

內 容

本年度的期中報告分為兩部份。(一)矽/矽鍺兆赫波發射器之研究。描述目前實驗進展的狀況。(二)成長於矽基板之受應力矽鍺磊晶層中受子態理論模型。為目前理論計算的成果。

矽/矽鍺兆赫波發射器之研究

一、介紹

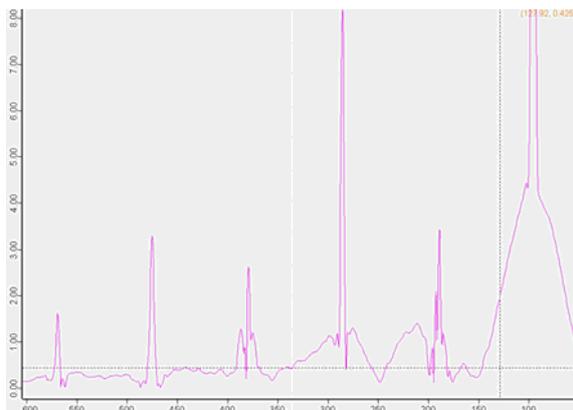
由於近年來兆赫波發射源的研發受到重視，除了吸收頻譜外，利用傅立葉紅外光譜儀 (FTIR) 作放射頻譜的量測顯得益趨重要 [1][2]。本實驗室目前除了將吸收頻譜量測技術熟悉之外，也開始著手於放射頻譜技術之建立，相關資訊將於下節結果與討論中概述。

二、研究報告

階段性成果針對以下四點分別陳述：(I) 配電問題(II)吸收頻譜量測(III)分時步進量測及(IV)鎖相放大器與 chopper 之使用。

I. 配電問題

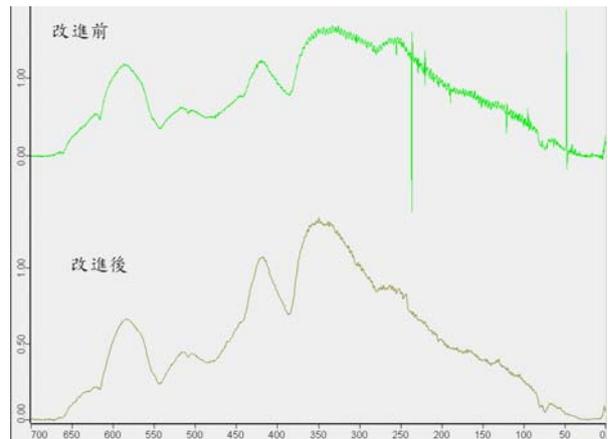
適逢實驗室搬遷，儀器所需相關之水、電、氣體均需重新配管佈線，因而發現一些除機台 (FTIR) 本身以外足以影響光譜正確量測之因素，首要為供電之接地。由於 FTIR 需搭配真空幫浦使用，FTIR 所使用電源為 220V 而部分真空幫浦使用 110V。兩者之地線若不短路則量到之干涉圖與穿透光譜會有相當程度的雜訊與特殊的譜線，如下圖



改進的方法有二：(1) 將所有量測儀器與真空幫浦共地或 (2) 將所有量測儀器與所有

幫浦個別共地並於其間之 bellow tubes (用以連接機台與幫浦) 以塑膠之中心圈 (center ring) 與迫緊環 (clamp) 做電性絕緣。方法 (2) 因可隔絕幫浦所產生之運轉雜訊所以為最終選擇。

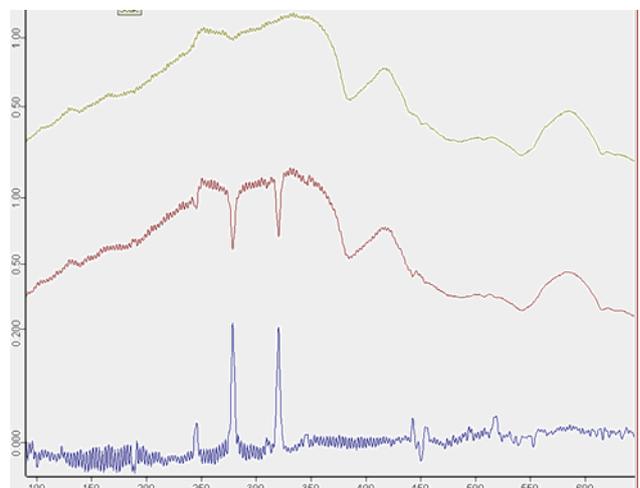
改進前後之穿透頻譜



II. 吸收頻譜量測

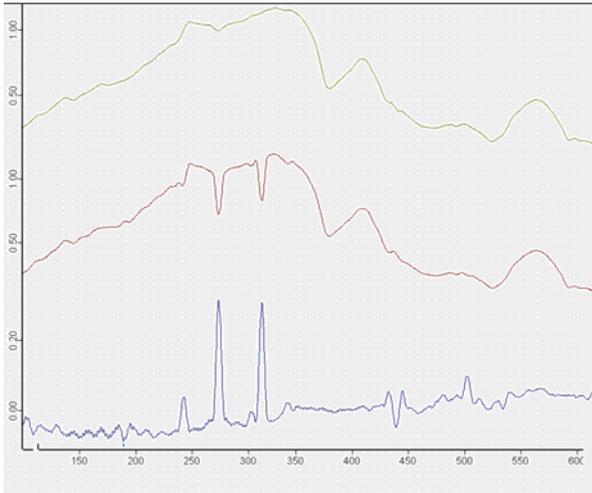
將配電問題解決後即開始量測吸收頻譜，所用樣品為參雜少量硼的矽晶片 (阻值 1-10 Ωcm ，濃度約 10^{15} cm^{-3}) 與另一片同樣硼參雜但高阻值 (約 7000 Ωcm) 之矽晶片為參考樣品做吸收頻譜量測。量測如下：

參考頻譜、樣品頻譜、吸收頻譜

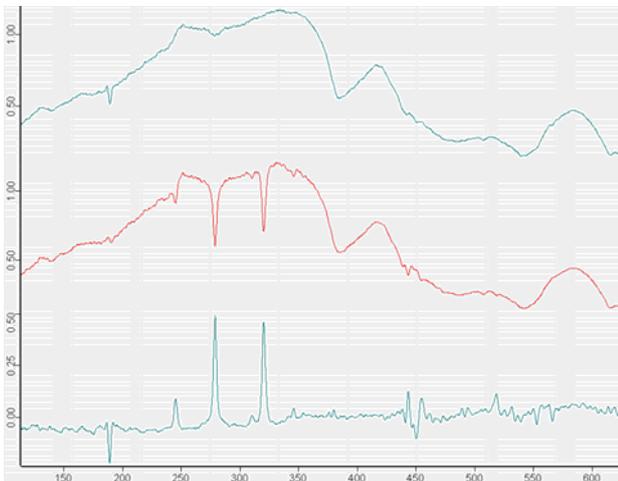


頻譜解析度受限於矽晶片的厚度，雖可透過軟體之 smoothing 與 straight line generation 消除，但如此便較難做定量之分析。

Smoothing 後結果

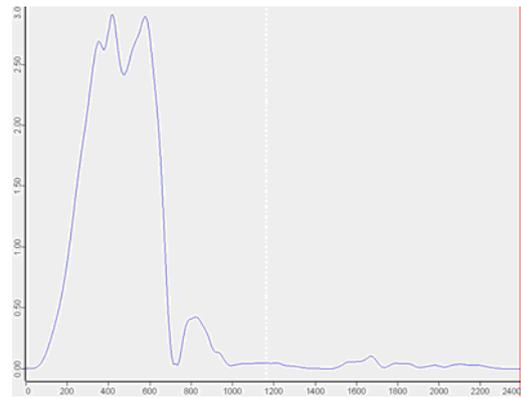


Straight line generation 後結果

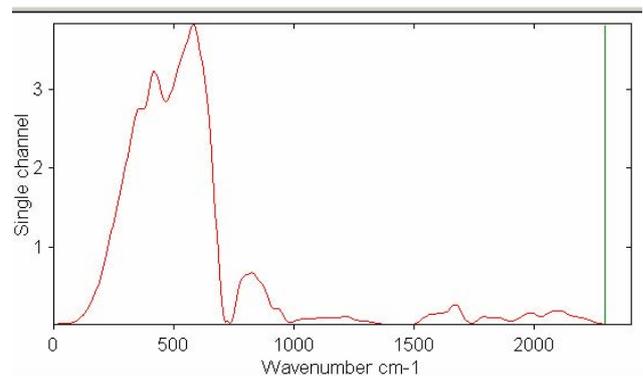
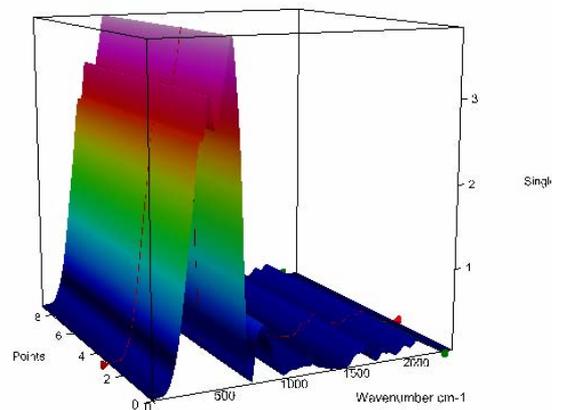


III. 分時步進量測

為驗證 FTIR 分時步進功能及穩定度，利用內建之光源與偵測器(內建或外接)量測分時步進頻譜與一般頻譜比較其一致性。一般頻譜



分時步進頻譜(各個時間點之頻譜均與一般頻譜同，為預期之結果)

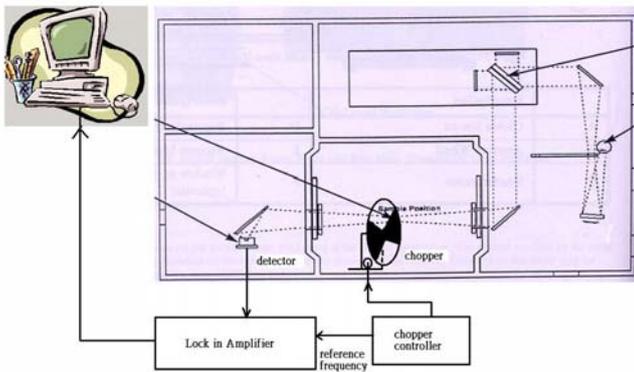


IV. 鎖相放大器與 chopper 之使用

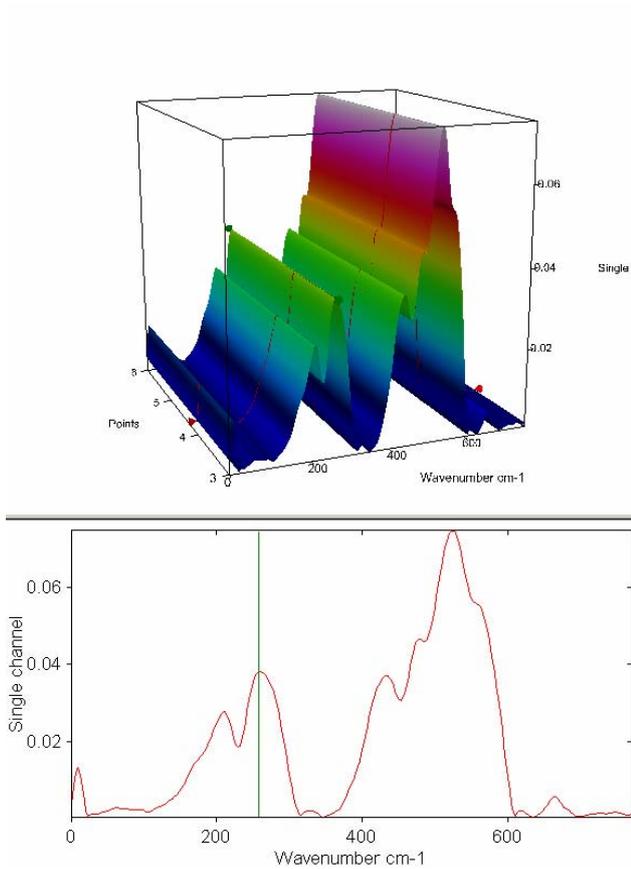
為建立放射頻譜量測技術，在分時步進量測模式下使用 chopper 對 FTIR 內建光源作調變以模擬放射光源並配合鎖相放大器(LIA)解調出所需訊號。需注意 LIA 要以 AC coupling 接收偵測器訊號並將解調出 DC 值由 FTIR 之 ADC 以 DC coupling 方式接收。所量出與期望有差距，需再詳細探討原因。

線路架構

[2] H-W Hubers, S G Pavlov and V N Shastin, *Semicond. Sci. Technol.* **20**, S211–S221, 2005.



透過 chopper 調變與 LIA 解調後之頻譜



三、 文獻

[1] P.-C. Lv, R. T. Troeger, X. Zhang, T. N. Adam, and J. Kolodzey, M. A. Odnoblyudov and I. N. Yassievich, *J. Appl. Phys.* **98**, 093710, 2005.

成長於矽基板之受應力矽鍺磊晶層中 受子態理論模型

一、 中文摘要

本研究中我們提出一個理論模型用以計算成長於矽基板之受應力矽鍺磊晶層中受子態。我們的理論是以 Luttinger-Kohn 之考慮六條價帶的理論出發，並利用 Bir-Pikus 應力理論描述長於矽基板之矽鍺層受應力的情形。藉由群論的技巧我們可以將雜質態的波函數分成不同的對稱性並且得到不同對稱性之雜質態角度部份的解。如此不但有助於理論分析也可以減少電腦計算的負擔。我們的計算結果可以得到雜質束縛態隨著鍺含量變化的情形。在鍺含量為零(也就是純矽)的特殊情況下我們的計算結果會和其它研究者實驗結果吻合。但對於鍺含量不為零的情況下至今仍無實驗數據。因此我們的理論計算預期會對將來相關研究極具參考價值。

關鍵詞： SiGe, Si, strain, acceptor Luttinger-Kohn

Abstract

In this research, we propose a theoretical model to calculate the shallow acceptor levels of strained SiGe grown on Si substrate. The theory is based on Luttinger-Kohn 6-band model included the strain effect of SiGe which is grown on Si by using Bir-Pikus stress theory. By using group theory, we can classify the wave function of acceptor state into different symmetries, and get its angular part belonging to different symmetries. It is not only beneficial for the analysis, but also reduces the loading of computation. The behaviors of acceptor states which change with the Ge fraction have been investigated. Our results have good agreement with other experiment data for the pure silicon case, while for strained SiGe case there has been

no experiment data which have been shown before. Therefore our research would be valuable for the related researches in the future.

二、 介紹

近年來，由於快速元件及光學元件快速發展，使得矽鍺材料重新引起許多研究員的興趣。2001 年 Kagan 教授的研究群証實了摻雜硼的矽鍺量子井在強電場下可產生兆赫波 (Terahertz wave) 激發放射 [1]。然而矽鍺材料受子態階相關的理論研究確不多。雖然早在六零年代，p-型矽與鍺早已有清楚準確的光譜 [2, 3]。但直至九零年代初 Buczko 和 Bassani 才針對矽與鍺摻雜 III 族的受子態階作比較完整的計算 [4]。然而其理論確無法延伸至受應力的矽鍺材料。因此在我們的研究中我們將發展一套受子態階的理論計算模型不僅可用於一般塊狀半導體，亦可計算受應力之半導體材料中的雜質能階。

三、 研究報告

3-1 理論架構

3-1-1. 受子系統的理論模型

對於矽鍺而言，因為其價帶分裂能 (Split-off energy) 很小使得其輕電洞能帶與分離電洞能帶之間的耦合不能乎略。因此我們從 Luttinger-Kohn 的考慮六條價帶耦合之等效質量理論出發 [5]，並利用 Bir-Pikus 的應力理論 [6] 來描述 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 成長在 Si 基板上受應力而形變的情形。此時，系統的等效質量方程可寫為：

$$H\mathbf{F}(\mathbf{r}) = E\mathbf{F}(\mathbf{r})$$

其中

$$H = \begin{bmatrix} P+Q+V & -S & R & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q+V & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \frac{\sqrt{3}}{2}S \\ R^2 & 0 & P-Q+V & S & \frac{\sqrt{3}}{2}S & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^2 & S & P+Q+V & -\sqrt{2}R^2 & \frac{-1}{\sqrt{2}}S \\ \frac{-1}{\sqrt{2}}S^\dagger & -\sqrt{2}Q & \frac{\sqrt{3}}{2}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta+V & 0 \\ \sqrt{2}R^2 & \frac{\sqrt{3}}{2}S & \sqrt{2}Q & \frac{-1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta+V \end{bmatrix}$$

$$P = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + P_\epsilon$$

$$Q = -\frac{\gamma_2}{\gamma_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + Q_\epsilon$$

$$R = \sqrt{3}\frac{\gamma_2}{\gamma_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - i2\sqrt{3}\frac{\gamma_3}{\gamma_1}\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} + R_\epsilon$$

$$S = -2\sqrt{3}\frac{\gamma_3}{\gamma_1}\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial z} + S_\epsilon$$

其中 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ 為 Luttinger-Kohn 參數。 Δ 為價帶分裂能。 $P_\epsilon, Q_\epsilon, R_\epsilon, S_\epsilon$ 為晶體受應力下產生的應力項。在 Bixial Strain 的情況下 R_ϵ 與 S_ϵ 皆為零。 P_ϵ 與 Q_ϵ 可表示為

$$P_\epsilon = -a_v(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33})$$

$$Q_\epsilon = -\frac{b}{2}(\epsilon_{11} + \epsilon_{22} - 2\epsilon_{33})$$

a_v 與 b 為 Bir-Pikus 的形變位能 (deformation potential)。 ϵ_{ij} 為對稱形變張量 (Strain Tensor) 的元素。在此為

$$\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \frac{a_{Si} - a_{SiGe}(x)}{a}$$

$$\epsilon_{33} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\epsilon_{11}$$

C_{ij} 為晶體的彈性係數 (elastic constant)。 a_{Si} 和 $a_{SiGe}(x)$ 分別是 Si 和 $Si_{1-x}Ge_x$ 的晶格常數 (Lattice constant)。在此研究中, $Si_{1-x}Ge_x$ 所有的參數除了晶格常數是由 Ref[7] 決定之外。其它的參數我們都假設為介

於 Si 與 Ge 之間的線性變化。

V 為雜質的位能, 其僅與徑向座標有關。考慮屏蔽效應 (Screening effect) 與 Centrell cell effect[7] 後將其寫半經驗的形式。

$$V = \frac{2}{r}[1 + (\epsilon - 1)e^{-\alpha r}] + \frac{A}{r}e^{-\beta r}$$

在此 ϵ 為材介電係數。 A, α 和 β 為半實驗參數。

3-1-2. 受子波函數基底的選取

當 $Si_{1-x}Ge_x$ 成長在 (001) Si 基板上, 由於受到應力的影響, 其對稱會性從 T_d 群降低為 D_{2d} 群, 其 Character Table 見表 3.1。且由於在 3-1-2 節中我們所考慮的等效質量方程的具有空間反轉的對稱性 (inversion symmetry), 因此根據波函數的對稱性, 我們可將雜質態分為四類 $\Gamma_6^+, \Gamma_7^+, \Gamma_6^-$ 和 Γ_7^- 。

其中 + 與 - 代表 envelope function ($\mathbf{F}(\mathbf{r})$) 的宇稱性 (parity)。利用這些對稱的特性, 我們在求雜質態的 envelope function 時, 我們僅須考慮滿足對稱性的基底, 而不須要考慮整個空間的完全集 (Complete set)。如此不但有助於理論的分析, 更可以減少電腦計算的負擔。

| D_{2d} | 1E | 1R | C_z, RC_z | (C_x, C_y) $R(C_x, C_y)$ | $2S_4$ | $2RS_4$ | $2\sigma_d, 2R\sigma_d$ |
|------------|----|----|-------------|-------------------------------|-------------|-------------|-------------------------|
| Γ_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Γ_2 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 |
| Γ_3 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| Γ_4 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 |
| Γ_5 | 2 | 2 | -2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Γ_6 | 2 | -2 | 0 | 0 | $\sqrt{2}$ | $-\sqrt{2}$ | 0 |
| Γ_7 | 2 | -2 | 0 | 0 | $-\sqrt{2}$ | $\sqrt{2}$ | 0 |

表 3.1 D_{2d} 群的 Character Table

利用群論中投影運子的技巧, 我們可求得此不同對稱性波函數角度部份 (angular part) 的解, 表示如下

$$\begin{aligned}\psi^{\Gamma_6^-} = & (f_{11}^{\Gamma_6^-} Y_0^0 + f_{12}^{\Gamma_6^-} Y_2^0 + f_{13}^{\Gamma_6^-} Y_4^0 + f_{14}^{\Gamma_6^-} Y_4^4 + f_{15}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-4}) \phi_{3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{21}^{\Gamma_6^-} Y_2^1 + f_{22}^{\Gamma_6^-} Y_4^1 + f_{23}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-3}) \phi_{1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{31}^{\Gamma_6^-} Y_2^2 + f_{32}^{\Gamma_6^-} Y_2^{-2} + f_{33}^{\Gamma_6^-} Y_4^2 + f_{34}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-2}) \phi_{-1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{41}^{\Gamma_6^-} Y_2^{-1} + f_{42}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-1} + f_{43}^{\Gamma_6^-} Y_4^3) \phi_{-3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{51}^{\Gamma_6^-} Y_2^1 + f_{52}^{\Gamma_6^-} Y_4^1 + f_{53}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-3}) \phi_{1/2}^{(1/2)} \\ & + (f_{61}^{\Gamma_6^-} Y_2^2 + f_{62}^{\Gamma_6^-} Y_2^{-2} + f_{63}^{\Gamma_6^-} Y_4^2 + f_{64}^{\Gamma_6^-} Y_4^{-2}) \phi_{-1/2}^{(1/2)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi^{\Gamma_7^+} = & (f_{11}^{\Gamma_7^+} Y_2^{-1} + f_{12}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-1} + f_{13}^{\Gamma_7^+} Y_4^3) \phi_{3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{21}^{\Gamma_7^+} Y_0^0 + f_{22}^{\Gamma_7^+} Y_2^0 + f_{23}^{\Gamma_7^+} Y_4^0 + f_{24}^{\Gamma_7^+} Y_4^4 + f_{25}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-4}) \phi_{1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{31}^{\Gamma_7^+} Y_2^1 + f_{32}^{\Gamma_7^+} Y_4^1 + f_{33}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-3}) \phi_{-1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{41}^{\Gamma_7^+} Y_2^2 + f_{42}^{\Gamma_7^+} Y_2^{-2} + f_{43}^{\Gamma_7^+} Y_4^2 + f_{44}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-2}) \phi_{-3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{51}^{\Gamma_7^+} Y_0^0 + f_{52}^{\Gamma_7^+} Y_2^0 + f_{53}^{\Gamma_7^+} Y_4^0 + f_{54}^{\Gamma_7^+} Y_4^4 + f_{55}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-4}) \phi_{1/2}^{(1/2)} \\ & + (f_{61}^{\Gamma_7^+} Y_2^2 + f_{62}^{\Gamma_7^+} Y_2^{-2} + f_{63}^{\Gamma_7^+} Y_4^2 + f_{64}^{\Gamma_7^+} Y_4^{-2}) \phi_{-1/2}^{(1/2)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi^{\Gamma_6^-} = & (f_{11}^{\Gamma_6^-} Y_3^2 + f_{12}^{\Gamma_6^-} Y_3^{-2}) \phi_{3/2}^{(3/2)} + (f_{21}^{\Gamma_6^-} Y_1^{-1} + f_{22}^{\Gamma_6^-} Y_3^3 + f_{23}^{\Gamma_6^-} Y_3^{-1}) \phi_{1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{31}^{\Gamma_6^-} Y_1^0 + f_{32}^{\Gamma_6^-} Y_3^0) \phi_{-1/2}^{(3/2)} + (f_{41}^{\Gamma_6^-} Y_1^1 + f_{42}^{\Gamma_6^-} Y_3^{-3} + f_{43}^{\Gamma_6^-} Y_3^1) \phi_{-3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{51}^{\Gamma_6^-} Y_1^{-1} + f_{52}^{\Gamma_6^-} Y_3^3 + f_{53}^{\Gamma_6^-} Y_3^{-1}) \phi_{1/2}^{(1/2)} + (f_{61}^{\Gamma_6^-} Y_1^0 + f_{62}^{\Gamma_6^-} Y_3^0) \phi_{-1/2}^{(1/2)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi^{\Gamma_7^-} = & (f_{11}^{\Gamma_7^-} Y_1^1 + f_{12}^{\Gamma_7^-} Y_3^{-3} + f_{13}^{\Gamma_7^-} Y_3^1) \phi_{3/2}^{(3/2)} + (f_{21}^{\Gamma_7^-} Y_3^2 + f_{22}^{\Gamma_7^-} Y_3^{-2}) \phi_{1/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{31}^{\Gamma_7^-} Y_1^{-1} + f_{32}^{\Gamma_7^-} Y_3^3 + f_{33}^{\Gamma_7^-} Y_3^{-1}) \phi_{-1/2}^{(3/2)} + (f_{41}^{\Gamma_7^-} Y_1^0 + f_{42}^{\Gamma_7^-} Y_3^0) \phi_{-3/2}^{(3/2)} \\ & + (f_{51}^{\Gamma_7^-} Y_3^2 + f_{52}^{\Gamma_7^-} Y_3^{-2}) \phi_{1/2}^{(1/2)} + (f_{61}^{\Gamma_7^-} Y_1^{-1} + f_{62}^{\Gamma_7^-} Y_3^3 + f_{63}^{\Gamma_7^-} Y_3^{-1}) \phi_{-1/2}^{(1/2)}\end{aligned}$$

其中 $\phi_M^{(J)}$ 代表還未受到應力下的 Bloch function； Y_l^m 為球諧函數 (Spherical Harmonic)； $f_{ij}^{\Gamma_n}$ 僅與徑向座標有關。我們假設其型式為：

$$f(r) = \sum_k C_k r^L \exp(-\alpha_k r)$$

其中 C_k 為線性的變分參數。將以上討論之波函數的型式代回等效質量方程，利用變分法即可求得雜質能階與所對應的波函數。

3-2 結果與討論

3-2-1 壓縮應力對受子能階的影響

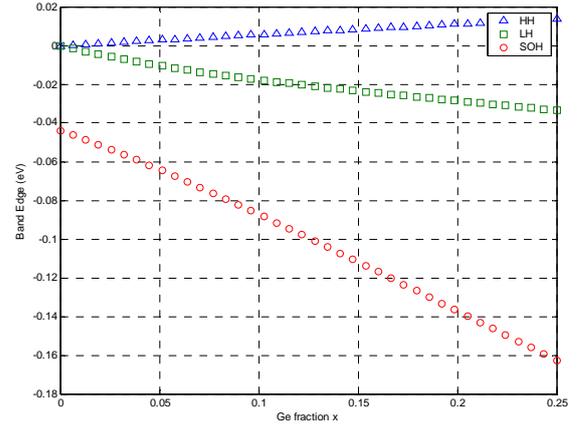


圖 3.1 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ (001) 的能帶頂點對 Ge 比例 x 的變化。

圖 3.1 為長在 (001) 方向矽基板之受應力 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 能帶頂點 (Band edge) 對 Ge 比例 x 的變化。我們看到隨著 Ge 比例的增加。重電洞的能帶頂點會往上升，而輕電洞與分離電洞會往下降。且相較於輕電洞能帶，分離電洞下降的速率會比較快。

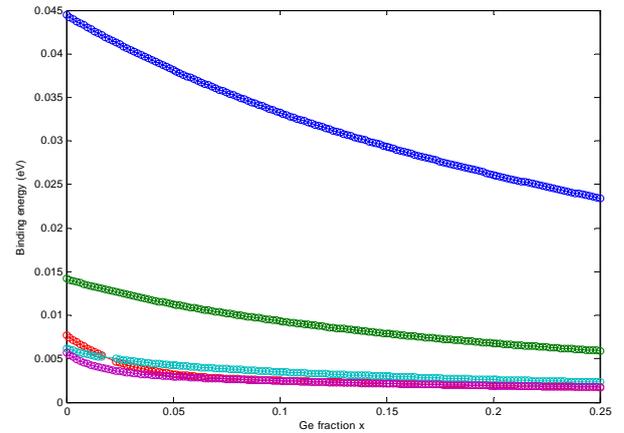


圖 3.2 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼 (B) 雜質能量在 $x=0$ 為前五低的 Γ_6^+ 束縛態能階對 Ge 比例 x 的變化圖。

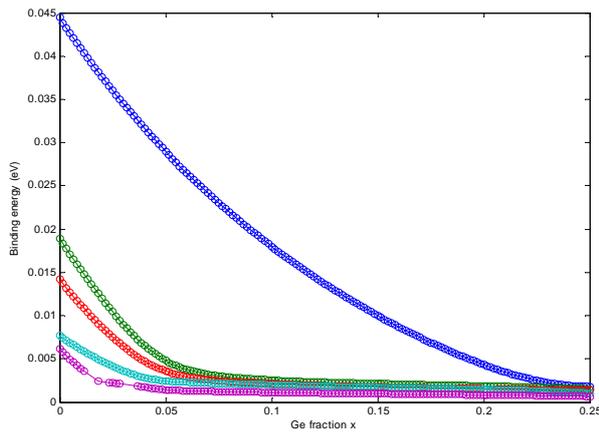


圖 3.3 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質能量在 $x=0$ 為前五低的 Γ_7^+ 束縛態能階對 Ge 比例 x 的變化圖。

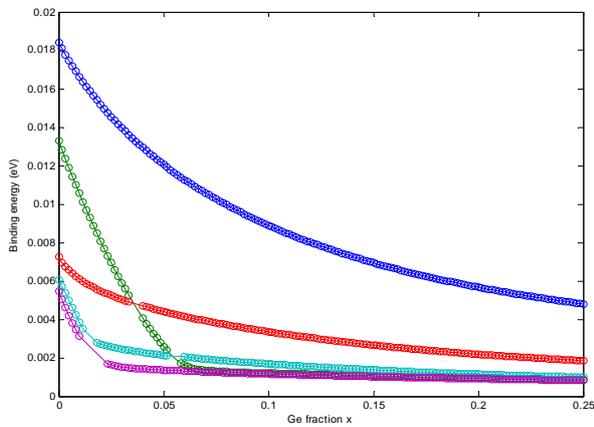


圖 3.4 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質能量在 $x=0$ 為前五低時 Γ_6^- 束縛態能階對 Ge 比例 x 的變化圖。

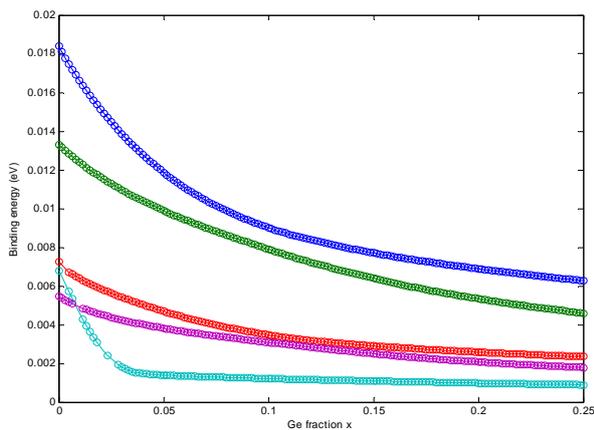


圖 3.5 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質能量在 $x=0$ 為前五低的 Γ_7^- 束縛態能階對 Ge 比例 x 的變化圖。

圖 3.1~3.4 分別為 Γ_6^+ 、 Γ_7^+ 、 Γ_6^- 和 Γ_7^- 能量前五低的硼雜質能階對 Ge 比例的作圖。我們看到幾點現象。第一，在銻含量為零的情況下有些 Γ_6^- 的雜質態會與 Γ_7^+ 的雜質態簡併；同樣地有些 Γ_6^- 的雜質態會與 Γ_7^- 的雜質態簡併。原因是當銻含量為零時，此時系統為 T_d 群，而當銻含量不為零時，因為受應力的緣故系統變為 D_{2d} 群，其為是 T_d 的子群(sub-group)。類似前面的分析，在銻含量為零時波函數按對稱性可分為 Γ_8^+ 、 Γ_8^- 、 Γ_6^+ 、 Γ_6^- 、 Γ_7^+ 與 Γ_7^- 六類。有些 Γ_6^+ (Γ_6^-) 的雜質態會在銻含量為零時會和 Γ_7^+ (Γ_7^-) 的雜質態簡併。此時其對稱性為 T_d 群中的 Γ_8^+ (Γ_8^-)。而若無簡併， T_d 群中的 Γ_6^+ 、 Γ_6^- 、 Γ_7^+ 與 Γ_7^- 即分別對應 D_{2d} 群中的 Γ_6^+ 、 Γ_6^- 、 Γ_7^+ 與 Γ_7^- 。第二，隨著銻含量的增大雜質能階會隨之下降且下降的速率會隨著銻含量的增加而變小。第三，不同對稱性的雜質能隨著銻含量增加其下降的速率各有不同。其中最明顯的例子是 Γ_7^+ 束縛態能階下降速率遠較 Γ_6^+ 還快。而這些能階變化的行為我們都可以用其波函數的組成來討論。為了方便起見，我們以 Γ_6^+ 、 Γ_7^+ 、 Γ_6^- 和 Γ_7^- 的基態能階作為代表。

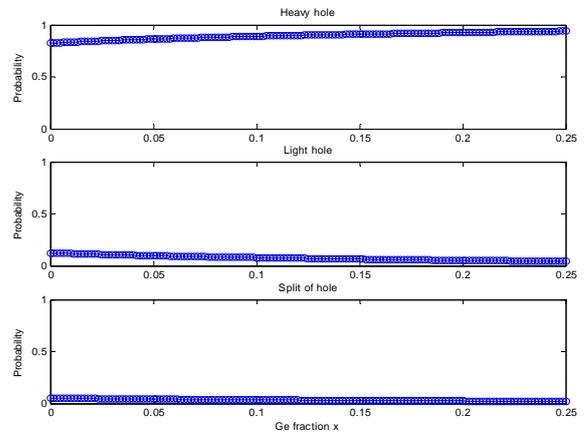


圖 3.6 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_6^+ 基態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著銻含量 x 的變化。

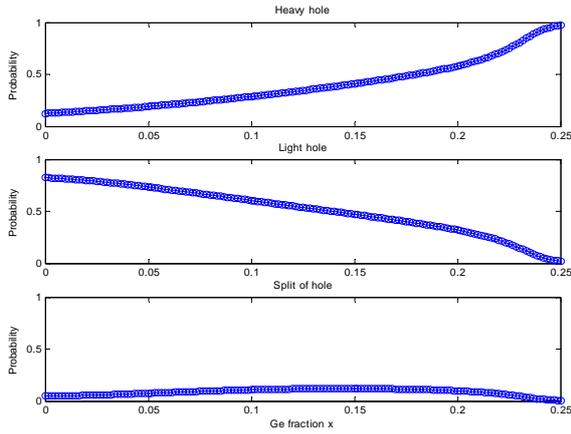


圖 3.7 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_7^+ 基態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著鉻含量 x 的變化。

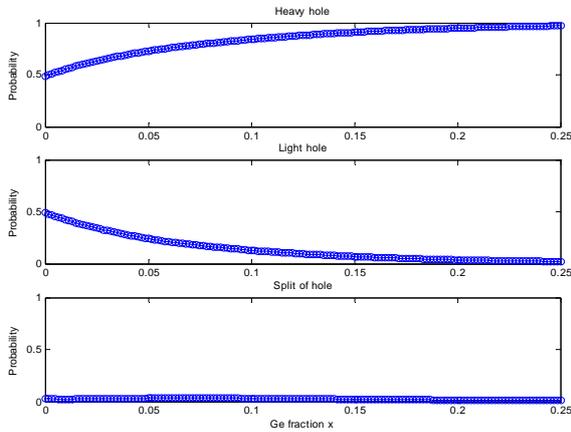


圖 3.8 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_6^- 基態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著鉻含量 x 的變化。

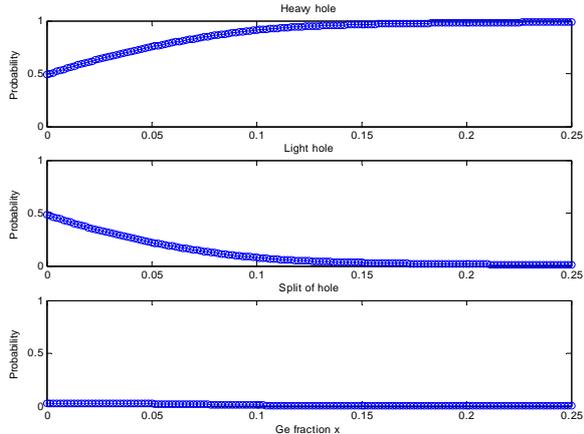


圖 3.9 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_7^- 基態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著鉻含量 x 的變化。

圖 3.6~3.9 分別為 Γ_6^+ 、 Γ_7^+ 、 Γ_6^- 和 Γ_7^- 基態波函數中重電洞 $\phi_{\pm 3/2}^{(3/2)}$ 、輕電洞 $\phi_{\pm 1/2}^{(3/2)}$ 、分離電洞 $\phi_{\pm 1/2}^{(1/2)}$ 的機率隨對鉻含量 x 的作圖。其分離電洞的比例相較於重電洞與輕電洞皆很小。比較圖 3.6~3.9 與圖 3.1~3.4 中基態能階的變化。我們看到能階隨鉻含量下降的速率與其波函數的成份有明顯地相關。當波函數中重電洞(其能帶頂點隨鉻含量上升而上升-見圖 3.1)的比例佔的越多時,其能階變化隨鉻含量的增加會越趨平緩。反之當波函數中輕電洞加上分離電洞(其能帶頂點隨鉻含量的上升而下降-見圖 3.1)的成份越多時,其能階隨鉻含量的增加會下降的越快。然而因為不管哪一種對稱性的態,其隨著鉻含量 x 的上升重電洞所佔的比例都會上升,這就說明了為何隨著鉻含量的增加,能階下降的速率會趨於平緩。此外 Γ_6^+ 基態重電洞所佔的比例明顯地比 Γ_7^+ 還大,這也說明了為何 Γ_7^+ 束縛態能階下降速率遠較 Γ_6^+ 還快。其實即使沒有圖 3.6~3.9 的計算結果。我們利用群論的分析仍可預期上述的行為。因為對於 Γ_6^+ 的基態,其主要成份會是 $f_{11}^{\Gamma_6^+}(r)Y_0^0\phi_{3/2}^{(3/2)}$, 屬於重電洞的貢獻;對於 Γ_7^+ 的基態,其主要成份為 $f_{21}^{\Gamma_7^+}(r)Y_0^0\phi_{1/2}^{(3/2)}$ 和 $f_{51}^{\Gamma_7^+}(r)Y_0^0\phi_{1/2}^{(1/2)}$, 屬於輕電洞和分離電洞的貢獻。對於 Γ_6^- 和 Γ_7^- , 雖然差異不是很明顯,但 Γ_7^- 所含的重電洞比例仍會略比 Γ_6^- 大,造成 Γ_6^- 束縛態能階下降速率略比 Γ_7^- 還快。

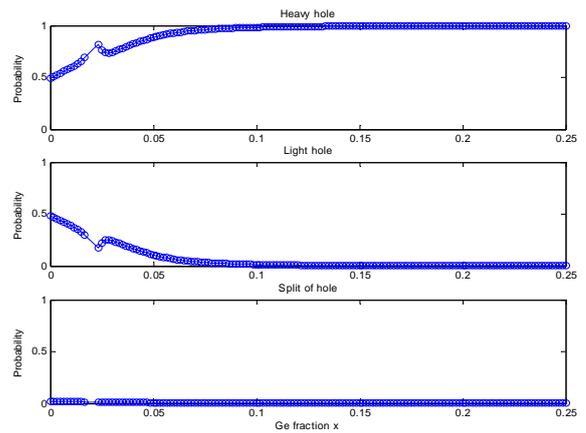


圖 3.10 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_6^+ 在 $x=0$ 時的第二激發態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著鉻含量 x 的變化。

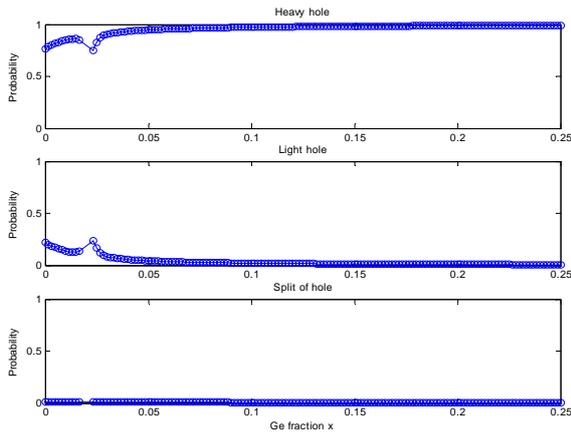


圖 3.11 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質 Γ_6^+ 在 $x=0$ 時的第三激發態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞所佔的機率隨著鍺含量 x 的變化。

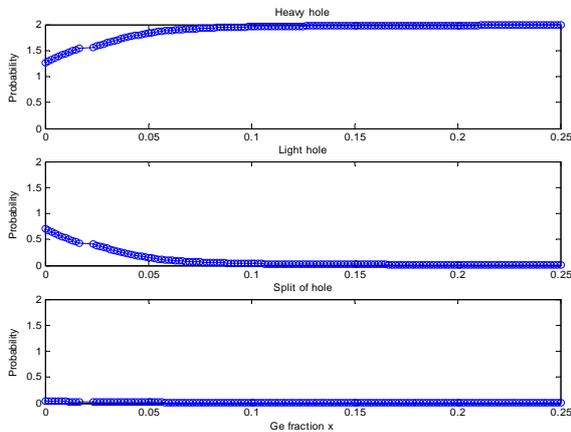


圖 3.12 圖 3.10 加上圖 3.11 的結果。

圖 3.10 與圖 3.11 分別為在 $x=0$ 時 Γ_6^+ 的第二激發態與第三激發態波函數中重電洞、輕電洞與分離電洞佔的比例隨著鍺含量的變化。在多數的情況其變化為連續變化，暗示著其波函數隨著鍺含量改變是呈連續且平緩的變化。惟獨當鍺含量 x 約為 2.3% 時其波函數會呈現出接近不連續的變化。我們發現此不連續變化正發生在此二個雜質態能量簡併的位置（見圖 3.2）。所以當兩個雜質態能量很接近時其波函數會隨鍺含量變化呈劇烈變化。為了瞭解兩雜質態波函數在接近簡併時變化的情形，我們將第二激發態（圖 3.10）與第三激發態（圖 3.11）的結果相加。我們發現雖然當兩個雜質態能量接近時波函數成份會隨鍺含量呈劇烈變化，但當我們把二個雜質態波函數的各成份各別相加後，其結果會是呈連續且平緩的變化（見圖 3.12）。此結果正暗示著當鍺含

量 x 達到某些特定的量使得雜質能階能量接近簡併時其波函數隨鍺含量的劇烈變很有可能是由波函數相互混成所造成的。

3-2-2 理論計算數據之對照

我們的理論計算與其它研究團隊實驗結果的對照整理於表 3.2。其結果可算得上是相當吻合。對於受應力的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 合金的情況下的雜質能階至今仍無相關的文獻可供對照。因此我們的計算結果對於未來相關實驗或理論研究極具參考價值。

| | Solid State Comm 33 277 (1979) | Solid State Comm 23 733 (1977) | PRB 27 4826 (1983) | PR 163 686 (1967) | PRL 18 608 (1967) | J. Appl. Phys. 52 5148 (1981) | Rep. Prog. Phys. 44 1297 (1981) | Solid State Comm 15 1403 (1974) | our work |
|--------------|---|---|--|----------------------|-----------------------|--|-------------------------------------|------------------------------------|--|
| ground state | 4583 | 4525±0.25 | 4439 | 4432 | | 443 | 4571 | 4371 | 446 |
| Γ_8^+ | 13.44±0.1 6.38±0.1 3.85±0.15 2.7±0.2 | 12.86±0.1 5.8±0.1 3.27±0.15 2.12±0.2 | | | | | | | 13.01 6.66 5.89 3.68 |
| Γ_6^+ | 14.83±0.1 10.71±0.1 | 14.02 99 6.04 4.48 3.48 2.33 | 13.94 9.79 5.97 4.41 2.8 1.82 | | 13.98 9.71 5.86 | 15.33 11.18 7.36 6.03 4.19 3.52 | 9.19 5.34 3.8 2.26 1.55 | | 15.75 11.24 6.58 4.99 3.59 |
| Γ_7^- | | | 4.8 4.68 | | | 4.25 | 6.1 | 4.11 | 6.05 |
| Γ_6^- | | | 4.72 2.48 | 4.41 1.82 | | | 5.79 3.52 | 4.03 1.55 | 5.18 2.36 |
| Γ_7^+ | | | | | 23 | | | | 19.0 |

表 3.2 與實驗數據的對照 Ref[9-15]

3-2-3 共振態

對於能量介於重電洞能帶頂點與輕電洞能帶頂點之間的雜質能階，其波函數會與能帶的態，或稱連續態(continuum state)相混而形成共振態(resonant state)。然而在計算中會出現一些不正確的連續態，而這些不正確的連續是因為侷域性的基底不足以描述非侷域性的連續態所造成。當在某些特定鍺含量 x 下所計算的雜質態會與這些不正確的連續態相混很嚴重造成不正確的結果。這正是我們預期明年度的計畫中要著手解決的問題。然而，當鍺含量為零時這些不正確的共振態不會與雜質態相混的很嚴重，所以所得到的能階仍為可信的。我們將所計算的結果與 Bassani 的結果[4]作比照（列於表 3.3 與表 3.4）發現二者的結果十分地相近。

| | Buczko & Bassani | our work |
|--------------|------------------|----------|
| Γ_7^+ | 4.39 | 4.25 |
| Γ_8^+ | 2.60 | 2.47 |
| Γ_8^+ | 2.56 | 2.43 |
| Γ_6^+ | 2.54 | 2.41 |
| Γ_7^+ | 1.90 | 2.04 |
| Γ_8^+ | 1.44 | 1.38 |
| Γ_8^+ | 1.41 | 1.36 |
| Γ_6^+ | 1.40 | 1.33 |
| Γ_7^+ | 1.20 | 1.19 |

表 3.3 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質在 $x=0$ 時所計算的偶對稱態的結果。與 Ref[4]的結果對照。

| | Buczko & Bassani | our work |
|--|------------------|----------|
| Γ_6^- | 5.34 | 5.64 |
| Γ_8^- | 5.26 | 5.42 |
| Γ_6^- | 2.41 | 2.41 |
| Γ_8^- | 2.35 | 2.34 |
| $2\Gamma_8^- + 2\Gamma_7^- + \Gamma_6^-$ | 1.48 ± 0.01 | 1.42 |

表 3.4 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$ 的硼(B)雜質在 $x=0$ 時所計算的奇對稱態的結果。與 Ref[4]的結果對照。

四、 文獻

- [1] I. V. Altukhov, E. G. Chirkova, V. P. Sinis, and M. S. Kagan, Phys. Lett. **79**, 3909 (2001)
- [2] S. Zwerdling, K. J. Button, B. Lax, and L. M. Roth, Phys. Rev. Lett. **4**, 173 (1960)
- [3] A. Onton, P. Fisher, and A. K. Ramdas, Phys. Rev. **163**, 686 (1967)
- [4] R. Buczo and F. Bassani, Phys. Rev. B **45**, 5838 (1992)
- [5] J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [6] G. L. Bir and G. E. Pikus, Sov. Phys.-Solid State **1**, 1502 (1960)
- [7] Martin M. Rieger and P. Vogl, Phys. Rev. B **48**, 14276 (1993)

[8] N. O. Lipari, A. Baldereschi, and M. L. W. Thewalt, Solid State Comm. **33** 277 (1980)

[9] G. B. Wright and A. Mooradian, Phys. Rev. Lett. **18**, 608 (1967)

[10] M. L. W. Thewalt, Solid State Comm. **23**, 733 (1973)

[11] K. Niizeki and M. Endo, Solid State Comm. **14**, 687 (1974)

[12] M. S. Skolmick, L. Eaves, R. A. Stradling and J. C. Portal, S. Askenazy, Solid State Comm. **15**, 1403 (1974)

[13] A K Ramdas and S Rodriguez, Rep. Prog. Phys. **44**, 1297 (1981)

[14] Colin E. Jones, David Schafer, Walter Scott, and R. J. Hager, J. Appl. Phys. **52**, 5148 (1981)

[15] David W. Fischer and John J. Rome, Phys. Rev. B **27**, 4826 (1983)