

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ НЕКУЛОНОВСКОГО АКЦЕПТОРА В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

© А.В.Малышев, И.А.Меркулов, А.В.Родина

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 24 апреля 1995 г. Принята к печати 26 апреля 1995 г.)

В импульсном представлении получена и численно решена система интегральных уравнений, описывающая основное состояние кубически-симметричного некулоновского акцептора (с учетом отличия реального потенциала от кулоновского) в алмазоподобном полупроводнике. С точностью порядка 2% найдены волновые функции основного состояния для ряда акцепторов в полупроводнике типа GaAs.

Введение

Связанные состояния дырки на акцепторе в алмазоподобных полупроводниках исследовались в ряде теоретических работ [1-8,13], однако достаточно точного аналитического или численного решения задачи о кубически-симметричном некулоновском акцепторе (с учетом отличия реального потенциала от кулоновского) до сих пор не получено. В тоже время вид волновых функций основного состояния реального акцептора в кристаллах типа GaAs необходим для описания многих экспериментальных результатов, например, для интерпретации экспериментальных исследований горячей фотолюминесценции [7-9,14].

К настоящему моменту состояния сферически симметричного акцептора хорошо изучены, как в кулоновской модели [1,2,6], так и с учетом отличия потенциала мелкого акцептора от кулоновского [5,8]. Основные состояния кубически-симметричного акцептора исследовались до сих пор либо в кулоновской модели [3,4,7,13], либо в модели потенциала нулевого радиуса [15], использовавшейся для описания глубоких центров. В работе [13] был предложен новый способ приближенного расчета волновой функции основного состояния кулоновского акцептора Ψ , основанный на решении системы интегральных уравнений для Ψ в k -представлении и позволяющий выделить аналитическую зависимость волновой функции от направления волнового вектора. Асимптотика найденных в [13] решений совпадает с аналитическим выражением для асимптотики, найденным ранее в работе [7].

Настоящая работа посвящена расчету волновой функции основного состояния кубически-симметричного акцептора в алмазоподобных полупроводниках с учетом отличия реального потенциала от кулоновского.

Расчетные формулы и методы вычисления

1. Как хорошо известно, состояния свободной дырки в валентной зоне алмазоподобных полупроводников описывается гамильтонианом Латтинжера [10]:

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

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 ($\mu = \pm 3/2, \pm 1/2$); $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латтинжера, \mathbf{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 \mathbf{k} гамильтониан (1) имеет два двукратно вырожденные значения энергии:

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

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

дающие законы дисперсии легких и тяжелых дырок, величина параметра v характеризует анизотропию закона дисперсии. В импульсном представлении уравнение Шредингера для волновой функции дырки, связанной на акцепторе, имеет вид:

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

где E_a — энергия связи акцептора, $\Psi(\mathbf{k})$ и $V(\mathbf{k})$ — Фурье образы волновой функции и короткодействующего потенциала $V(\mathbf{r})$:

$$\Psi(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{r}] \Psi(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{k}) = \int d^3 \mathbf{r} \exp[-i\mathbf{k}\mathbf{r}] V(\mathbf{r}). \quad (5)$$

$\Psi(\mathbf{k})$ представляет собой четырехкомпонентный столбец, записанный в базисе u_μ , второе слагаемое в левой части уравнения (4) описывает кулоновское притяжение дырки к акцептору в \mathbf{k} -представлении, а третье слагаемое описывает действие некулоновской части потенциала центральной ячейки. Как показано в [13], волновые функции основного состояния Ψ можно искать в виде:

$$\Psi_M(\mathbf{k}) = \hat{P}(\mathbf{k})u_M, \quad (6)$$

где $\hat{P}(\mathbf{k})$ — инвариантный относительно преобразований кубической симметрии кристалла оператор. С точностью порядка 2% оператор $\hat{P}(\mathbf{k})$ можно представить в виде [13]:

$$\hat{P}(\mathbf{k}) = [f_h(\mathbf{k})\hat{\Lambda}_h(\mathbf{k}) + f_l(\mathbf{k})\hat{\Lambda}_l(\mathbf{k})], \quad (7)$$

$$\hat{\Lambda}^{l,h} = \mp \frac{\hat{H}_L(\mathbf{k}) - E_{h,l}(\mathbf{k})}{E_h(\mathbf{k}) - E_l(\mathbf{k})}, \quad (8)$$

где $\hat{\Lambda}^{l,h}$ — операторы проектирования на состояния легких и тяжелых дырок, а $f_h(\mathbf{k})$ и $f_l(\mathbf{k})$ — некоторые кубически симметричные функции, зависящие только от волнового вектора \mathbf{k} . Квадраты модулей этих функций $f_h^2(\mathbf{k})$ и $f_l^2(\mathbf{k})$ 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 равен $(2\pi)^3$):

$$\frac{1}{2} \int d^3\mathbf{k} [f_h^2(\mathbf{k}) + f_l^2(\mathbf{k})] = 1 \quad (9)$$

Подставляя (6), (7) в уравнение (4) и действуя на него слева операторами $\hat{\Lambda}^h$ и $\hat{\Lambda}^l$, получаем систему матричных уравнений для оператора $\hat{P}(\mathbf{k})$ и функций $f_h(\mathbf{k})$ и $f_l(\mathbf{k})$:

$$\begin{cases} [E_h(\mathbf{k}) - E_a]f_h(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^h(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi^2\kappa}\hat{\Lambda}^h(\mathbf{k})\hat{T}(\mathbf{k}) + \hat{\Lambda}^h(\mathbf{k})\hat{T}_1(\mathbf{k}) \\ [E_l(\mathbf{k}) - E_a]f_l(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^l(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{2\pi^2\kappa}\hat{\Lambda}^l(\mathbf{k})\hat{T}(\mathbf{k}) + \hat{\Lambda}^l(\mathbf{k})\hat{T}_1(\mathbf{k}) \end{cases}, \quad (10)$$

где

$$\hat{T}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} \hat{P}(\mathbf{q}), \quad (11)$$

$$\hat{T}_1(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{q} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \hat{P}(\mathbf{q}). \quad (12)$$

Как показано в [13], с точностью 2% оператор $\hat{T}(\mathbf{k})$ представим в виде $\hat{T}(\mathbf{k}) \equiv \hat{T}_0(\mathbf{k})$, где

$$\hat{T}_0(\mathbf{k}) = a_h(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^h(\mathbf{k}) + a_l(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^l(\mathbf{k}), \quad (13)$$

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

Будем искать оператор $\hat{T}_1(\mathbf{k})$ в виде:

$$\hat{T}_1(\mathbf{k}) = a_h^{(1)}(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^h(\mathbf{k}) + a_l^{(1)}(\mathbf{k})\hat{\Lambda}^l(\mathbf{k}) \quad (14)$$

$$a_{h,l}^{(1)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{q} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \text{Sp} [\hat{\Lambda}^{h,l}(\mathbf{k})\hat{P}(\mathbf{q})].$$

Вычислим в явном виде коэффициенты $a_{h,l}^{(1)}(\mathbf{k})$:

$$a_{h,l}^{(1)}(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{q} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) f_h(\mathbf{q}) \left[1 \pm \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right] + \\ + \int d^3\mathbf{q} V(\mathbf{k} - \mathbf{q}) f_l(\mathbf{q}) \left[1 \mp \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right],$$

где $L(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = P_2[\cos(\theta)] + 3v(k_x k_y q_x q_y + k_y k_z q_y q_z + k_z k_x q_z q_x) / k^2 q^2$, здесь θ — угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{q} , P_2 — полином Лежандра.

Будем считать, что короткодействующий потенциал $V(\mathbf{r})$, обуславливающий отличие реального потенциала от кулоновского, имеет симметрию не ниже кубической и отличен от нуля только в области $r \leq r_0 \ll r_a$, где r_0 — радиус потенциала, r_a — радиус основного состояния акцептора. В этом случае коэффициенты $a_{h,l}^{(1)}$ можно преобразовать к виду:

$$a_{h,l}^{(1)}(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \int d^3\mathbf{q} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \times \\ \times \left\{ [f_h(\mathbf{q}) + f_l(\mathbf{q})] \pm [f_h(\mathbf{q}) - f_l(\mathbf{q})] \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right\} \approx \\ \approx \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \int d^3\mathbf{q} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) \left\{ [f_h(\mathbf{q}) + f_l(\mathbf{q})] \pm [f_h(\mathbf{q}) - f_l(\mathbf{q})] \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right\} = \\ = \int d^3\mathbf{q} V(-\mathbf{q}) [f_h(\mathbf{q}) + f_l(\mathbf{q})] = A,$$

где A — не зависящая от волнового вектора константа. Способ вычисления константы A будет описан ниже.

С учетом явного вида коэффициентов $a_{h,l}$ [13], получим систему уравнений для функций $f_h(\mathbf{k})$, $f_l(\mathbf{k})$:

$$\left\{ \begin{aligned} (E_h(\mathbf{k}) - E_a) f_h(\mathbf{k}) &= \frac{e^2}{2\pi^2 \kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_h(\mathbf{q}) \left[1 + \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right] + \\ &+ \frac{e^2}{2\pi^2 \kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_l(\mathbf{q}) \left[1 - \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right] + A \\ (E_l(\mathbf{k}) - E_a) f_l(\mathbf{k}) &= \frac{e^2}{2\pi^2 \kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_h(\mathbf{q}) \left[1 - \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right] + \\ &+ \frac{e^2}{2\pi^2 \kappa} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_l(\mathbf{q}) \left[1 + \frac{L(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{\alpha(\mathbf{k})\alpha(\mathbf{q})} \right] + A. \end{aligned} \right. \quad (15)$$

Система (15) описывает основное состояние дырки на некулоновском акцепторе в четырехкратно вырожденной валентной зоне типа Γ_8 с учетом гофрировки изоэнергетических поверхностей.

Решение однородной системы, получающейся из (15) при $A = 0$, позволяет найти энергию связи и волновую функцию основного состояния кулоновского акцептора [13]. Константа A в правой части системы (15) отвечает короткодействующему потенциалу $V(\mathbf{r})$, конкретный вид которого не известен. Однако, считая энергию связи акцептора E_a параметром задачи и решая неоднородную систему (15), можно найти

волновую функцию основного состояния. В этом случае константа A определяется энергией связи акцептора и видом функций $f_h(\mathbf{k})$, $f_l(\mathbf{k})$.

Система (15) без кулоновских интегралов в правой части описывает основное состояние акцептора в модели потенциала нулевого радиуса [15]:

$$\begin{cases} [E_h(\mathbf{k}) - E_a]f_h(\mathbf{k}) = A_c \\ [E_l(\mathbf{k}) - E_a]f_l(\mathbf{k}) = A_c, \end{cases} \quad (16)$$

которая может быть решена аналитически:

$$f_{h,l}(\mathbf{k}) = \frac{A_c}{[E_{h,l}(\mathbf{k}) - E_a]}. \quad (17)$$

Константа A_c определяется из условия нормировки (9):

$$A_c = \left\{ \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{k} \left(\frac{1}{[E_h(\mathbf{k}) - E_a]^2} + \frac{1}{[E_l(\mathbf{k}) - E_a]^2} \right) \right\}^{-1/2}. \quad (18)$$

Для анализа системы (15) удобно перейти к безразмерным единицам и безразмерным функциям:

$$\varepsilon = -E_a/E_B, \quad \mathbf{k} = \mathbf{k}a_B,$$

$$f_{h,l} = f_{h,l}a_B^{-3/2}, \quad A = A/E_Ba_B^{3/2},$$

$$g_1(\mathbf{k}) = f_h(\mathbf{k}) + f_l(\mathbf{k}), \quad g_1(\mathbf{k}) = [f_h(\mathbf{k}) - f_l(\mathbf{k})]/\alpha(\mathbf{k}), \quad (19)$$

где $E_B = e^4m_h^0/2\kappa\hbar^2$, $a_B = \kappa\hbar^2/e^2m_h^0$, $m_h^0 = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma)$ — масса тяжелой дырки в сферически-симметричном приближении, а $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$.

Система уравнений для новых функций имеет вид:

$$\begin{cases} [\varepsilon_1(k) + \varepsilon]g_1(\mathbf{k}) - \alpha^2(k)\varepsilon_2(k)g_2(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} g_1(\mathbf{q}) + 2A \\ -\alpha^2(k)\varepsilon_2(k)g_1(\mathbf{k}) + \alpha^2(k)[\varepsilon_1(k) + \varepsilon]g_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} g_2(\mathbf{q})L(\mathbf{k}, \mathbf{q}), \end{cases} \quad (20)$$

где

$$\varepsilon_1(k) = \frac{1+\beta}{2\beta} k^2, \quad \varepsilon_2(k) = \frac{1-\beta}{2\beta} \frac{5}{2+3\sqrt{1+v}} k^2, \quad \beta = \frac{\gamma_1 - 2\gamma}{\gamma_1 + 2\gamma}. \quad (21)$$

Систему (20) можно записать в операторном виде:

$$\hat{G}(\varepsilon)\bar{g} = \hat{K}\bar{g} + \bar{b}(\varepsilon), \quad \bar{g} = \begin{pmatrix} g_1(\mathbf{k}) \\ g_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad \bar{b} = 2A \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

\hat{G} — оператор левой части, \hat{K} — интегральный оператор правой части. Поделив систему (22) на $2A$, получим систему уравнений для функций $\bar{g}' = (2A)^{-1}\bar{g}$:

$$\hat{G}(\varepsilon)\bar{g}' = \hat{K}\bar{g}' + \bar{b}'(\varepsilon), \quad \bar{b}' = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Найдя функцию \bar{g}' , можно найти константу A , пользуясь тем, что $f_{h,l}(k)$ нормированы условием (9):

$$A = \frac{1}{4} \left(\int d^3k \left[g_1'^2(k) + \alpha^2(k) g_2'^2(k) \right] \right)^{-1/2} \quad (24)$$

2. Систему (22) можно решать методом последовательных приближений. Подставляя n -ное приближение в интегралы в правой части системы (20), получаем систему уравнений для приближения $n+1$:

$$\bar{g}^{(n+1)} = \hat{G}^{-1} \hat{K} \bar{g}^{(n)} + \hat{G}^{-1} \bar{b}. \quad (25)$$

Следуя [13], нулевое приближение функций $g_1(k)$, $g_2(k)$ будем искать в виде разложения по кубическим инвариантам, в котором мы оставим только два первых члена:

$$\begin{aligned} g_1(k) &= q_1^0(k) T_0(\Omega_k) + g_1^4(k) T_4(\Omega_k), \\ g_2(k) &= q_2^0(k) T_0(\Omega_k) + g_2^4(k) T_4(\Omega_k), \end{aligned} \quad (26)$$

где Ω_k — телесный угол, а T_0, T_4 — кубические скаляры [11]:

$$T_0 = Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \quad T_4 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{6}} (Y_{4-4} + Y_{44}) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{7}{3}} Y_{40}, \quad (27)$$

Y_{lm} — шаровые функции [12], а функции $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$, $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$ зависят только от модуля k .

Подстановка функций (26) в систему (20) приводит к системе одномерных интегральных уравнений для функций $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$ и $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$:

$$\left\{ \begin{aligned} & [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_1^0(k) - b_1 \varepsilon_2(k) g_2^0(k) + b_3 \varepsilon_2(k) g_2^4(k) = \\ & \quad = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty q^2 dq M_1(k, q) q_1^0(q) + 2A/T_0 \\ & b_3 \varepsilon_2(k) g_2^0(k) + [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_1^4(k) - b_2 \varepsilon_2(k) g_2^4(k) = \\ & \quad = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty q^2 dq M_3(k, q) g_1^4(q) \\ & -b_1 \varepsilon_2(k) g_1^0(k) - [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^0(k) + b_3 \varepsilon_2(k) g_1^4(k) - b_3 [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^4(k) = \\ & \quad = \frac{2}{\pi} \left[b_1 \int_0^\infty q^2 dq M_2(k, q) g_2^0(q) - b_3 \int_0^\infty q^2 dq M_2(k, q) g_2^4(q) \right] \\ & b_3 \varepsilon_2(k) g_1^0(k) - b_3 [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^0(k) - b_2 \varepsilon_2(k) + b_2 [\varepsilon_1(k) + \varepsilon] g_2^4(k) = \\ & \quad = \frac{2}{\pi} \left[-b_3 \int_0^\infty q^2 dq M_2(k, q) g_2^0(q) - \int_0^\infty q^2 dq M_4(k, q) g_2^4(q) \right], \end{aligned} \right. \quad (28)$$

где

$$b_1 = (1 + 0.6v), \quad b_2 = \left(1 + \frac{321}{715} v \right), \quad b_3 = \frac{1.2v}{\sqrt{21}}, \quad (29)$$

$\varepsilon_1(k)$, $\varepsilon_2(k)$ имеют вид (21), а ядра интегральных уравнений

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

$$M_4(k, q) = \frac{1}{kq} Q_4 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) P_2 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \\ + \frac{v}{kq} \left[\frac{4}{35} Q_2 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \frac{60}{847} Q_4 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) + \frac{415}{1573} Q_6 \left(\frac{k^2 + q^2}{2kq} \right) \right]. \quad (30)$$

Здесь P_2 — полином Лежандра, Q_l — функции Лежандра второго рода. Систему (28) можно решить численно и найти нулевое приближение решения системы (20) в виде (26).

3. Описанным в [13] способом система линейных интегральных уравнений (28) сводится к неоднородной системе линейных уравнений. В результате численного решения системы (28) были найдены коэффициенты разложения волновых функций $g_1^0(k)$, $g_1^4(k)$, $g_2^0(k)$, $g_2^4(k)$, дающие нулевое приближение для $f_{h,l}(\mathbf{k})$:

$$f_{h,l}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \{ [g_1^0(k) \pm \alpha(k)g_2^0(k)] T_0 + [g_1^4(k) \pm \alpha(k)g_2^4(k)] T_4(\Omega_k) \}. \quad (31)$$

В случае сферической симметрии ($v = 0$) коэффициенты $g_2^0(k) = g_2^4(k) \equiv 0$, $\alpha(\mathbf{k}) \equiv 1$. При этом нулевое приближение является точным.

В случае кубической симметрии погрешность нулевого приближения связана с пренебрежением кубическими гармониками T_6 , T_8 и т.д., которые появляются в разложении интегрального оператора \hat{K} и оператора \hat{G}^{-1} . Анализ показывает, что основная погрешность связана с пренебрежением высшими гармониками в разложении оператора \hat{G}^{-1} , причем точность разложения оператора \hat{G}^{-1} по гармоникам T_0 и T_4 составляет 5% в области $k \leq 1/a_B$ и порядка 10% в области $k \geq 2/a_B$, что дает косвенную оценку точности нулевого приближения. При этом интегральные величины, такие как нормировочная константа A или энергия связи кулоновского акцептора E_a , рассчитанная в работе [13], считаются с точностью порядка 0.2%. В работе [13] волновые функции кулоновского кубического акцептора были найдены в нулевом приближении.

Будем искать волновую функцию первого приближения в виде (25). После подстановки нулевого приближения (26) в правую часть системы (22) и выполнения интегрирования по углам мы получим разложение интегрального оператора \hat{K} по кубическим гармоникам T_0 , T_4 , T_6 , T_8 . Слагаемые при гармониках T_6 , T_8 в разложении оператора \hat{K} малы. Пренебрегая ими и учитывая оператор $\hat{G}^{-1}(\varepsilon)$ точно, находим волновую функцию первого приближения, точность которого уже порядка 2% для произвольного \mathbf{k} . Как нетрудно увидеть при этом, зависимость волновой функции от направления вектора \mathbf{k} полностью определяется функцией $\alpha(\mathbf{k})$. Действительно, анизотропия волновой функции в первом приближении определяется функциями $\alpha(\mathbf{k})$, T_0 , T_4 , но T_4 можно точно выразить через $\alpha^2(\mathbf{k})$ и T_0 [13]. Дальнейшее уточнение решения системы (20) не имеет смысла, т.к. сама система (20) написана с точностью порядка 2%.

Результаты вычислений и их обсуждение

Из сказанного выше ясно, что с точностью порядка 2% угловая зависимость импульсных волновых функций основного состояния определяется анизотропией закона дисперсии валентной зоны:

$$f_{h,l}(\mathbf{k}) = f_{h,l}[k, \alpha(\mathbf{k})].$$

Как показано в [14] это обстоятельство оказывается существенным при описании характеристик горячей фотолюменесценции.

Анализ системы (15) показывает, что, как и в случае кулоновского акцептора [13], $f_h(\mathbf{k})$, $f_l(\mathbf{k})$ совпадают при $\mathbf{k} = 0$:

$$f_h(0) = f_l(0).$$

Асимптотика волновых функций существенно отличается от кулоновской, найденной в работе [7]: $f_{h,l}(\mathbf{k}) \propto m_{h,l}(\mathbf{k})/k^4$. Уже при 10%-ном отличии энергии связи от кулоновской волновые функции имеют асимптотику потенциала нулевого радиуса (здесь и далее \mathbf{k} приводится в единицах $1/a_B$):

$$f_{h,l}(\mathbf{k}) \approx \frac{A}{\varepsilon_{h,l}(\mathbf{k})} \propto \frac{m_{h,l}(\mathbf{k})}{k^2} \quad (k \geq 10),$$

где $\varepsilon_{h,l}(\mathbf{k}) = E_{h,l}(\mathbf{k})/E_B$. Значение константы A растет с ростом энергии связи, однако остается меньше соответствующего значения A_c .

В области $0 \leq k \leq 10$ поведение волновых функций носит более сложный характер и не может быть описано с помощью простых аналитических формул. Для получения представления о поведении волновых функций в промежуточной области мы приводим результаты численного расчета.

Ниже на рисунках приводятся зависимости $f_h^2(\mathbf{k})$ и $f_l^2(\mathbf{k})$, дающие функции распределения основного состояния дырки на акцепторе по состояниям свободных дырок в валентной зоне. Функции $f_h^2(\mathbf{k})$ и $f_l^2(\mathbf{k})$ нормированы условием (9) и представляют собой пару кривых, совпадающих при $k = 0$. Верхняя кривая каждой пары соответствует $f_h^2(\mathbf{k})$, нижняя — $f_l^2(\mathbf{k})$.

На рис.1 приведены распределения легких f_l^2 (кривые 1.L–3.L) и тяжелых f_h^2 (кривые 1.H–3.H) дырок по импульсам для направлений $\langle 001 \rangle$ (сплошные линии) и $\langle 111 \rangle$ (штриховые линии), рассчитанные в разных моделях для параметров GaAs [2] $\gamma_1 = 7.65$, $\gamma_2 = 2.41$, $\gamma_3 = 3.28$ и энергии акцептора $E_a = 31$ мэВ (Zn). Линиями 1.H, 1.L показаны результаты нашего расчета, линиями 2.H, 2.L — результаты расчета [13], полученные в кулоновском приближении и уточненные с помощью описанной выше итерационной процедуры, а линиями 3.H, 3.L — аналитические результаты, полученные в модели потенциала нулевого радиуса (17).

Для промежуточных направлений функция $\alpha(\mathbf{k})$ (3) лежит в пределах $\alpha_{001} \leq \alpha \leq \alpha_{111}$, а значения волновых функций лежат между значениями функции для направлений $\langle 001 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

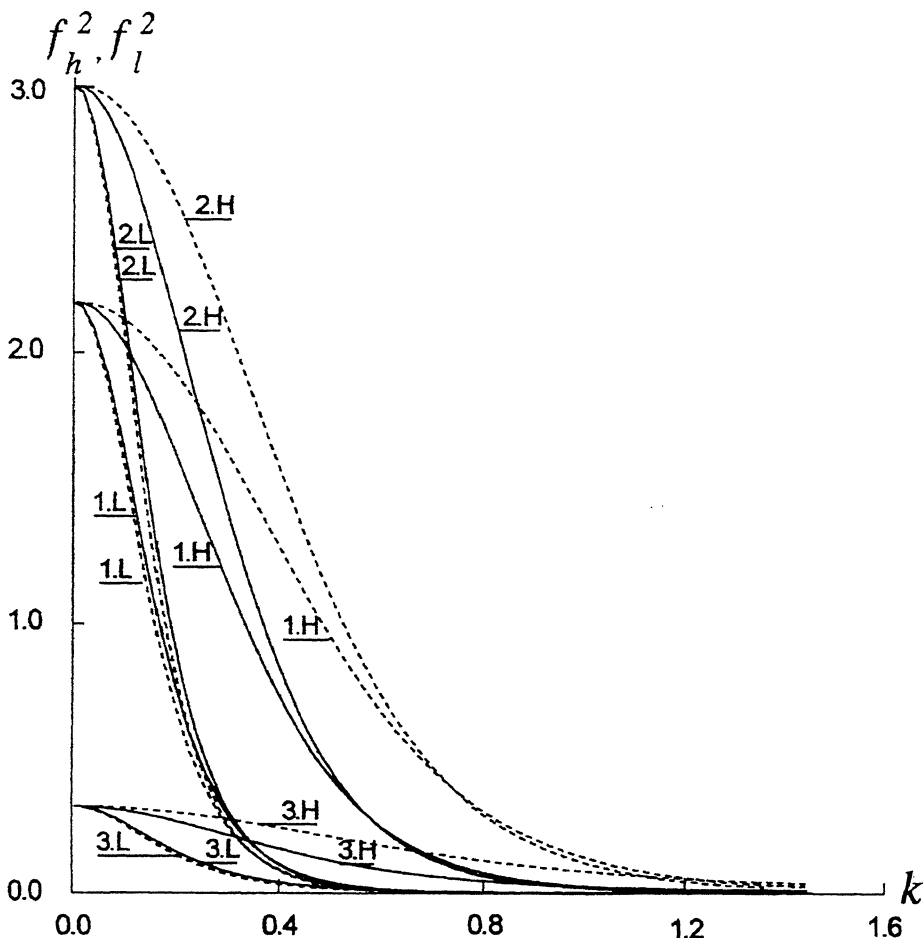


Рис. 1. Функции $f_h^2(k)$ (1H-3H), $f_l^2(k)$ (1L-3L), рассчитанные для акцептора Zn в GaAs ($E_a = 31$ мэВ). Функции рассчитаны для направлений $\langle 001 \rangle$ (сплошные линии) и $\langle 111 \rangle$ (штриховые линии) в разных моделях: 1H, 1L — реальная модель, описанная в настоящей статье, 2H, 2L — кулоновская модель [13], 3H, 3L — модель потенциала нулевого радиуса. Здесь и далее функции f_h^2, f_l^2 приводятся в единицах a_B^3 , а волновой вектор k — в единицах a_B^{-1} .

Из рис. 1 видно, что в случае акцептора Zn ($E_a = 31$ мэВ) реальные волновые функции ближе к кулоновским, чем к функциям потенциала нулевого радиуса. Видно также, что независимо от модели анизотропии закона дисперсии тяжелых дырок сильнее влияет на функцию распределения тяжелых дырок, в то время как функция распределения легких дырок носит почти изотропный характер. Разность относительного вклада легких и тяжелых дырок в волновую функцию акцептора, определяемая функцией

$$\beta_0(k) = \frac{f_h^2(k) - f_l^2(k)}{f_h^2(k) + f_l^2(k)},$$

также зависит от направления импульса. На рис. 2 приведены функции $\beta_0(\mathbf{k})$ для Zn ($E_a = 31$ мэВ) для направлений $\langle 001 \rangle$ (сплошная кривая) и $\langle 111 \rangle$ (штриховая кривая). Функции $\beta_0(\mathbf{k})$ выходят на асимптотику с точностью порядка 5% при $k \simeq 1$, в то время как волновые функции выходят на асимптотику при $k \simeq 10$. Заметим, что асимптотическое значение функции $\beta_0(\mathbf{k})$ остается таким же, как в случае кулоновского акцептора [13], и определяется соотношением масс легкой и тяжелой дырок. Как и волновые функции, реальные функции $\beta_0(\mathbf{k})$ для акцептора Zn ближе к кулоновским, чем к функциям потенциала нулевого радиуса.

Ранее расчет волновых функций для Zn в GaAs был выполнен в сферически симметричном приближении [5]. Для сравнения с результатами работы [5] можно в системе (15) положить параметр анизотропии $v = 0$. В этом случае мы получим систему, описывающую основное состояние сферического акцептора. Решение системы (15) (при условии $v = 0$) совпадает с волновыми функциями из работы [5] с точностью $\leq 2\%$ в области $k \leq 1$ и с точностью порядка 5% в области $k \geq 1$. Заметное расхождение с результатами работы [5] в области $k \geq 1$ возможно связано с тем, что в работе [5] было использовано \mathbf{r} -представление, в котором волновая функция расходится в 0. Это может привести к появлению заметной ошибки при выполнении преобразования Фурье в области больших \mathbf{k} , для которой основной вклад в интеграл Фурье вносит область малых значений вектора \mathbf{r} .

Далее мы будем приводить результаты для направления $\langle 011 \rangle$, поскольку, как показано в [14], оно представляет наибольший интерес для описания характеристик горячей фотолюминесценции.

На рис. 3 приведены результаты расчета волновых функции для направления $\langle 011 \rangle$ для разных акцепторов: Be (28 мэВ), Zn (31 мэВ), Ge (40 мэВ) и кулоновского акцептора (27.4 мэВ) в GaAs. Несмотря на сильное различие функций в области малых k , все функции на рис. 3 нормированы одним условием (9). Дело в том, что в (9) интегрирование ведется с весом k^2 , так что наибольший вклад в нормировочный интеграл дает область $k \simeq 1$, в которой функции для разных акцепторов примерно совпадают.

Волновую функцию можно характеризовать двумя параметрами: значением при $k = 0$ $f(0)$ и полушириной Δf (шириной на половине высоты). Зависимости значения функции в нуле и полуширины от энергии связи приведены на рис. 4. Видно, что с ростом энергии связи значение волновой функции в нуле уменьшается, а полуширина функции растет. Это можно объяснить тем, что при увеличении энергии связи волновая функция сжимается в \mathbf{r} -представлении, что соответствует расширению волновой функции в \mathbf{k} -представлении. При этом для сохранения нормировки необходимо уменьшить значение функции в области малых \mathbf{k} .

Функции $\beta_0(\mathbf{k})$ для того же набора акцепторов и того же направления показаны на рис. 5. С ростом энергии связи функция $\beta_0(\mathbf{k})$ выходит на асимптотику при больших значениях \mathbf{k} . Это связано с тем, что $\beta_0(\mathbf{k})$ насыщается при условии $k \gg \epsilon$, из которого видно, что чем больше ϵ , тем позже наступает насыщение.

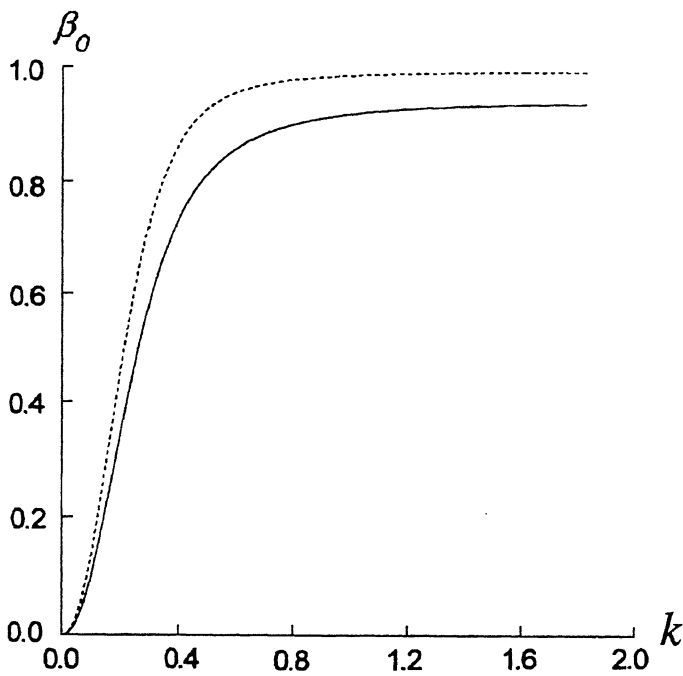


Рис. 2. Функции $\beta_0(k)$, рассчитанные для акцептора Zn в GaAs ($E_a = 31$ мэВ), для направлений $\langle 001 \rangle$ (сплошная линия) и $\langle 111 \rangle$ (штриховая линия).

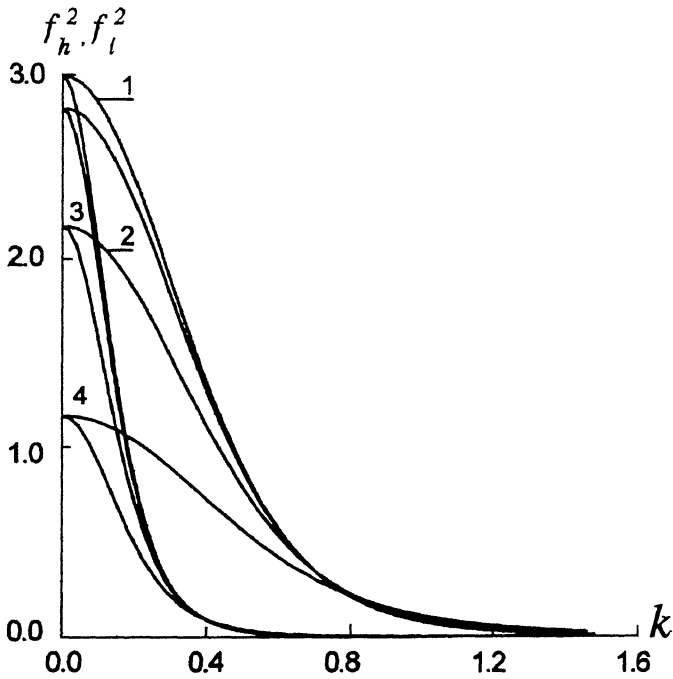


Рис. 3. Функции $f_h^2(k)$, $f_l^2(k)$, рассчитанные для разных акцепторов в GaAs для направления $\langle 011 \rangle$: 1 — кулоновский акцептор ($E_a = 27.4$ мэВ [13]), 2 — Be ($E_a = 28$ мэВ), 3 — Zn ($E_a = 31$ мэВ), 4 — Ge ($E_a = 40$ мэВ).

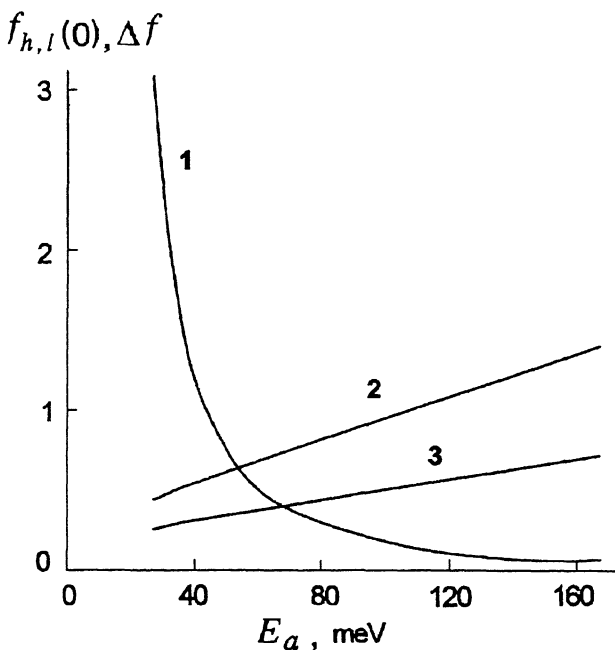


Рис. 4. Зависимость функций $f_h^2(0)$, $f_l^2(0)$ (кривая 1) и их полуширины Δf (кривые 2, 3) от энергии связи E_a для направления $\langle 011 \rangle$.

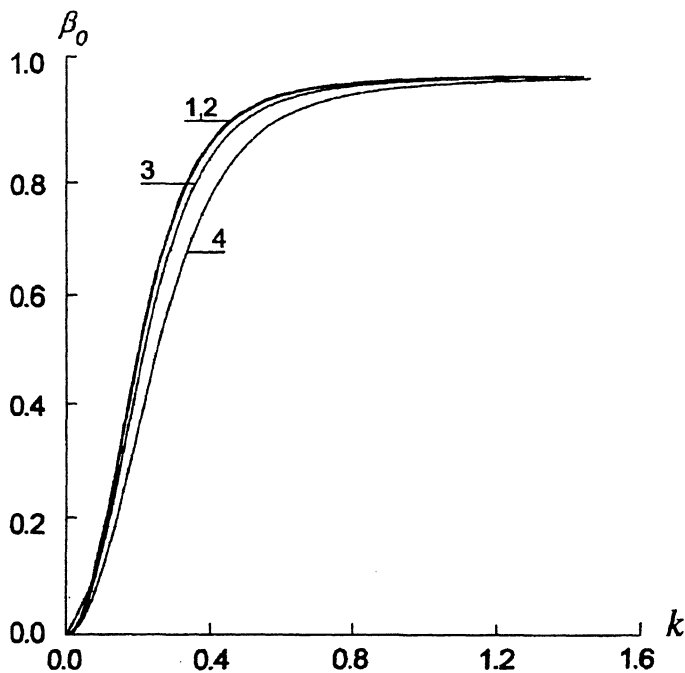


Рис. 5. Функции $\beta_0(k)$, рассчитанные для разных акцепторов в GaAs для направления $\langle 011 \rangle$: 1 — кулоновский акцептор ($E_a = 27.4$ мэВ [13]), 2 — Be ($E_a = 28$ мэВ), 3 — Zn ($E_a = 31$ мэВ), 4 — Ge ($E_a = 40$ мэВ).

Нами были рассчитаны волновые функции для разных акцепторов и для всех направлений с точностью порядка 2%, причем зависимость от направления известна в аналитическом виде.

В заключение отметим, что достигнутая в представленной работе точность (2%) расчета волновой функции основного состояния 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 конечностью величины спин-орбитального расщепления валентной зоны, как правило превосходят несколько процентов.

Авторы благодарны Российскому фонду фундаментальных исследований (грант 95-02-04061), Международному научному фонду и Российскому правительству (грант JF2100) за частичную финансовую поддержку выполненных исследований, а также И.Н. Яссиевич за обсуждение модели потенциала нулевого радиуса.

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.J. 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] J.M. Luttinger. Phys. Rev., 102, 1030, (1956).
- [11] Д.Т. Свиридов, Ю.Ф. Смирнов. *Теория оптических спектров переходных металлов*. (М.: Наука, 1977).
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика*. (М.: Наука, 1989).
- [13] И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП, 28, 321, (1994).
- [14] И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП, 28, 1268, (1994).
- [15] В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. ЖЭТФ, 82, 237, (1982).

Редактор Т.А. Полянская

The Ground-state Wavefunctions of Noncoulomb Acceptor in Diamond-Like Semiconductor.

A.V. Malyshev, I.A. Merkulov, A.V. Rodina

A.F.Ioffe Physical Technical Institute, Russian Academy of Sciences,
194021 St.Petersburg, Russia

System of integral equations for the ground-state wavefunction of cubic noncoulomb acceptor in diamond like semiconductor was obtained and numerically solved. Difference between the real potential and the coulomb potential was taken into account. The ground-state wavefunctions for a set of acceptors in GaAs-type semiconductors were calculated within 2% accuracy.