excitados [3,4,5]. Ante esta situación, la utilidad de los presentes resultados consiste en que nuestros cálculos proporcionan una buena estimación

TABLA III. Energías de amarre en Rydbergs efectivos para los niveles energéticos más bajos en impurezas aceptoras en aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

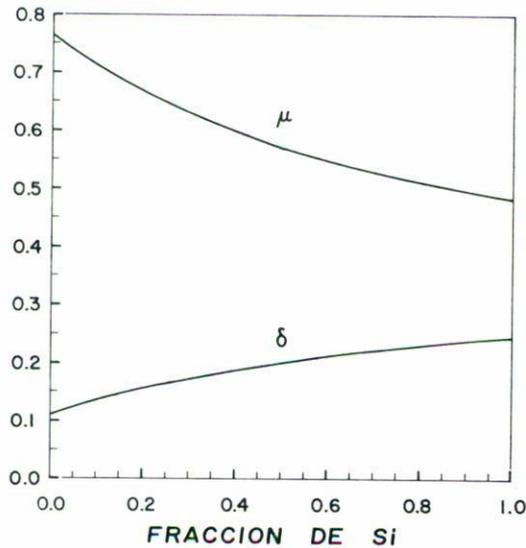
x	$1S_{3/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$	$2P_{5/2}$
.00	2.2525	.1411	.9730	.5678
.05	2.0551	.1435	.8705	.5141
.10	1.9103	.1457	.7951	.4749
.15	1.7999	.1478	.7374	.4451
.20	1.7131	.1497	.6917	.4218
.25	1.6433	.1515	.6548	.4031
.30	1.5859	.1532	.6244	.3878
.35	1.5380	.1548	.5988	.3751
.40	1.4976	.1563	.5772	.3644
.45	1.4630	.1577	.5585	.3553
.50	1.4332	.1590	.5423	.3475
.55	1.4072	.1602	.5282	.3407
.60	1.3844	.1614	.5157	.3347
.65	1.3643	.1625	.5047	.3295
.70	1.3465	.1635	.4948	.3249
.75	1.3306	.1645	.4860	.3208
.80	1.3165	.1654	.4781	.3172
.85	1.3037	.1662	.4710	.3139
.90	1.2922	.1671	.4645	.3110
.95	1.2819	.1678	.4587	.3083
1.00	1.2725	.1685	.4533	.3060

del cambio porcentual esperado en las energías de amarre de una impureza aceptora cuando se pasa del caso en el que ésta se encuentra en una red de Si puro a aquel en el que está en la red de una aleación $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$. Creemos que esto debe ser cierto aun para la energía de amarre del estado base.

Los resultados del hamiltoniano (10) para los aceptores en Ge y Si han sido comparados ya en la literatura con resultados experimentales [4]. Para los aceptores en las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ no encontramos en la literatura resultados espectroscópicos publicados que sirvan de comparación, pero existen resultados para aceptores en estos materiales pero en superredes de Si/ $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ [26]. En base a los resultados del presente trabajo se puede argumentar que en esas superredes la energía de ionización del estado base se incrementa al decrecer el tamaño de las capas de la aleación de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ por debajo de 100 Å, del orden de 50 meV para aceptores de boro en Si/ $\text{Si}_{0.90}\text{Ge}_{0.10}$, y Si/ $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, comparado con 44 meV en el Si [26], y calculando los cambios relativos correspondientes de la Tabla III o de la Fig. 5 se esperarían energías del orden de 40 y 34 meV respectivamente, para el aceptor de boro en estas aleaciones. Se espera que al tenerse aleaciones suficientemente puras en bulto y requerirse estudiar estados aceptores por métodos espectroscópicos, los cálculos del presente trabajo sirvan de base teórica para la identificación y análisis de las transiciones observadas.

TABLA IV. Energías de amarre en meV para los niveles energéticos mas bajos en impurezas aceptoras en aleaciones $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

x	$1S_{3/2}$	$2P_{1/2}$	$2P_{3/2}$	$2P_{5/2}$
.00	9.899	0.620	4.276	2.495
.05	10.551	0.737	4.469	2.640
.10	11.227	0.856	4.673	2.791
.15	11.930	0.980	4.887	2.950
.20	12.662	1.107	5.113	3.118
.25	13.427	1.238	5.351	3.294
.30	14.228	1.375	5.602	3.480
.35	15.069	1.517	5.867	3.675
.40	15.953	1.665	6.148	3.882
.45	16.883	1.820	6.445	4.100
.50	17.863	1.982	6.760	4.331
.55	18.897	2.152	7.093	4.575
.60	19.990	2.330	7.447	4.833
.65	21.148	2.519	7.823	5.108
.70	22.373	2.717	8.222	5.399
.75	23.674	2.926	8.647	5.708
.80	25.056	3.148	9.100	6.037
.85	26.525	3.382	9.582	6.387
.90	28.089	3.631	10.097	6.760
.95	29.755	3.896	10.647	7.157
1.00	31.535	4.176	11.234	7.582

FIGURA 7. Parámetros μ y δ calculados para las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$.

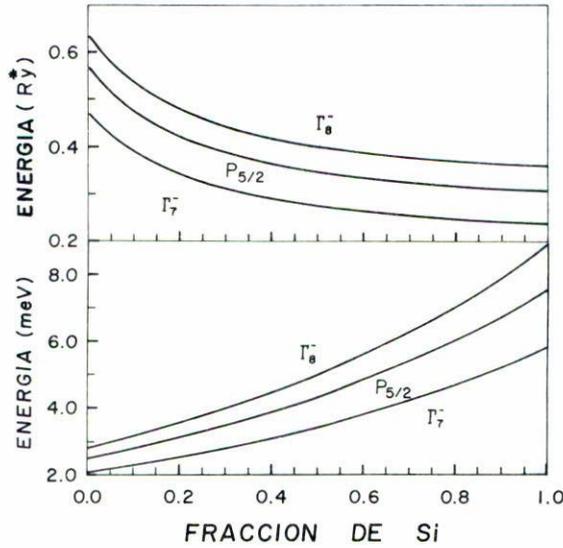


FIGURA 8. Resultados del hamiltoniano incluyendo el término cúbico para los dos estados $2P_{5/2}$, clasificados como Γ_7^- y Γ_8^- de aceptores para las aleaciones de $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, expresados en unidades de meV y Rydbergs.

APÉNDICE I. ELEMENTOS DE MATRIZ REDUCIDOS

Los elementos de matriz reducidos de los productos escalar ($P^{(2)} \cdot J^{(2)}$) y vectorial ($P^{(2)} \times J^{(2)}$) entre los estados propios del momento angular total $\vec{F} = \vec{L} + \vec{J}$ se evalúan fácilmente por medio de la técnica de “elementos de matriz reducidos”, que expresan a los elementos $\langle L', J, F, F_z | P^{(2)} \cdot J^{(2)} | L, J, F, F_z \rangle$ y a los elementos $\langle L', J, F, F_z | P^{(2)} \times J^{(2)} | L, J, F, F_z \rangle$ en términos de los símbolos $3j$, $6j$ y $9j$, los cuales calculamos numéricamente, y los elementos de matriz reducidos $(J || J^{(2)} || J)$ y $(L' || P^{(2)} || L)$, los cuales se calculan a partir de las siguientes expresiones [7]

$$(L - 2 || P^{(2)} || L) = -3\hbar^2 \left(\frac{L(L-1)}{2L-1} \right)^{1/2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2L+1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L^2-1}{r^2} \right),$$

$$(L || P^{(2)} || L) = \sqrt{3}\hbar^2 \left(\frac{L(2L+1)(2L+2)}{(2L-1)(2L+3)} \right)^{1/2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} \right),$$

$$(L + 2 || P^{(2)} || L) = -\frac{3}{2}\hbar^2 \left(\frac{(2L+2)(2L+4)}{2L+3} \right)^{1/2} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2L+1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L(L+2)}{r^2} \right),$$

$$(L || P^{(2)} || L) = 0 \quad \text{si} \quad |L' - L| = 0, 2$$

y

$$(J || J^{(2)} || J) = \frac{1}{2} \frac{3}{2} [(2J-1)(2J)(2J+1)(2J+2)(2J+3)]^{1/2} = \frac{1}{2} \frac{3}{2} 6.$$

TABLA V. Energías de amarre para los estados Γ_7^- y Γ_8^- obtenidas considerando a primer orden el efecto del término cúbico sobre el estado $2P_{5/2}$.

x	Γ_7^-		Γ_8^-	
	Rydbergs efectivos	meV	Rydbergs efectivos	meV
.00	.4706	2.068	.6358	2.794
.05	.4237	2.175	.5781	2.968
.10	.3893	2.008	.5361	3.150
.15	.3630	2.406	.5041	3.341
.20	.3424	2.531	.4794	3.543
.25	.3258	2.662	.4596	3.756
.30	.3121	2.800	.4435	3.979
.35	.3007	2.946	.4302	4.215
.40	.2911	3.100	.4190	4.463
.45	.2828	3.263	.4095	4.726
.50	.2756	3.435	.4014	5.003
.55	.2694	3.618	.3945	5.297
.60	.2639	3.811	.3884	5.608
.65	.2591	4.016	.3831	5.939
.70	.2547	4.233	.3785	6.289
.75	.2509	4.464	.3744	6.661
.80	.2474	4.709	.3708	7.058
.85	.2443	4.970	.3677	7.480
.90	.2414	5.247	.3648	7.930
.95	.2388	5.544	.3623	8.411
1.00	.2365	5.860	.3601	8.925

APÉNDICE II

Se usa como base para las combinaciones lineales de funciones que se transformen de acuerdo a una representación irreducible dada del grupo puntual O_h , las funciones propias de J^2 y J_z que tienen $J = 5/2$ [8]

$$\begin{aligned}
 &|5/2, 5/2\rangle, \quad |5/2, 3/2\rangle, \quad |5/2, 1/2\rangle, \\
 &|5/2, -1/2\rangle, \quad |5/2, -3/2\rangle, \quad |5/2, -5/2\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{A2.1}$$

Se forma una función arbitraria

$$|x\rangle = \sum_{MJ} C_{MJ} |5/2, M_J\rangle,
 \tag{A2.2}$$

a esa función se le aplica el operador

$$\mathcal{P}_{\kappa\kappa}^{(j)} = \frac{\ell_j}{h} \sum_R \Gamma^{(j)}(R)_{\kappa\kappa}^* P R
 \tag{A2.3}$$

para obtener una función del renglón κ de la representación irreducible j , $|\phi_\kappa^{(j)}\rangle$, que en este caso j será la representación Γ_7 ó la representación Γ_8 del grupo cúbico O_h .

Para saber como actúa P_R sobre el vector $|x\rangle$, encontramos una representación de matrices (6×6) para cada P_R (R representa a las rotaciones del grupo cúbico). Para eso dados los ángulos de Euler para cada rotación se utiliza la expresión

$$D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)_{mm'} = e^{-im'\alpha} e^{-im\gamma} \sum_{\kappa} \frac{(-1)^\kappa \sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\kappa!(j+m-\kappa)!(j-m'-\kappa)!(\kappa+m'-m)!} \\ \times (\cos(\beta/2))^{2j-2\kappa-m'+m} (-\sin(\beta/2))^{2\kappa+m'-m}. \tag{A2.4}$$

Para obtener las funciones de la representación Γ_8 necesitamos las matrices $\Gamma_8(R)$ que son de dimensión (4×4) . Se obtienen también de la expresión (A2.4) poniendo $j = 3/2$, una vez que se obtiene $|\phi_\kappa^{(j)}\rangle$ sus asociados se obtienen aplicando $\mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)}$ a $|\phi_\kappa^{(j)}\rangle$

$$|\phi_\lambda^{(j)}\rangle = \mathcal{P}_{\lambda\kappa}^{(j)} |\phi_\kappa^{(j)}\rangle \tag{A2.5}$$

Para obtener las funciones de la representación Γ_7 se necesita conocer las matrices $\Gamma_7(R)$. Estas se obtienen a partir de las que se obtienen de (A2.4) poniendo $j = 1/2$ y cambiando el signo de las matrices asociadas a rotaciones C_4 y a rotaciones C_2 .

REFERENCIAS

1. W. Kohn and J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* **97** (1955) 883.
2. A. Baldereschi and N.O. Lipari, *Phys. Rev.* **B 8** (1973) 2697.
3. A. Baldereschi and N.O. Lipari, *Phys. Rev.* **B 9** (1974) 1525.
4. N.O. Lipari and A. Baldereschi, *Solid State Commun.* **25** (1978) 665.
5. A.K. Ramdas and S. Rodríguez, *Rep. Prog.Phys.* **44** (1981) 1297.
6. E.E. Haller, W.L. Hansen and F.S.Goulding, *Adv. in Physics* **30** (1980) 93.
7. L. Svob, Y. Marfaing, M. Hoclet, P. Plumelle and M. Vandervyver, *Solid State Commun.* **28** (1978) 895.
8. J.C. Bean, *Science* **230** (1985) 127.
9. S. Froyen, D.M.Wood, and A. Zunger, *Phys.Rev.* **B 36** (1987) 4547.
10. Ver por ejemplo: *Semiconductors and Semimetals* **24**. R.K. Willardson and A.C. Beer, Editors. Academic Press, N.Y. (1987).
11. R.C. Miller, A.C. Gossard, W.T. Tsang, and O. Muntenau, *Phys. Rev.* **B 25** (1982) 3871; M.H. Menadier, J.A. Brum, C. Delalande and M. Voss, *J. Appl. Phys.* **58** (1985) 4307; A.A. Reeder, B.D. McCombe, F.A. Chambers and G.P. Devane. *Phys. Rev.* **B 38** (1988) 4318.
12. H. Navarro, R.A. Brito-Orta, W.R. Datars, T. Timusk and D. Houghton. Enviado para su publicación (1991).
13. A.R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, Princeton, N.J. (1974).
14. A. Ralston and H.S. Wilf, *Mathematical Methods for Digital Computers*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1960).
15. N.O. Lipari, *Il Nuovo Cimento* **23** (1974) 51.
16. G. Dresselhaus, A.F. Kipp and C. Kittel, *Phys. Rev.* **98** (1955) 368.

17. K. Takeda, A. Taguchi, and M. Sakata, *J. Phys. C.* **16** (1983) 2237.
18. P. Lawaetz, *Phys. Rev.* **B 4** (1971) 3460.
19. A. Van Vechten, *Phys. Rev.* **187** (1969) 1007.
20. A. Van Vechten, *Phys. Rev.* **182** (1969) 891.
21. D. Penn, *Phys. Rev.* **128** (1957) 2093.
22. J.C. Hensel and K. Suzuki, *Phys. Rev. Lett.* **22** (1969) 838.
23. L. Vegard and M. Shjielderap, *Zeitung der Phys.* **18** (1971) 93.
24. S. Zwerdling, J.K. Button, B. Lax and L.M. Roth, *Phys. Rev. Lett.* **4** (1960) 173.
25. Tomás Tello Mtz., Tesis de Maestría, Inst. de Física, Universidad Autónoma de Puebla, diciembre (1991).
26. H. Navarro, T. Timusk, W.R. Datars y D. Houghton, *Memorias del Congreso de Investigación de 1991* de la Soc. Mexicana de Superficies y Vacío, San Luis Potosí, SLP, septiembre 1991.