

## ВЛИЯНИЕ ГОФРИРОВКИ ВАЛЕНТНЫХ ЗОН НА ЭНЕРГИЮ $\Gamma_3^-$ -УРОВНЕЙ МЕЛКИХ АКЦЕПТОРОВ В КУБИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Полупанов А. Ф., Таскинбоев Р.

В приближении эффективной массы с учетом гофрировки валентных зон вычислены энергии  $1\Gamma_3^-$ - и  $2\Gamma_3^-$ -уровней мелких акцепторов в целом ряде кубических полупроводников с помощью численного невариационного метода — метода переноса условий ограниченности решений из особых точек. Показано, что, хотя гофрировочные поправки (ГП) для этих уровней появляются лишь во втором порядке теории возмущений по несферичности валентных зон, а параметр валентной зоны  $\delta$ , характеризующий эту несферичность, мал ( $\delta \ll 1$ ), ГП не малы ( $\sim 10\%$ ), в частности, по сравнению с центрально-ячеечными и поляронными поправками и учет их в некоторых случаях необходим. Это связано с большой величиной эффективной массы тяжелой дырки  $m_{hh}$ : малый параметр теории возмущений есть  $\delta/(1-\mu)$ , где  $\mu$  — параметр валентной зоны, а  $m_{hh} \sim (1-\mu)^{-1}$  в сферическом приближении.

1. Как известно, в полупроводниках с решеткой алмаза или цинковой обманки при большой величине спин-орбитального расщепления валентных зон по сравнению с энергией ионизации мелкой акцепторной примеси (МАП) гамильтониан эффективной массы Латтинджера МАП можно представить в виде [1]

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} \left\{ p^2 - \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \delta \left( [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^{(4)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{\frac{14}{5}} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^{(4)} \right) - \frac{e^2}{\kappa r} \right\}. \quad (1)$$

Здесь  $\hbar p$  — оператор импульса,  $P^{(2)}$  и  $J^{(2)}$  — неприводимые сферические тензорные операторы второго ранга, составленные, как в [2], из компонент вектора  $\mathbf{p}$  и вектора  $\mathbf{J}$  момента количества движения  $J = 3/2$ ,  $\mu = (4\gamma_2 + 6\gamma_3)/5\gamma_1$ ,  $\delta = (\gamma_3 - \gamma_2)/\gamma_1$ , где  $\gamma_i$  — параметры Латтинджера валентной зоны,  $m_0$  — масса свободного электрона,  $\kappa$  — статическая диэлектрическая проницаемость полупроводника.

Первые два слагаемых в гамильтониане (1) сферически симметричны и описывают основные особенности валентных зон — их вырождение при  $\mathbf{p} = 0$  и наличие двух ветвей при  $\mathbf{p} \neq 0$  — зоны тяжелых и легких дырок. Третье слагаемое в (1), пропорциональное  $\delta$ , имеет кубическую симметрию и описывает гофрировку, т. е. несферичность изоэнергетических поверхностей в валентной зоне. В большинстве кубических полупроводников параметр  $\delta \ll 1$ , и теория возмущений, основанная на малости слагаемых кубической симметрии в гамильтониане (1), достаточно эффективна. Для решения многих проблем хорошим приближением является сферическое, в котором пренебрегают гофрировкой, полагая  $\delta = 0$  [1, 2]. При  $\delta = 0$  полный момент количества движения  $\hat{\mathbf{F}} = \mathbf{L} + \mathbf{J}$ , где  $\mathbf{L}$  — орбитальный момент количества движения, сохраняется, состояния акцептора классифицируются по величине  $F$  и вырождены  $(2F+1)$ -кратно по величине проекции  $F_x$ . При учете слагаемого кубической симметрии в  $\hat{H}$  совокупности функций с определенными  $F$  (и разными  $F_x$ ) распадаются на неприводимые представления точечной группы  $T_d$ :

$$F = 1/2 \rightarrow \Gamma_6, \quad F = 3/2 \rightarrow \Gamma_8, \quad F = 5/2 \rightarrow \Gamma_7 + \Gamma_8, \\ F = 7/2 \rightarrow \Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_8, \quad F = 9/2 \rightarrow \Gamma_6 + 2\Gamma_8, \quad F = 11/2 \rightarrow \Gamma_6 + \Gamma_7 + 2\Gamma_8, \dots \quad (2)$$

При добавлении к  $T_d$  центра инверсии следует различать четные и нечетные представления  $\Gamma^+$  и  $\Gamma^-$  (мы пренебрегаем малыми эффектами, связанными с отсутствием центра инверсии у полупроводников с решеткой цинковой обманки). Слагаемое кубической симметрии ( $H_c$ ) не смешивает функции с данным  $F \leq 3/2$ , что видно из выражения для матричного элемента  $H_c$  на функциях  $|FF_z\rangle$  (и следует из известных свойств 3j-символов Вигнера)

$$\langle FF_z | H_c | F' F'_z \rangle = (-1)^{F-F_z} \left\{ \sqrt{\frac{14}{5}} \begin{pmatrix} F & 4 & F' \\ -F_z & 0 & F'_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F & 4 & F' \\ -F_z & 4 & F'_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F & 4 & F' \\ -F_z & -4 & F'_z \end{pmatrix} \right\} (F \| [P^{(2)} \times J^{(2)}]^{(4)} \| F'), \quad (3)$$

где  $\begin{pmatrix} F & 4 & F' \\ F_z & q & F'_z \end{pmatrix}$  — 3j-символ Вигнера,  $(F \| [P^{(2)} \times J^{(2)}]^{(4)} \| F')$  — приведенный матричный элемент, т. е. в первом порядке теории возмущений учет  $H_c$  вообще не влияет на состояния с  $F \leq 3/2$  [1].

Два нижайших состояния акцептора, преобразующиеся по представлению  $\Gamma_8^+$  (основное состояние  $1\Gamma_8^+$  и первое возбужденное четное состояние  $2\Gamma_8^+$ ), в сферическом приближении характеризуются полным моментом  $F=3/2$  (состоянию  $3\Gamma_8^+$  в сферическом приближении соответствует  $F=5/2$  [3]) и орбитальным моментом  $L=0$ . Соответствующая волновая функция имеет вид

$$\Psi_{LFF_z}(r) = R_L(r) |LJFF_z\rangle + R_{L+2}(r) |L+2, JFF_z\rangle, \quad (4)$$

где  $R_{L, L+2}(r)$  — радиальные функции,  $|LJFF_z\rangle$  — известные функции в схеме  $L-J$ -связи. Ранее обычно считалось [1], что, поскольку практически у всех полупроводников с решеткой алмаза и цинковой обманки отношение  $\delta/\mu \ll 1$  (исключение составляет Si, у которого  $\delta/\mu \approx 0.5$ ), а поправка на несферичность (назовем ее гофрировочной поправкой ГП) для состояний с  $F=3/2$  появляется лишь во втором порядке теории возмущений, ГП к энергиям этих состояний очень мала и учет этой поправки необходим лишь при вычислении таких величин, как  $g$ -фактор [4], который в сферическом приближении есть малая разность больших чисел. Отличие же наблюдаемых энергий  $\Gamma_8^+$ -уровней от вычисляемых в сферическом приближении связывали с центрально-ячеечными поправками (ЦЯП) [5] (волновая функция этих состояний конечна при  $r=0$ ) или с поляронными эффектами [6], или с неточностью экспериментального определения параметров Латтинджера валентной зоны (параметра  $\mu$ ) [7]. Однако расчет, выполненный для МАП в Ge и GaAs с помощью метода переноса условий ограниченности из особых точек (см. [8]), показал, что ГП к энергии основного уровня может превосходить ЦЯП для наиболее мелких примесей [4]. Кроме того, до настоящего времени энергии уровней МАП в большинстве кубических полупроводников вычислены только в [1] вариационно (и в сферическом приближении). Недавний же расчет энергий уровней мелких доноров в многодолинных полупроводниках [9], выполненный методом, изложенным в [8], продемонстрировал, что приближение эффективной массы (ПЭМ) (при аккуратном решении его уравнений и учете реальной структуры зоны) с очень высокой точностью описывает нечетные состояния мелких доноров, а имевшееся ранее расхождение теории и эксперимента связано не с какими-то поправками к ПЭМ, а с недостатками вариационного метода, используемого обычно для расчетов. В данной работе мы вычислим энергии двух нижайших  $\Gamma_8^+$ -уровней мелких акцепторов в целом ряде кубических полупроводников в рамках ПЭМ, но с учетом гофрировки валентных зон с помощью невариационного численного метода [4, 8], что позволит, в частности, понять, к какого порядка поправкам приводит этот учет и как они соотносятся с поправками к ПЭМ, определяемыми в сферическом приближении.

2. Для того чтобы воспользоваться методом переноса граничных условий из особых точек, следует свести уравнение Шредингера с гамильтонианом (1) — системе дифференциальных уравнений в частных производных к неразделяющимся переменным — к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Будем искать собственные функции (1), преобразующиеся по предста-

влению  $\Gamma_3^+$  в виде разложения по функциям с определенными  $F$ , которые преобразуются по тому же представлению

$$\Psi(\Gamma_3^+, n) = \sum_{F, i, L} R_L^{F, i}(r) \Phi(LJF\Gamma_3^+ n). \quad (5)$$

Здесь  $n$  нумерует вырожденные функции, преобразующиеся друг через друга по  $\Gamma_3$  (ряд представления),  $\Phi(LJF\Gamma_3^+ n)$  — линейные комбинации функций  $L$ — $J$ —связи, преобразующиеся по  $\Gamma_3^+$  [2], индекс  $i$  нумерует представления  $\Gamma_3$ , соответствующие данному  $F$  [см. (2)], сумма по  $L$  при каждых данных  $F$  и  $i$  содержит всего два слагаемых

$$L = L_1, L_1 + 2; |L_1 = F - 1 - \frac{(-1)^{F-3/2}}{2}. \quad (6)$$

Первое слагаемое в сумме по  $F$  в (5) — это функция (4). Подставив (5) в уравнение Шредингера с гамильтонианом (1), получаем точную систему ОДУ для радиальных функций  $R_L^{F, i}(r)$  (аналогично методу Канторовича сведения к ОДУ см. в [10]). Выбирая в качестве единиц измерения энергии и расстояний соответственно  $R_0 = m_0 e^4 / 2 \hbar^2 \kappa^2 \gamma_1$  и  $a = \hbar^2 \kappa \gamma_1 / m_0 e^2$ , имеем

$$\begin{aligned} (u_F P_{L, L}^{(2)} + \frac{2}{r} + E) R_L^{F, i} - w_F P_{L, L+2}^{(2)} R_{L+2}^{F, i} &= \delta \sum_{F', i', L'} \Delta_{LL', L'}^{F, i, F', i'} P_{L, L'}^{(2)} R_{L'}^{F', i'}, \\ -w_F P_{L+2, L}^{(2)} R_L^{F, i} + (v_F P_{L+2, L+2}^{(2)} + \frac{2}{r} + E) R_{L+2}^{F, i} &= \delta \sum_{F', i', L'} \Delta_{L+2, L', L'}^{F, i, F', i'} P_{L+2, L'}^{(2)} R_{L'}^{F', i'}. \end{aligned} \quad (7)$$

В (7) использованы следующие обозначения:

$$\begin{aligned} u_F &= 1 + \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu - \delta \Delta_{LL}^{F, i, F, i}, & v_F &= 1 - \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu - \delta \Delta_{L+2, L+2}^{F, i, F, i}; \\ w_F &= \frac{2\beta\mu}{1 + \beta^2} + \delta \Delta_{L, L+2}^{F, i, F, i}, & \beta &= 3^{L-F+1} [(F + 3/2)/(F - 1/2)]^{1/2}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_{LL', L'}^{F, i, F', i'} &= (-1)^{\frac{L'-L}{2}} \frac{3\sqrt{5}}{2} \alpha^{(F, i, F', i')} [(2F + 1)(2F' + 1)]^{1/2} \begin{pmatrix} 4 & F & F' \\ 2 & L & L' \\ 2 & J & J \end{pmatrix} \times \\ &\times \left[ \frac{(L + L' + 2)(L + L')(4L + 2 - |L' - L|)(4 + |L' - L|)}{(L + L' - 1 + |L' - L|)(4L + 6 - 3|L' - L|)} \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь матрица в фигурных скобках —  $9j$ -символ. Выражение для констант  $\alpha^{(F, i, F', i')}$  приведено в [4]. В (7) использован оператор  $P_{L, L'}^{(2)}$ , который имеет вид

$$\begin{aligned} P_{L, L'}^{(2)} &= \frac{d^2}{dr^2} + |(L' + 1/2)(L' - L) + 2 - |L' - L|| \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - (-1)^{\frac{L-L'}{2}} \times \\ &\times [(L' + 3L + 2)(5L' - L + 2) - 4 + 2|L' - L|] \frac{1}{16r^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Система (7) — это бесконечная система ОДУ: индекс  $F$  пробегает все положительные полупелые значения, начиная с  $F = 3/2$ , в правых частях уравнений (7) суммирование проводится по всем  $F' \neq F$ . При  $\delta = 0$  и в первом порядке по  $\delta$  система (7) распадается на совокупность несвязанных систем двух ОДУ, при этом состояния  $1\Gamma_3^+$  и  $2\Gamma_3^+$  определяются первой из этих систем (с  $F = 3/2$ ,  $L = 0$ ). Для того чтобы понять, какого порядка поправка к энергии этих состояний появляется при  $\delta \neq 0$ , удобно перейти от уравнений (7) для радиальных функций  $R_L^{F, i}(r)$  к уравнениям для легкодырочных и тяжелодырочных функций (функций, имеющих соответствующие асимптотики), в которых диагональна старшая производная («оператор кинетической энергии») в сферическом приближении [2],

$$F_h^F(r) = r \left( R_L^F + \beta_{Fh} R_{L+2}^F \right), \quad F_l^F(r) = r \left( R_L^F + \beta_{Fl} R_{L+2}^F \right), \quad (10)$$

где  $\beta_{Fh, l} = \{u_F - v_F \pm [(u_F - v_F)^2 + 4w_F^2]^{1/2}\} / 2w_F$ .

Первое из уравнений для  $F_h^F$ , соответствующее двум уравнениям (7), имеет вид

$$\left\{ (u - \beta_h w) \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} + E \right\} F_h + (\beta_h - \beta_l)^{-1} [2\beta_h (u - v) + (2L + 1) \beta_h^2 w + (2L + 5) w] \times \\ \times \frac{1}{r} \frac{dF_l}{dr} + (\beta_h - \beta_l)^{-1} [L(L + 1) \beta_l u - (2L^2 + 6L + 3) w - (L + 2)(L + 3) \beta_h v] \times \\ \times \frac{F_h}{r^2} - (\beta_h - \beta_l)^{-1} \{ \beta_h [L(L + 1) u - (L + 2)(L + 3) v + 2(u - v)] + \\ + \beta_h^2 (L^2 + 4L + 1) w - (L^2 + 2L - 2) w \} \frac{F_l}{r^2} = \delta \sum_{F' L'} (\beta_{F' l} - \beta_{F' h})^{-1} \times \\ \times r (\Delta_{LL'}^{FF'} P_{L, L'}^{(2)} + \beta_h \Delta_{L+2, L'}^{FF'} P_{L+2, L'}^{(2)}) \frac{1}{r} \left[ -(\beta_{F' l})^{\frac{L_1+2-L'}{2}} F_h^{F'} + (-\beta_{F' h})^{\frac{L_1+2-L'}{2}} F_l^{F'} \right]. \quad (11)$$

Здесь  $L_1$  определено в (6). Второе уравнение получаем из этого, поменяв местами  $F_h$  и  $F_l$ ,  $\beta_h$  и  $\beta_l$ . Индекс  $F \neq F'$  и индекс  $i$  опущены в (11) для простоты. Если рассматривать поправки второго порядка по  $\delta$  к энергиям состояний, происходящих из состояний с  $F = 3/2$ , то можно пренебречь диагональными по  $F$  (линейными по  $\delta$ ) поправками в уравнениях с  $F > 3/2$ . Тогда коэффициенты при вторых производных в левых частях уравнений (11) равны:  $u - \beta_h w = 1 - \mu$ . Для большинства кубических полупроводников характерно значение  $\mu \sim 1$  ( $0 < 1 - \mu \ll 1$ ), поэтому в уравнениях (11) имеется два малых параметра —  $1 - \mu$  и  $\delta$ , причем  $1 - \mu$  — параметр при старшей производной ( $F_h''$ ), а  $\delta$  — при всей правой части, т. е. и при старшей производной. Считаем  $\delta \ll 1 - \mu \ll 1$ , что и соответствует реальным полупроводникам. Как легко увидеть, все остальные коэффициенты в (11) (в том числе и коэффициент  $1 + \mu$  при  $F_l''$ ) не малы и слабо зависят от  $\mu$  при  $\mu \sim 1$ . Собственные значения энергии в сферическом приближении, т. е. соответствующие парам уравнений (11) с данными  $F$ , определяются массой тяжелой дырки — величиной, обратной как раз малому параметру при  $d^2 F_h / dr^2$ . Так, энергия основного состояния, измеряемая в единицах  $(1 - \mu)^{-1}$ , изменяется от  $-1$  ( $\mu = 0$ ) до  $-4/9$  ( $\mu = 1$ ) [11]. Ее величина (в единицах  $R_0$ ) при всех  $\mu$  хорошо аппроксимируется функцией  $-(1 - \mu^2)^{-1}$ . Таким образом, при  $\delta \neq 0$  поправки к энергии определяются малыми поправками не к величинам порядка  $\mu \sim 1$ , а к малой же величине  $(1 - \mu)$ , обратной массе тяжелой дырки. При этом малый параметр есть не  $\delta/\mu \sim \delta$ , а  $\delta/(1 - \mu) \gg \delta$ . Этот параметр можно явно выделить в правых частях уравнений (11) и избавиться от особенностей в зависимостях коэффициентов в левых частях (11) от  $1 - \mu$  с помощью замены  $E' = E(1 - \mu)$ ,  $r' = r/(1 - \mu)$ . При этом следует учесть, что появляющаяся в левой части каждого уравнения для  $F_h^F$  (уравнения, содержащего  $d^2 F_h^F / dr^2$  в левой части) комбинация

$$\frac{4L + 6}{(1 - \mu)(1 + \beta^2)^2} \frac{1}{r^2} \{ (1 + \beta^2) r F_l' - \beta^2 (2L + 3) F_h - [L + 1 - \beta^2 (L + 2)] F_l \} \equiv \\ \equiv \frac{2L + 3}{1 + \beta^2} \frac{\Phi(r)}{r}$$

есть конечная плавная функция  $1 - \mu$ , пропорциональная той же, зависящей от  $\mu$  константе, что и  $F_{h, l}^{F'}$  [12]. В левой же части уравнений для  $F_l^F$  появляется комбинация (с теми же свойствами), которую можно представить в виде

$$\frac{d\Phi(r)}{dr} + \frac{[L + 1 - \beta^2 (L + 2)]}{1 + \beta^2} \frac{\Phi(r)}{r}.$$

3. Ясно, что для решения задачи на собственные значения для системы (7) ее следует свести к конечной системе ОДУ, т. е. нужно оборвать разложение (5) при каком-либо конечном  $F$ . Из выражения (3) для матричного элемента видно, что оператор  $H_c$  смешивает состояние с  $F = 3/2$  с состояниями, в которых  $5/2 \leq F \leq 11/2$ ; следовательно, оборвав разложение (5) при  $F = 11/2$ , мы учтем в уравнениях (7) все члены, соответствующие второму порядку теории возмущений (и часть членов, соответствующих третьему порядку). Ограничиваясь

в разложении (5) членами с  $F \ll 1/2$ , сводим, как видно из (2), систему (7) к системе 14 ОДУ второго порядка. Задачу на собственные значения для этой системы с особенностями при  $r=0$  (особая точка) и  $r=\infty$  (существенно особая точка) можно решить только численно. Мы воспользуемся прямым и наиболее точным методом решения таких задач для больших систем ОДУ (в случае системы двух ОДУ второго порядка существует более простой прямой метод [5, 2]) — методом переноса условий ограниченности из особых точек [4, 8].

Энергии уровней  $1\Gamma_8^+$  и  $2\Gamma_8^+$  мелких акцепторов в кубических полупроводниках

Полупроводник	$\mu$	$\delta$	$R_0$ , мэВ	$E$ , мэВ		$E$ , мэВ	
				$1\Gamma_8^+$	СП	$2\Gamma_8^+$	СП
Si	0.483	0.249	24.8	34.79	31.56	9.858	8.65
AlSb	0.701	0.178	22.8	47.46	42.45	14.32	12.40
GaP	0.661	0.162	28.0	50.95	47.40	15.09	13.69
GaSb	0.808	0.104	4.7	13.54	12.55	4.173	3.77
GaSb [13]	0.806	0.121	4.47	13.10	—	4.065	—
InP	0.792	0.108	14.1	37.79	35.20	11.59	10.53
InP [14]	0.836	0.141	17.98	66.71	—	21.31	—
InAs	0.907	0.047	3.2	17.29	16.31	5.406	5.00
InSb	0.935	0.036	1.2	9.146	8.55	2.886	2.63
ZnS	0.751	0.134	81.6	190.7	175.6	57.97	51.98
ZnSe	0.795	0.114	43.6	119.4	110.2	36.78	32.98
ZnTe	0.755	0.152	35.7	86.75	77.84	26.64	23.07
ZnTe [15]	0.58	0.12	43.18	64.55	62.3	18.43	17.5
CdTe	0.844	0.108	27.3	98.36	87.26	30.93	26.42
Ge	0.766	0.108	4.3	10.34	9.74	3.130	2.89
GaAs [16]	0.753	0.09	12.38	27.86	25.82	8.352	7.64

*Примечание.* Если не имеется соответствующей ссылки, данные о параметрах  $\mu$  и  $\delta$ , а также об энергиях в сферическом приближении (СП) взяты из [1].

В таблице представлены результаты расчета энергий уровней  $1\Gamma_8^+$  и  $2\Gamma_8^+$  мелких акцепторов при различных значениях зонных параметров  $\mu$  и  $\delta$ , соответствующих различным кубическим полупроводникам. Для сравнения приведены также наиболее точные значения энергий этих уровней, полученные ранее в сферическом приближении. Как и следовало ожидать, ГП понижает энергию рассматриваемых уровней (поправка во втором порядке теории возмущений), причем ее относительная величина больше для  $2\Gamma_8^+$ -уровней. ГП может превосходить ЦЯП даже для основного уровня наиболее мелких акцепторов (например, для примеси В в Ge [4]), тем существеннее она становится для возбужденных состояний, ЦЯП для которых существенно меньше. Так, ГП для уровня  $2\Gamma_8^+$  превосходит ЦЯП для всех мелких акцепторов в Ge (см. измерения [17]). Из таблицы, в частности, видно, что при увеличении  $\mu$ , но при одной и той же величине параметра  $\delta$  увеличивается не только абсолютное значение энергии уровней (измеряемой в единицах  $R_0$ ), но и относительная величина ГП, что согласуется со сказанным в п. 2 и прямо указывает на неприменимость использования малости отношения  $\delta/\mu$  как критерия малости ГП. Отметим, что относительная величина ГП для  $1\Gamma_8^+$ -уровней, определяемая как  $(E - E_s)/E_s$ , где  $E$  — энергия уровня, вычисленная с учетом ГП, а  $E_s$  — энергия, определенная в сферическом приближении, хорошо аппроксимируется выражением  $\delta^2/(1 - \mu^2)^2$ .

Так как отношение  $\delta/\mu \approx 0.5$  в Si, т. е. велико по сравнению с таким отношением в других полупроводниках, считалось [1, 2], что сферическое приближение наименее применимо в случае МАП в Si и гофрировка валентных зон очень сильно влияет на энергии уровней. Из таблицы, однако, видно, что ГП к энергиям уровней, вычисленным для значений параметров  $\mu$  и  $\delta$ , соответствующих Si, относительно невелика, т. е. того же порядка, что и ГП, например, к уровням МАП в InSb, где  $\delta/\mu \approx 0.04$ . Это связано с малой величиной  $\mu$  в Si. Таким образом, гофрировка существенно не изменяет спектр МАП в Si по сравнению со спектром в других полупроводниках с меньшим параметром  $\delta/\mu$  (например,

в Ge), а все отличие спектра связано в основном с сильным влиянием спин-орбитально отщепленной валентной зоны в Si.

Проведенный расчет показал, что ГП к энергиям даже  $\Gamma_5^+$ -уровней МАП, для которых эта поправка появляется лишь во втором порядке теории возмущений и для которых наиболее существенна поправка на центральную ячейку, не мала [что в конечном счете связано с большой массой тяжелой дырки: малый параметр есть  $\delta/(1-\mu)$ ] и учет ее в некоторых случаях необходим. Эта поправка в случае  $1\Gamma_5^+$ - и  $2\Gamma_5^+$ -уровней составляет  $\sim 10\%$  для всех рассмотренных  $\mu$  и  $\delta$ , т. е. она одного порядка величины с ЦЯП (а иногда и превосходит последнюю), с поляронными поправками, вычисляемыми в сферическом приближении [6]. Поэтому учет влияния гофрировки необходим, например, при расчете различных поправок к ПЭМ, при уточнении зонных параметров полупроводника из подгонки вычисляемого спектра МАП к измеренному [7, 15] и в ряде других случаев.

Авторы благодарны Ш. М. Когану за обсуждение.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Baldereschi A., Lipari N. O. — Phys. Rev., 1974, v. 9, N 4, p. 1525.
- [2] Коган Ш. М., Полуванов А. Ф. Спектры оптического поглощения и фотоэффекта мелких акцепторных примесей в полупроводниках. — ЖЭТФ, 1981, т. 80, в. 1, с. 394—412.
- [3] Полуванов А. Ф. Поляризуемости и квадрупольные моменты примесей III группы в германии. — ФТП, 1982, т. 16, в. 1, с. 27—30.
- [4] Полуванов А. Ф., Таскинбоев Р. Основное состояние мелкого акцептора в Ge и GaAs с учетом гофрировки валентных зон. — ФТП, 1984, т. 18, в. 2, с. 279—284.
- [5] Полуванов А. Ф., Коган Ш. М. Интенсивности линий в спектрах мелких акцепторов в германии. — ФТП, 1979, т. 13, в. 12, с. 2338—2341.
- [6] Гифейсман Ш. Н., Коропчану В. П. Поляронный сдвиг в теории мелких акцепторов в полупроводниках с вырожденной валентной зоной. — ФТП, 1985, т. 19, в. 10, с. 1853—1855.
- [7] Said M., Kanehisa M. A., Balkanski M. — Sol. St. Commun., 1986, v. 57, N 6, p. 417—419.
- [8] Veinikhes I. L., Kogan Sh. M., Polupanov A. F., Taskinboev R. — Sol. St. Commun., 1985, v. 53, N 12, p. 1083—1087.
- [9] Бейнихес И. Л., Коган Ш. М. Спектры мелких доноров в многодолинных полупроводниках. — Письма ЖЭТФ, 1986, т. 44, в. 1, с. 39—42.
- [10] Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближенные методы высшего анализа. М., 1962. 708 с.
- [11] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. Акцепторные уровни в полупроводнике со структурой алмаза. — ФТП, 1971, т. 5, в. 11, с. 2191—2193.
- [12] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. Примесные состояния в полупроводнике с нулевой запрещенной зоной. — ЖЭТФ, 1972, т. 62, в. 2, с. 713—724.
- [13] Гельмонт Б. Л., Сейсян Р. П., Эфрос Ал. Л., Варфоломеев А. В. Диамагнитные экситоны в полупроводниках с вырожденной валентной зоной и осциллирующее поглощение кристаллов GaSb в магнитном поле. — ФТП, 1977, т. 11, в. 2, с. 238—247.
- [14] Bimberg D., Hess K., Lipari N. O., Fischbach J. K., Altarelli M. — Physica, 1977, v. 89B, p. 139.
- [15] Herbert D. C., Dean P. J., Venghaus H., Pfister J. C. — J. Phys. C, 1978, v. 11, N 17, p. 3641—3650.
- [16] Skolnick M. S., Jain A. K., Stradling R. A., Leotin J., Ousset J. C., Askenazy S. — J. Phys. C, 1976, v. 9, N 14, p. 2809—2822.
- [17] Гершензон Е. М., Гольцман Г. Н., Кагане М. Л. Энергетический спектр акцепторов в германии и влияние на него магнитного поля. — ЖЭТФ, 1977, т. 72, в. 4, с. 1466—1479.

Институт радиотехники  
и электроники АН СССР  
Москва

Получена 4.05.1987  
Принята к печати 16.06.1987