

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ И ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ДЫРКИ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ АКЦЕПТОРА В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

И. А. Меркулов, А. В. Родина

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021, Санкт-Петербург, Россия

(Получена 9 августа 1993 г. Принята к печати 30 августа 1993 г.)

В импульсном представлении получена и численно решена система интегральных уравнений, описывающая основное состояние кулоновского акцептора в алмазоподобных полупроводниках с учетом кубической симметрии кристалла. С точностью порядка $1+2\%$ найдены энергии связи и волновые функции основного состояния для ряда алмазоподобных полупроводников.

1. Связанные состояния дырки на кулоновском центре в алмазоподобных полупроводниках исследовались в ряде теоретических работ [1-3], однако достаточно точного аналитического или численного решения этой задачи до сих пор не получено. Дело в том, что наличие двух вырожденных в центре зоны Бриллюэна подзон легких и тяжелых дырок, гофрировка энергетического спектра этих подзон из-за кубической (а не сферической) симметрии кристаллической решетки не позволяют свести задачу к известным уравнениям математической физики. В то же время точная информация об энергетическом спектре и структуре волновых функций акцепторных состояний с учетом указанных обстоятельств необходима для описания многих экспериментальных результатов. Вид волновых функций основного состояния акцептора в кристаллах типа GaAs нужен, например, для интерпретации экспериментальных исследований горячей фотолуминесценции (ГФЛ) [7-13], позволяющей проследить за процессами релаксации носителей тока с кинетической энергией, во много раз превосходящей энергию теплового движения [10-13].

В работах [7-9] при теоретическом описании ГФЛ использовался асимптотический вид волновых функций акцепторного состояния, учитывающий сложную структуру валентной зоны, но строго обоснованный лишь при очень больших энергиях квантов возбуждающего излучения, когда волновой вектор горячих фотоэлектронов превосходит обратный боровский радиус тяжелой дырки. Для GaAs это соответствует кинетической энергии фотоэлектронов, превосходящей 400 мэВ. В области меньших энергий для интерпретации экспериментальных результатов использовались данные численных расчетов Полупанова и Когана (см. [6, 8]), выполненных в сферическом приближении, которое не дает никакой информации о наблюдаемой кубической анизотропии ГФЛ, и как показано, например, в [4], занижает энергию связи акцептора на $6+8\%$. В работах [12, 13] для интерпретации результатов использовалась еще более упрощенная модель водородоподобного акцептора, не учитывающая сложную структуру валентной зоны и дающая лишь грубые оценки для вероятностей оптических переходов.

В настоящей работе приводится теоретический расчет энергии связи и волновой функции основного состояния акцептора Ψ в алмазоподобных полупроводниках с учетом кубической симметрии кристалла.

2. Как хорошо известно, состояние свободной дырки в валентной зоне алмазоподобных полупроводников описывается гамильтонианом Латтинжера [14]

$$\hat{H}_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_3 (k\hat{J})^2 - 2(\gamma_2 - \gamma_3) \sum_{\alpha=x,y,z} k_\alpha^2 J_\alpha^2 \right], \quad (1)$$

где J_x, J_y, J_z — матрицы 4×4 проекций спина дырки $J = 3/2$, записанные в базисе блоховских функций вершины валентной зоны u_μ ($\mu = \pm 3/2, \pm 1/2$), γ_1, γ_2 и γ_3 — параметры Латтинжера, k — волновой вектор дырки, m_0 — масса свободного электрона, а оси x, y, z совпадают с кристаллографическими направлениями $\langle 001 \rangle$.

При заданном значении волнового вектора k гамильтониан (1) имеет два двукратно вырожденных значения энергии

$$E_{l,h} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} [\gamma_1 \pm 2\gamma_2 \alpha(k)],$$

$$\alpha(k) = [1 + 3v(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2)/k^4]^{1/2}, \quad v = (\gamma_3^2 - \gamma_2^2)/\gamma_2^2,$$

что дает законы дисперсии легких и тяжелых дырок. Как будет видно из дальнейшего, гамильтониан \hat{H}_L , следуя [6, 15], удобно представить в виде:

$$\hat{H}_L = E_l(k) \cdot \hat{\Lambda}'(k) + E_h(k) \cdot \hat{\Lambda}^h(k), \quad (3)$$

где $\hat{\Lambda}^{l,h}(k) = \mp [\hat{H}_L(k) - E_{h,l}(k)] / [E_h(k) - E_l(k)]$ — операторы проектирования на состояния легких и тяжелых дырок.

В импульсном представлении уравнение Шредингера для волновой функции дырки, связанной на акцепторе, имеет вид

$$\hat{H}_L(k) \Psi(k) - \frac{e^2}{2\pi^2 \chi} \int \frac{d^3 q}{(k-q)^2} \Psi(q) = E \Psi(k), \quad (4)$$

где $\Psi(k)$ представляет собой четырехкомпонентный столбец, записанный в базисе u_μ , а второе слагаемое в левой части описывает кулоновское притяжение дырки к акцептору в k -представлении. Так как основное состояние акцептора имеет симметрию дна валентной зоны [16], волновые функции основного состояния Ψ_M должны преобразовываться по тому же представлению Γ_8 , что и функции дна зоны u_M , и их можно искать в виде

$$\Psi_M = \hat{P}(k) u_M, \quad (5)$$

где $\hat{P}(k)$ — инвариантный относительно преобразований кубической симметрии кристалла оператор. Как было показано в [6], в случае сферической симметрии гамильтониана \hat{H}_L оператор $\hat{P}(k)$ удобно выразить через операторы проектирования $\hat{\Lambda}^h$ и $\hat{\Lambda}'$:

$$\hat{P}(k) = [f_h(k) \hat{\Lambda}^h(k) + f_l(k) \hat{\Lambda}'(k)], \quad (6)$$

где $f_h(k)$ и $f_l(k)$ — некоторые функции, зависящие только от величины волнового вектора k . Квадраты модулей этих функций $f_h^2(k)$ и $f_l^2(k)$ дают функции распределения основного состояния дырки на акцепторе по состояниям

свободных дырок в валентной зоне [8, 10], причем из условия нормировки Ψ следует [объем кристалла принят равным $(2\pi)^3$]:

$$\frac{1}{2} \int d^3k [f_b^2(k) + f_l^2(k)] = 1. \quad (7)$$

В случае кубической симметрии оператор \hat{P} имеет более сложную структуру. Однако, как показано в *Приложении*, с точностью до $1 \div 2\%$ его вид совпадает с (6), где функции f_b и f_l следует считать кубическими, а не сферическими скалярами. Подставляя (5), (6) в уравнение Шредингера и действуя на него слева операторами $\hat{\Lambda}^b$ и $\hat{\Lambda}^l$, получаем систему матричных уравнений для оператора \hat{P} и функций $f_b(k)$ и $f_l(k)$

$$\begin{cases} (E_b(k) - E) f_b(k) \hat{\Lambda}^b(k) = \frac{e^2}{2\pi^2\kappa} \hat{\Lambda}^b(k) \hat{T}(k), \\ (E_l(k) - E) f_l(k) \hat{\Lambda}^l(k) = \frac{e^2}{2\pi^2\kappa} \hat{\Lambda}^l(k) \hat{T}(k), \end{cases} \quad (8)$$

где

$$\hat{T}(k) = \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} \hat{P}(q). \quad (9)$$

В случае сферической симметрии оператор $\hat{T}(k)$ коммутирует с операторами $\hat{\Lambda}^b(k)$ и $\hat{\Lambda}^l(k)$ и представлен в виде $\hat{T}(k) = \hat{T}_0(k)$, где

$$\hat{T}_0(k) = a_b(k) \hat{\Lambda}^b(k) + a_l(k) \hat{\Lambda}^l(k),$$

$$a_{b,l}(k) = \frac{1}{2} \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} \text{Sp} [\hat{\Lambda}^{b,l}(k) \hat{P}(q)], \quad (10)$$

а коэффициенты $a_{b,l}$ зависят только от модуля волнового вектора k . При наличии кубической анизотропии оператор T может не коммутировать с операторами $\hat{\Lambda}^{b,l}$ и в общем случае будет иметь вид

$$\hat{T}(k) = \hat{T}_0(k) + \hat{M}^b(k) + \hat{M}^l(k),$$

$$\hat{M}^{b,l}(k) = \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} \hat{\Lambda}^{b,l}(k) \hat{\Lambda}^b(q) \hat{\Lambda}^{l,b}(k) [f_b(q) - f_l(q)], \quad (11)$$

а коэффициенты $a_{b,l}$ являются кубическими, а не сферическими скалярами. Легко убедиться, что $\hat{M}^l(k) = [\hat{M}^b(k)]^+$ и в сферическом приближении $\hat{M}^b = \hat{M}^l = 0$. В случае кубической симметрии в правой части системы (8) появятся неэрмитовы операторы, \hat{M}^b — в первом и \hat{M}^l — во втором уравнении, пренебрежение которыми соответствует выбранному приближению. Вычислив функции f_b и f_l , можно найти операторы \hat{M}^b и \hat{M}^l и оценить таким образом погрешность данного приближения (см. *Приложение*).

Вычисляя в явном виде коэффициенты $a_b(k)$ и $a_l(k)$, получаем систему уравнений для функций f_b и f_l :

$$\left\{ \begin{aligned} (E_b(k) - E)f_b(k) &= \frac{e^2}{4\pi^2\kappa} \left\{ \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_b(q) \left[1 + \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_l(q) \left[1 - \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] \right\}, \\ (E_l(k) - E)f_l(k) &= \frac{e^2}{4\pi^2\kappa} \left\{ \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_b(q) \left[1 - \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_l(q) \left[1 + \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] \right\}, \end{aligned} \right. \quad (12)$$

где $L(k, q) = P_2(\cos \theta) + 3\nu(k_x k_y q_x q_y + k_x k_z q_x q_z + k_y k_z q_y q_z)/(k^2 q^2)$, $\cos \theta = (kq)/kq$, P_2 — полином Лежандра. Система (12) описывает основное состояние дырки на акцепторе в четырехкратно вырожденной валентной зоне типа Γ_8 с учетом гофрировки изоэнергетических поверхностей в выбранном приближении. В отсутствие гофрировки [$\nu = 0$, $\alpha(k) \equiv \alpha(q) \equiv 1$] система (12) становится точной и совпадает с полученной в работе [6] в рамках сферически-симметричного приближения.

Для анализа системы (12) удобно перейти к безразмерным единицам $\varepsilon = -E/\varepsilon_B$, $k = ka_B$, где $\varepsilon_B = e^4 m_b^0 / 2\kappa^2 \hbar^2$, $a_B = \kappa \hbar^2 / e^2 m_b^0$, $m_b^0 = m_0 / (\gamma_1 - 2\gamma)$ — масса тяжелой дырки в сферически-симметричном приближении. Безразмерные функции $f_{l, b} = f_{l, b} / a_B^{3/2}$ удовлетворяют системе уравнений

$$\left\{ \begin{aligned} (\varepsilon_b(k) + \varepsilon)f_b(k) &= \frac{1}{2\pi^2} \left\{ \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_b(q) \left[1 + \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_l(q) \left[1 - \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] \right\}, \\ (\varepsilon_l(k) + \varepsilon)f_l(k) &= \frac{1}{2\pi^2} \left\{ \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_b(q) \left[1 - \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{d^3q}{(k-q)^2} f_l(q) \left[1 + \frac{L(k, q)}{\alpha(k)\alpha(q)} \right] \right\}, \end{aligned} \right. \quad (13)$$

где

$$\varepsilon_{l, b}(k) = E_{l, b}(k)/\varepsilon_B = k^2 \left[\frac{1 + \beta}{2\beta} \pm \frac{1 - \beta}{2\beta} \frac{5}{2 + 3(1 + \nu)^{1/2}} \alpha(k) \right]. \quad (14)$$

Система (13) содержит два параметра, характеризующих валентную зону, — параметр анизотропии ν и отношение масс легкой и тяжелой дырок в сферическом приближении $\beta = (\gamma_1 - 2\gamma)/(\gamma_1 + 2\gamma)$. Функции $\alpha(k)$ и $\alpha(q)$, входящие в ядра системы интегральных уравнений, затрудняют ее анализ. Однако ситуация упрощается, если перейти к новым функциям $g_1(k)$ и $g_2(k)$, связанным с функциями $f_b(k)$ и $f_l(k)$ соотношениями

$$g_1(k) = f_b(k) + f_l(k), \quad g_2(k) = [f_b(k) - f_l(k)]/\alpha(k). \quad (15)$$

Система уравнений для новых функций имеет вид

$$\begin{cases} [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_1(k) - b(k) \varepsilon_2(k) g_2(k) = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3 q}{(k-q)^2} g_1(q) - \\ -b(k) \varepsilon_2(k) g_1(k) + b(k) [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2(k) = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3 q}{(k-q)^2} g_2(q) L(k, q), \end{cases} \quad (16)$$

где

$$\varepsilon_1 = k^2 \frac{1 + \beta}{2\beta}, \quad \varepsilon_2 = k^2 \frac{1 - \beta}{2\beta} \frac{5}{2 + 3(1 + \nu)^{1/2}}, \quad b(k) = [\alpha(k)]^2. \quad (17)$$

Входящие в систему (16) угловые функции $b(k)$ и $L(k, q)$ можно представить в виде разложения по сферическим угловым функциям

$$b(k) = 1 + \frac{2\pi}{5} \nu (2Y_{22}^* Y_{22} - Y_{22} Y_{22}^* - Y_{22}^* Y_{22}^* + 4Y_{21}^* Y_{21}), \quad (18a)$$

$$L(k, q) = P_2(\cos \theta) + \frac{2\pi}{5} \nu [[Y_{22}^*(\Omega_q) - Y_{2-2}^*(\Omega_q)] \times \\ \times [Y_{22}(\Omega_k) - Y_{2-2}(\Omega_k)] + 2 [Y_{2-1}^*(\Omega_q) Y_{2-1}(\Omega_k) + Y_{21}^*(\Omega_q) Y_{21}(\Omega_k)]], \quad (18b)$$

что существенно упрощает дальнейшие вычисления.

Кубическая симметрия волновых функций $f_h(k)$ и $f_l(k)$ и функции $\alpha(k)$ позволяет получить асимптотические выражения для f_h и f_l при $k=0$ и $k \rightarrow \infty$. Из системы (12) следует, что при любых значениях параметров β и ν $f_h(0) = f_l(0)$. В пределе $k \rightarrow \infty$ система (12) дает $f_{h,l}(k) \sim m_{h,l}(k)/k^4$, где $m_{h,l}(k)$ — массы тяжелой и легкой дырок в направлении k . Это выражение совпадает с полученным ранее в работе [7].

3. Как было показано выше, волновые функции основного состояния $f_h(k)$ и $f_l(k)$ должны быть инвариантны относительно преобразований кубической симметрии кристалла. Так как функция $\alpha(k)$ в свою очередь является кубическим инвариантом, волновые функции $g_1(k)$ и $g_2(k)$ должны удовлетворять всем преобразованиям кубической симметрии кристалла. В этом случае в качестве базовых функций можно выбрать кубические гармоники $|100\rangle$ [17], представляющие собой линейные комбинации сферических гармоник Y_{lm} , преобразующиеся по одномерному единичному неприводимому представлению A_1 [16] (символ $|l\gamma\mu\rangle$ в общем случае обозначает кристаллическую гармонику, являющуюся суперпозицией сферических гармоник Y_{lm} , преобразующихся по строке μ неприводимого представления γ точечной группы кристалла). Введем обозначение $T_l = |100\rangle$ и выпишем первые нормированные на 1 гармоники [17]:

$$T_0 = Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \\ T_4 = \frac{1}{2} \left(\frac{5}{6} \right)^{1/2} \{ Y_{4-4} + Y_{44} \} + \frac{1}{2} \left(\frac{7}{3} \right)^{1/2} Y_{40} = \\ = \frac{\sqrt{21}}{4\sqrt{\pi}} [k_x^4 + k_y^4 + k_z^4 - 3(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)] \frac{1}{k^4}. \quad (19)$$

Заметим, что входящая в систему уравнений функция $b(k)$ представляет собой точную суперпозицию кубических гармоник T_0 и T_4 :

$$b(k) = \alpha^2(k) = 2\sqrt{\pi} (1 + 0.6 \cdot \nu) T_0 - 2.4 \cdot \nu \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{21}} \cdot T_4. \quad (20)$$

При поиске волновых функций основного состояния $g_1(k)$ и $g_2(k)$ ограничимся их разложением до кубического инварианта четвертого порядка:

$$\begin{aligned} g_1(k) &= g_1^0(k) T_0(\Omega_k) + g_1^4(k) T_4(\Omega_k), \\ g_2(k) &= g_2^0(k) T_0(\Omega_k) + g_2^4(k) T_4(\Omega_k), \end{aligned} \quad (21)$$

где функции $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$, $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$, зависят только от модуля k . Подстановка функций (21) в систему (16) позволяет вычислить угловые интегралы в правой части системы и получить систему уравнений, содержащую кубические инварианты T_0 , T_4 , T_6 и T_8 . Приравнявая коэффициенты при T_0 и T_4 (оценку погрешности, связанной с пренебрежением коэффициентами при T_6 и T_8 , сделаем позднее), приходим к системе одномерных интегральных уравнений для функций $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$, $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$:

$$\left\{ \begin{aligned} (\varepsilon_1(k) + \varepsilon) g_1^0(k) - b_1 \varepsilon_2(k) g_2^0(k) + b_3 \varepsilon_2(k) g_2^4(k) &= \\ = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} q^2 dq M_1(k, q) g_1^0(q), \\ -b_1 \varepsilon_2(k) g_1^0(k) + b_1 [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^0(k) + b_3 \varepsilon_2(k) g_1^4(k) - b_3 [\varepsilon_1(k) + \\ + \varepsilon] g_2^4(k) &= \frac{2}{\pi} \left\{ b_1 \int_0^{\infty} q^2 dq M_2(k, q) g_2^0(q) - b_3 \int_0^{\infty} q^2 dq M_2(k, q) g_2^4(q) \right\}, \\ b_3 \varepsilon_2(k) g_2^0(k) + [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_1^4(k) - b_2 \varepsilon_2(k) g_2^4(k) &= \\ = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} q^2 dq M_3(k, q) g_1^4(q), \\ b_3 \varepsilon_2(k) g_1^0(k) - b_3 [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^0(k) - b_2 \varepsilon_2(k) g_1^4(k) + b_2 [\varepsilon_1(k) + \\ + \varepsilon] g_2^4(k) &= \frac{2}{\pi} \left\{ -b_3 \int_0^{\infty} q^2 dq M_2(k, q) g_2^0(q) + \int_0^{\infty} q^2 dq M_4(k, q) g_2^4(q) \right\}, \end{aligned} \right. \quad (22)$$

где $\varepsilon_1(k)$ и $\varepsilon_2(k)$ имеют вид (17), $b_1 = (1 + 0.6\nu)$, $b_2 = (1 + 321\nu/715)$, $b_3 = 1.2\nu/\sqrt{21}$. Ядра интегральных уравнений имеют вид

$$M_{1,2,3}(k, q) = \frac{1}{kq} Q_{0,2,4} \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right),$$

$$M_4(k, q) = \frac{1}{kq} \left\{ Q_4 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) \cdot P_2 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \right.$$

$$\left. + \nu \left[\frac{4}{35} Q_2 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \frac{60}{847} Q_4 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \frac{415}{1573} Q_6 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) \right] \right\}, \quad (23)$$

где P_2 — полином Лежандра, Q_1 — функции Лежандра второго рода. Далее систему (22) можно решить численно.

4. Для численного решения системы (22) необходимо сначала избавиться от особенностей в ядрах интегральных уравнений. Это можно сделать аналитически. Затем описанным в [6] способом бесконечный интервал интегрирования сводится к интервалу $[0, 1]$ и по схеме Фредгольма система линейных интегральных уравнений сводится к системе однородных линейных уравнений.

а) Зонные параметры алмазоподобных полупроводников по данным [2, 19, 20]

Полупроводник	κ	γ_1	γ_2	γ_3	β	ν
Ge [2]	15.36	13.35	4.25	5.69	0.133	0.792
InSb [2]	17.9	35.08	15.64	26.91	0.034	0.169
InP [2]	12.4	6.28	2.08	2.76	0.116	0.761
GaP [2]	10.75	4.20	0.98	1.66	0.204	1.869
GaAs [2]	12.56	7.65	2.41	3.28	0.132	0.852
GaAs [19]	12.53	6.85	2.10	2.90	0.141	0.907
GaAs [20]	12.56	6.98	2.25	2.88	0.141	0.636

б) Энергия связи основного состояния акцептора

Полупроводник	E_B , эВ	E_i , эВ	E, мэВ		E, мэВ [4]	
			E_a	E_v	E_a	E_v
			Ge	18.45	10.8 (B)	9.78
InSb	18.63	9.25 (Ge)	8.64	9.26	8.55	9.146
InP	67.72	41.3 (C)	35.16	37.81	35.20	37.79
GaP	82.66	54.3 (C)	47.43	50.63	47.40	50.95
GaAs [2]	48.4		25.6	27.5		
GaAs [19]	51.1	27.0 (C)	27.3	29.1		
GaAs [20]	50.0				25.82	27.86

Примечание. Здесь κ — диэлектрическая проницаемость, γ_1 , γ_2 и γ_3 — параметры Латтинжера, β — отношение масс легкой и тяжелой дырок в сферическом приближении, ν — параметр анизотропии валентной зоны, E_B — эффективная боровская энергия тяжелой дырки, E_i — экспериментальное значение энергии связи основного состояния акцептора [19], E_a и E_v — теоретические значения энергии связи основного состояния акцептора в сферическом приближении и с учетом кубической симметрии.

В результате численного решения системы (22) были найдены собственные значения ϵ и коэффициенты разложения волновых функций $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$, $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$, при разных значениях параметров β и ν . Обнаружено, что с ростом величины параметра анизотропии валентной зоны ν растет энергия связи основного состояния при данном β . Этот результат согласуется с выводом работы [3] об отсутствии связанных с кубической симметрией поправок в первом порядке теории возмущений, так как поправка второго порядка всегда приводит к увеличению энергии связи [18]. Полученные результаты для гофрировочных поправок к энергиям связи основного состояния мелкого акцептора в кубических полупроводниках хорошо согласуются с расчетом [4]. В таблице приведены рассчитанные в рамках предложенной модели энергии основного состояния акцептора в ряде кубических полупроводников. Здесь же приведены значения, полученные в работе [4]. Видно, что в случае Ge, InSb и GaAs вычисленные с учетом гофрировки валентных зон энергии связи основного состояния акцептора хорошо согласуются с экспериментальными данными. В случае InP и GaP расхождение может быть связано как с большой величиной химического сдвига, так и с неадекватностью модели, предполагающей большую величину спин-орбитального расщепления валентной зоны.

Вычисления также показали, что при всех значениях параметров значения коэффициентов $g_1^4(k)$ и $g_2^4(k)$ составляют не более 10% от значений ко-

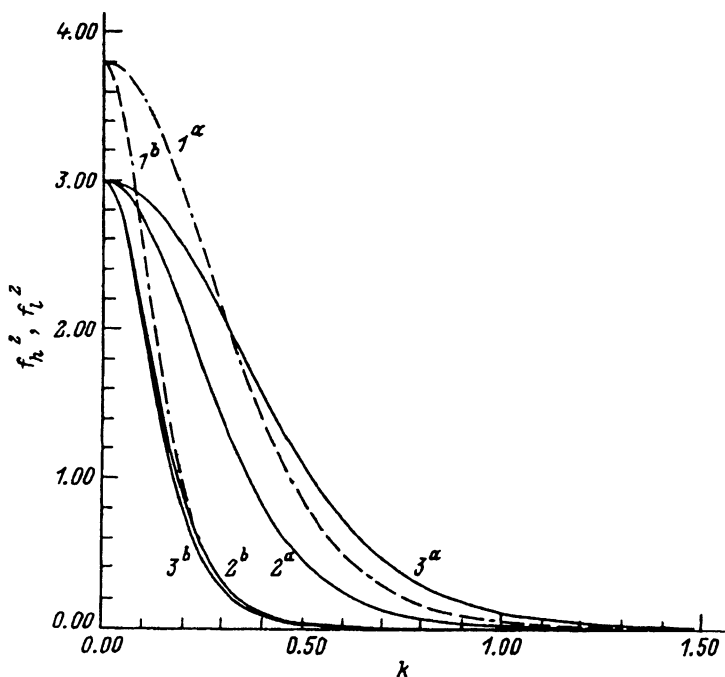


Рис. 1. Распределение тяжелых дырок f_b^2 (1^a , 2^a , 3^a) и легких дырок f_l^2 (1^b , 2^b , 3^b) по импульсам в GaAs для сферически симметричного приближения (1 a, b) и направлений $\langle 001 \rangle$ (2 a, b) и $\langle 111 \rangle$ (3 a, b). Здесь величины f_b^2 и f_l^2 приведены в единицах a_B^3 , волновой вектор k в единицах $1/a_B$, $a_B = \hbar^2 \kappa / m_b e^2 = 11.8 \text{ \AA}$.

эффициентов $g_1^0(k)$ и $g_2^0(k)$ соответственно. Это позволяет оценить погрешность, допущенную при пренебрежении коэффициентами при кубических инвариантах T_6 и T_8 . Например, старший коэффициент при T_6 в первом уравнении имеет величину порядка $0.1\nu g_2^4(k)$. Это в сто раз меньше старшего коэффициента при T_0 , $g_1^0(k)$, и в 30 раз меньше старшего коэффициента при T_4 , $\sim 0.3\nu g_2^0$. Соответственно значение неучтенных в разложении (21) коэффициентов при следующих кубических инвариантах будет составлять не более 1% от старших коэффициентов $g_1^0(k)$ и $g_2^0(k)$. Таким образом, с точностью порядка 1% функции $f_b(k)$ и $f_l(k)$ имеют вид

$$f_{b,l}(k) = \frac{1}{2} \{ [g_1^0(k) \pm \alpha(k) g_2^0(k)] T_0 + [g_1^4(k) \pm \alpha(k) g_2^4(k)] T_4 \}. \quad (24)$$

В случае сферической симметрии [$\nu=0$, $\alpha(k) \equiv 1$] $g_1^4(k) \equiv g_2^4(k) \equiv 0$. При наличии анизотропии валентной зоны ($\nu \neq 0$) анизотропия функций $f_{b,l}(k)$ определяется кубическим инвариантом T_4 и функцией $\alpha(k)$, определяющей анизотропию законов дисперсии легких и тяжелых дырок. Поскольку при $\nu \neq 0$ кубический инвариант T_4 также выражается через функцию $\alpha(k)$ [см. (20)], в рамках данного приближения анизотропия импульсных волновых функций основного состояния полностью определяется анизотропией закона дисперсии валентной зоны: $f_{b,l}(k) \equiv f_{b,l}[k, \alpha(k)]$.

На рис. 1 приведены распределения легких и тяжелых дырок по импульсам для направлений $\langle 001 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, рассчитанные для параметров GaAs: $\gamma_1 = 7.65$,

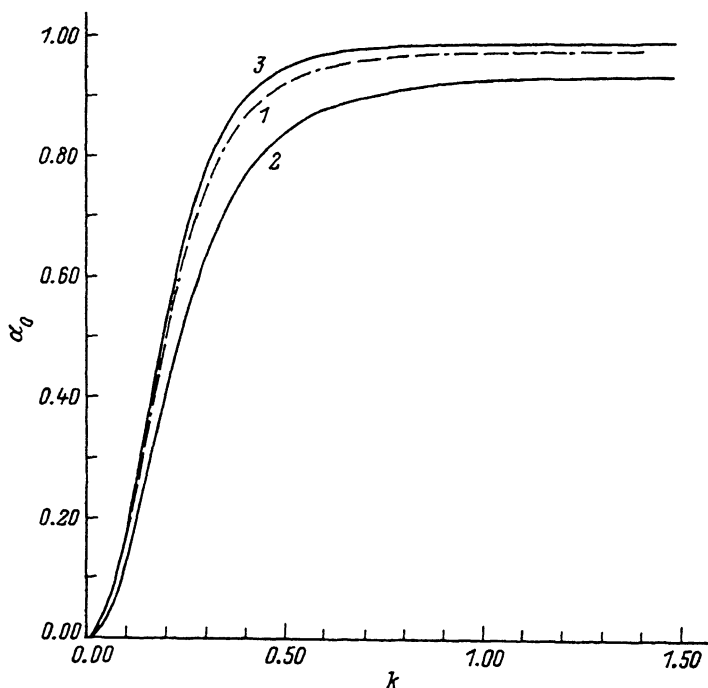


Рис. 2. Разность относительных вкладов тяжелых и легких дырок в волновую функцию акцептора $\alpha_0(\mathbf{k}) = [f_h^2(\mathbf{k}) - f_l^2(\mathbf{k})] / [f_h^2(\mathbf{k}) + f_l^2(\mathbf{k})]$ в GaAs для сферически симметричного приближения (1) и направлений $\langle 001 \rangle$ (2) и $\langle 111 \rangle$ (3). Здесь волновой вектор \mathbf{k} приведен в единицах $1/a_B$, $a_B = 11.8 \text{ \AA}$.

$\gamma_2 = 2.41$, $\gamma_3 = 3.28$ [2]. Штриховыми линиями показаны результаты расчета в сферически-симметричном приближении. Видно, что анизотропия сильнее влияет на функцию распределения тяжелых дырок, как и на закон дисперсии тяжелых дырок. Функция распределения легких дырок носит почти изотропный характер. При этом разность относительного вклада легких и тяжелых дырок в волновую функцию акцептора, определяющаяся функцией $\alpha_0(\mathbf{k}) = [f_h^2(\mathbf{k}) - f_l^2(\mathbf{k})] / [f_h^2(\mathbf{k}) + f_l^2(\mathbf{k})]$, также зависит от направления импульса. На рис. 2 показано поведение функции $\alpha_0(\mathbf{k})$ для направлений $\langle 001 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ и в сферически-симметричном приближении в GaAs.

Из рис. 1, 2 видно, что, начиная со значений волнового вектора $k \approx 0.5 \div 0.6$ (это соответствует 4 обратным боровским радиусам легкой дырки a_l), вклад легких дырок в функцию распределения мал и отклонения величины α_0 от асимптотических значений не превышает 5%. Таким образом, в области значений волнового вектора, удовлетворяющей условию $ka_l \gg 4$ (это соответствует кинетической энергии электрона, превосходящей 100 мэВ), можно считать, что волновая функция основного состояния акцептора приближенно состоит лишь из состояний подзоны тяжелых дырок. Однако вплоть до значений $k \approx 1.5$ относительный вклад состояний с разными k еще не описывается асимптотической формулой и требует точного расчета.

В заключение отметим, что достигнутая в представленной работе точность ($1 \div 2\%$) расчета волновой функции основного состояния кулоновского акцепторного центра для дырки с моментом $J = 3/2$ представляется достаточной. Дело в том, что для реальных акцепторных центров поправки к волновым функциям основного состояния, обусловленные отклонением вида притягива-

ющего потенциала от кулоновского (потенциал центральной ячейки) и конечностью величины спин-орбитального расщепления валентной зоны, как правило, превосходят несколько процентов.

Авторы благодарны В. И. Перелю и Д. Н. Мирлину за многочисленные дискуссии и Е. Л. Ивченко за критические замечания, стимулировавшие детальную оценку точности полученных результатов.

Приложение

Оценим погрешность приближения, связанного с выбором волновой функции основного состояния в виде (5), (6).

Представим оператор \hat{P} в виде суперпозиции четного относительно операции инверсии времени оператора \hat{P}_c и нечетного оператора \hat{P}_o : $\hat{P} = \hat{P}_c + \hat{P}_o$ [16]. Связанное с инверсией времени вырождение собственных значений гамильтониана \hat{H}_L сохраняется и для акцепторных уровней, поэтому функции Ψ_M должны быть связаны теми же соотношениями крамерсового сопряжения, что и функции u_M [16]. Это накладывает на оператор \hat{P} условие коммутации с оператором инверсии времени K , выполнимое, только если эрмитово сопряженный к \hat{P} оператор имеет вид $\hat{P}^+ = \hat{P}_c - \hat{P}_o$. При этом операторы \hat{P}_c и \hat{P}_o удовлетворяют системе матричных уравнений:

$$\{\hat{H}_L(\mathbf{k}) \hat{P}_c(\mathbf{k})\} + [\hat{H}_L(\mathbf{k}) \hat{P}_o(\mathbf{k})] - \frac{e^2}{2\pi^2\kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \hat{P}_c(\mathbf{q}) = E \hat{P}_c(\mathbf{k}),$$

$$[\hat{H}_L(\mathbf{k}) \hat{P}_c(\mathbf{k})] + \{\hat{H}_L(\mathbf{k}) \hat{P}_o(\mathbf{k})\} - \frac{e^2}{2\pi^2\kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \hat{P}_o(\mathbf{q}) = E \hat{P}_o(\mathbf{k}), \quad (\text{П. 1})$$

где $\{ab\} = (ab + ba)/2$, $[ab] = (ab - ba)/2$. В сферически-симметричном приближении нечетного относительно инверсии времени сферического скаляра не существует. Появление нечетной части в кубическом случае соответствует малому подмешиванию в волновую функцию, преобразующуюся по строке m , блоховской функции u_{-m} , связанному с тем, что при наличии кубической симметрии волновая функция основного состояния является суперпозицией функций с разными значениями полного момента, преобразующимися по представлению Γ_8 [4]. Пренебрегая нечетным оператором \hat{P}_o , получим из системы (П. 1), что четный оператор \hat{P}_c должен коммутировать с гамильтонианом \hat{H}_L . Это соответствует выбору оператора \hat{P} в виде (6). Погрешность такого приближения характеризуется отличием от нуля операторов \hat{M}^b и \hat{M}^l , определяемых выражением (11). Для предельных значений волнового вектора $k=0$ и $k \rightarrow \infty$, а также для направлений \mathbf{k} вдоль осей кристалла x , y и z , $\hat{M}^{b,l}(\mathbf{k}) \equiv 0$ и приближение является точным. С другой стороны, для найденного вида волновых функций f_b и f_l выражение для $\hat{M}^{b,l}$ приобретает вид

$$\hat{M}^{b,l}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \hat{\Lambda}^{b,l}(\mathbf{k}) \hat{\Lambda}^b(\mathbf{q}) \hat{\Lambda}^{l,b}(\mathbf{k}) \alpha(\mathbf{q}) T_4(\mathbf{q}) g_2^A(\mathbf{q}). \quad (\text{П. 2})$$

Пренебрежение в разложении (21) коэффициентами при T_4 , как было показано выше, приводит к погрешности в вычислении функции $f_{b,l}$ порядка 10%. Учет коэффициентов при T_4 позволяет вычислить функции $f_{b,l}$ для реальных значений зонных параметров с точностью до 1%. Связанную с отличием от нуля операторов $\hat{M}^{b,l}$ погрешность оценим, действуя оператором $\hat{T}(\mathbf{k})$ на базисную функцию u_m . Согласно (11), получим, например,

$$\hat{\Lambda}^{h,l}(\mathbf{k}) \hat{T}(\mathbf{k}) u_m = a_{h,l}(\mathbf{k}) \hat{\Lambda}^{h,l}(\mathbf{k}) u_m + \hat{M}^{h,l}(\mathbf{k}) u_m. \quad (\text{П. 3})$$

Операторы $\hat{M}^{h,l}(\mathbf{k})$ являются кубическими инвариантами, и функции $\Phi_m^{h,l} = \hat{M}^{h,l}(\mathbf{k}) u_m$ преобразуются по строке m представления Γ_8 . Нетрудно показать, что функцию $\Phi_m^{h,l}$ можно представить в виде разложения

$$\Phi_m^{h,l}(\mathbf{k}) = C_{mm}^{h,l}(\mathbf{k}) \hat{\Lambda}^{h,l}(\mathbf{k}) u_m + C_{-mm}^{h,l}(\mathbf{k}) \hat{\Lambda}^{h,l}(\mathbf{k}) u_{-m}. \quad (\text{П. 4})$$

Величины $|C_{mm}^h(\mathbf{k})|$ и $|C_{-mm}^h|$ равны по порядку величины, и для оценки погрешности достаточно, например, сравнить величину $|C_{-mm}^h|$ с оставленной в разложении (П. 3) величиной $|a_h(\mathbf{k})|$. Величина $|a_h(\mathbf{k})|$ может быть оценена из системы уравнений (13) снизу как $|a_h| \geq I_1$, где

$$I_1 = \pi^2 [\varepsilon + \varepsilon_h(\mathbf{k}_{111})] |f_h(\mathbf{k}_{001})|, \quad (\text{П. 5})$$

а \mathbf{k}_{111} и \mathbf{k}_{001} — направления волнового вектора вдоль осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$ соответственно. Выражение (П. 2) позволяет получить для величины $|C_{-mm}^h|$ оценку сверху в виде $|C_{-mm}^h| \leq I_2$, где

$$I_2 = \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} |T_4(\mathbf{q})| \cdot |g_2^4(\mathbf{q})|. \quad (\text{П. 6})$$

Прямой расчет для найденных ранее функций $f_{h,l}$ позволяет убедиться, что величина I_2 составляет порядка 2% от величины I_1 . Таким образом, для реальных значений зонных параметров полупроводников волновые функции основного состояния акцептора найдены с точностью до $1 \div 2\%$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Б. Л. Гельмонт, М. И. Дьяконов. ФТП, 5, 2191 (1971).
- [2] A. Balderesci, N. O. Lipari. Phys. Rev. B, 8, 2697 (1973).
- [3] A. Balderesci, N. O. Lipari. Phys. Rev. B, 9, 1525 (1974).
- [4] А. Ф. Полупанов, Р. Таскинбоев. ФТП, 22, 112 (1988).
- [5] Ш. М. Коган, А. Ф. Полупанов. ФТП, 13, 2338 (1979).
- [6] Б. Л. Гельмонт, А. В. Родина. ФТП, 25, 2189 (1991).
- [7] В. Д. Дымников, Д. Н. Мирлин, В. И. Перель, И. И. Решина. ФТТ, 20, 2165 (1978).
- [8] В. Д. Дымников, В. И. Перель, А. Ф. Полупанов. ФТП, 16, 235 (1982).
- [9] М. А. Алексеев, И. Я. Карлик, И. А. Меркулов, Д. Н. Мирлин, Ю. Т. Ребане, В. Ф. Сапега. ФТТ, 27, 2650 (1985).
- [10] Б. П. Захарченя, Д. Н. Мирлин, В. И. Перель, И. И. Решина. УФН, 23, 761 (1982).
- [11] R. G. Ulbrich, J. A. Kash, J. C. Tsang. Phys. Rev. Lett., 62, 949 (1989).
- [12] J. A. Kash. Phys. Rev. B, 40, 3455 (1989).
- [13] J. A. Kash, Phys. Rev. B, 47, 1221 (1993).
- [14] J. M. Luttinger. Phys. Rev., 102, 1030 (1956).
- [15] Б. Л. Гельмонт, В. И. Иванов-Омский, И. М. Цидильковский. УФН, 120, 337 (1976).
- [16] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука (1972).
- [17] Д. Т. Свиридов, Ю. Ф. Смирнов. Теория оптических спектров переходных металлов. М.: Наука (1977).
- [18] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. М.: Наука, (1989).
- [19] Landolt-Borstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, 17, subvol. a. Springer Verlag (1982).
- [20] M. S. Skolnick; A. K. Jain, R. A. Stradling, J. Leotin, J. C. Ousset, S. Askenazy. J. Phys. C, 9, 2809 (1976).