ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ДЫРКИ НА МНОГОЗАРЯДНОМ АКЦЕПТОРЕ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ СО СТРУКТУРОЙ АЛМАЗА

Гельмонт Б. Л., Родина А. В.

В импульсном представлении получены и численно решены интегральные уравнения для волновой функции дырки, связанной на многозарядном акцепторном центре в полупроводнике со сложной структурой валентной зоны, для двух предельных случаев большой и малой величин спин-орбитального расщепления Δ. Рассчитаны зависимости энергии связи основного состояния от отношения масс легкой и тяжелой дырок β. Получено распределение по импульсам связанных на акцепторе легких и тяжелых дырок для разных значений β. Предложен критерий применимости рассмотренных моделей для описания многозарядных центров в алмазоподобных полупроводниках. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В полупроводниках со структурой алмаза или цинковой обманки (Ge, Si, InSb, GaAs и др.) вершина валентной зоны многократно вырождена. Необходимость учитывать сложную зонную структуру значительно затрудняет теоретические исследования связанных состояний дырки на примесных центрах. В то же время ясные представления о спектре и волновых функциях этих состояний представляют большой интерес для оптических исследований, например для описания горячей люминесценции, обусловленной рекомбинацией электронов с дырками, связанными на акцепторе [1–3]. В настоящей работе построена теория многозарядного акцепторного центра в полупроводниках с вырожденной валентной зоной для двух предельных случаев большой и малой величин спин-орбитального расщепления Δ. Рассмотрены z-зарядные «водородоподобные» акцепторы, для которых справедливо соотношение $|E_z^i| < E_B z^2$, где $|E_z^i|$ — последний потенциал ионизации z-зарядного центра, $E_B = e^2 m_h / 2\varkappa^2\hbar^2$ — боровская энергия тяжелой дырки, m_h — масса тяжелой дырки, e — заряд электрона, $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость полупроводника. Гофрировка изоэнергетических поверхностей не учитывается. Уравнение Шредингера, описывающее движение дырки в кулоновском потенциале, в импульсном представлении имеет вид

$$\hat{H}_0(\mathbf{k})\,\Psi(\mathbf{k}) - \frac{e^2 z}{2\pi^2\varkappa}\int \frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}\,\Psi(\mathbf{q}) = E_z \Psi(\mathbf{k}). \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{k}$ — волновой вектор дырки, $\hat{H}_0(\mathbf{k})$ — эффективный гамильтониан, описывающий дырку в вырожденной валентной зоне. Данное уравнение справедливо для мелких акцепторных уровней, удовлетворяющих условию $|E_z| \ll E_g$, где E_g — ширина запрещенной зоны. При $z=1$ оно определяет энергию основного состояния однозарядного акцептора E_1 (энергию перехода $A_1^0 \to A_1^-$), при $z=2$ — второй потенциал ионизации двухзарядного акцептора E_2 ($A_2^- \to A_2^{--}$) и т. д. Вид эффективного гамильтониана $\hat{H}_0(\mathbf{k})$ зависит от соотношения между $|E_z|$ и величиной спин-орбитального расщепления Δ. В случае $|E_z| \ll \Delta$ в качестве $\hat{H}_0(\mathbf{k})$ может быть выбран четырехзонный гамильтониан Латтинжера $\hat{H}_0^4(\mathbf{k})$, имеющий в сферическом приближении вид [4]

$$\hat{H}_0^4(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\left(\gamma_1^l + \frac{5}{2}\gamma^l\right)k^2 - 2\gamma^l(\mathbf{kJ})^2\right], \tag{2}$$

где m_0 — масса свободного электрона, J_x, J_y, J_z — числовые (4×4) матрицы проекций момента, соответствующие значению $J=3/2$; $\gamma^l=(3\gamma_3^l+2\gamma_2^l)/5$; γ_1^l, γ_2^l, γ_3^l — параметры Латтинжера [4], связанные с массами легкой m_l и тяжелой m_h дырок соотношениями $m_l=m_0/(\gamma_1^l+2\gamma^l)$, $m_h=m_0/(\gamma_1^l-2\gamma^l)$, $\gamma_1^l>2\gamma^l>0$. Волновая функция $\Psi(\mathbf{k})$ представляет собой четырехкомнатный столбец.

В случае $|E_z|\gg\Delta$ рассмотрение может быть ограничено трехзонным гамильтонианом Латтинжера [4] $\hat{H}_0^3(\mathbf{k})$:

$$\hat{H}_0^3(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2}{m_0}\left[\frac{1}{2}(\gamma_1+2\gamma)k^2-2\gamma(\mathbf{kL})^2\right], \tag{3}$$

где L_x, L_y, L_z — числовые (3×3) матрицы проекций момента для состояний с p-симметрией [4]. Параметры γ_1 и γ связаны с параметрами Латтинжера соотношениями $\gamma_1=(\gamma_1^l+\gamma^l)$, $\gamma=3\gamma^l/2$. Массы легкой и тяжелой дырок у вершины валентной зоны по-прежнему связаны с параметрами Латтинжера, однако при энергиях $|E_z|\gg\Delta$ масса легкой дырки меняется и дается выражением $m_l=m_0/(\gamma_1+ +2\gamma)=m_0/(\gamma_1^l+4\gamma^l)$. Волновая функция $\psi(\mathbf{k})$ представляет собой трехмерный столбец с компонентами $\psi_x(\mathbf{k})$, $\psi_y(\mathbf{k})$, $\psi_z(\mathbf{k})$.

В рамках соответствующего гамильтониану (2) приближения связанные состояния акцептора рассматривались в работах [1, 5-9]. Энергия основного состояния и радиальные волновые функции связанной на акцепторе дырки находились путем численного [1, 5, 9] или вариационного [6-8] решения системы дифференциальных уравнений в координатном пространстве. В работе [1] для ряда конкретных полупроводников по рассчитанным ранее радиальным волновым функциям [9] было определено распределение связанных на акцепторе дырок по импульсам. Асимптотическое поведение волновой функции акцептора в импульсном представлении при больших значениях k исследовалось в [10]. Авторы [8] вариационным методом искали зависимость энергии основного состояния однозарядного акцептора от параметров полупроводника для случаев $\Delta=\infty$ и $\Delta=0$, однако им не удалось определить конечные значения энергии в пределе $\beta=0$ и показать, что она всегда порядка боровской энергии тяжелой дырки.

В настоящей работе мы рассмотрим уравнение (1) с эффективными гамильтонианами (2) и (3) в импульсном представлении. Оказывается, что в общем случае произвольного соотношения масс легкой и тяжелой дырок β уравнение (1) может быть сведено к системе двух интегральных уравнений с параметром β. В результате численного решения этой системы будут рассчитаны зависимости $E_z(\beta)$ для случаев $\Delta=\infty$, $\Delta=0$ и волновые функции связанной на акцепторе дырки в импульсном представлении. Будет показано, что значение E_1, полученное в модели $\Delta=\infty$, хорошо описывает энергию ионизации однозарядного акцептора в Ge, а значение E_3, полученное в модели $\Delta=0$, — третий потенциал ионизации трехзарядного акцептора в Si.

Рассмотрим вначале случай $\Delta=\infty$. Как показано в работе [7], гамильтониан (2) может быть представлен в виде

$$\hat{H}_0^4(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}\Lambda^h(\mathbf{k})+\frac{\hbar^2k^2}{2m_l}\Lambda^l(\mathbf{k}), \tag{4}$$

где $\Lambda^l(\mathbf{k})$ и $\Lambda^h(\mathbf{k})$ — операторы проектирования на состояния легких и тяжелых дырок соответственно:

$$\begin{aligned}\Lambda^h(\mathbf{k})&=\frac{1}{2}\left[\frac{(\mathbf{kJ})^2}{k^2}-\frac{1}{4}\right],\\ \Lambda^l(\mathbf{k})&=\frac{1}{2}\left[\frac{9}{4}-\frac{(\mathbf{kJ})^2}{k^2}\right],\end{aligned} \tag{5}$$

а волновая функция основного состояния — в виде

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{k})&=\Psi^h(\mathbf{k})+\Psi^l(\mathbf{k}),\\ \Psi^h(\mathbf{k})&=\Lambda^h(\mathbf{k})\,\Psi(\mathbf{k}),\\ \Psi^l(\mathbf{k})&=\Lambda^l(\mathbf{k})\,\Psi(\mathbf{k}),\end{aligned} \tag{6}$$

где $\psi^h(\mathbf{k})$ — волновой пакет, состоящий из тяжелых дырок, а $\psi^l(\mathbf{k})$ — из легких. Действуя на уравнение (1) слева операторами $\Lambda^l(\mathbf{k})$ и $\Lambda^h(\mathbf{k})$, перейдем к системе уравнений для функций $\psi^l(\mathbf{k})$ и $\psi^h(\mathbf{k})$ [7]

$$\begin{gathered}\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}\Psi^h(\mathbf{k})-\frac{e^2z}{2\pi^2\varkappa}\Lambda^h(\mathbf{k})\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}\Psi(\mathbf{q})=E_z\Psi^h(\mathbf{k}),\\ \frac{\hbar^2k^2}{2m_l}\Psi^l(\mathbf{k})-\frac{e^2z}{2\pi^2\varkappa}\Lambda^l(\mathbf{k})\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}\Psi(\mathbf{q})=E_z\Psi^l(\mathbf{k}).\end{gathered}\tag{7}$$

Уравнения (7) представляют собой систему восьми интегральных уравнений. Размерность этой системы может быть понижена, если искать решение в виде

$$\Psi(\mathbf{k})=[f_h(k)\Lambda^h(\mathbf{k})+f_l(k)\Lambda^l(\mathbf{k})]\chi,\tag{8}$$

где χ — постоянный, не зависящий от $\mathbf{k}$ четырехмерный столбец с одной отличной от нуля строкой (основное состояние акцептора четырехкратно вырождено [5, 7]). Функции $f_h(k)$ и $f_l(k)$ представляют собой распределения связанных на акцепторе легких и тяжелых дырок по импульсам и нормированы условием

$$\int_0^\infty k^2dk\,[f_h^2(k)+f_l^2(k)]=\frac{1}{2\pi},\tag{9}$$

следующим из условия нормировки полной волновой функции (8) [объем кристалла принят равным $(2\pi)^3$].

Подстановка функции (8) в систему (7) дает систему интегральных уравнений для функций $f_h(k)$ и $f_l(k)$

$$\begin{gathered}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}-E_z\right)f_h(k)=\frac{e^2z}{8\pi^2\varkappa}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1+\frac{3(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.\\ \left.+3\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\},\\ \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_l}-E_z\right)f_l(k)=\frac{e^2z}{8\pi^2\varkappa}\left\{3\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.\\ \left.+\int\frac{d^2\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\left[1+\frac{3(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\}.\end{gathered}\tag{10}$$

Как видно из (10), независимо от величины $\beta=m_l/m_h$ в точке $k=0$ имеет место равенство $f_l(0)=f_h(0)$. В пределе $\beta=0$ имеем $f_l(k)\equiv 0$, т. е. волновая функция акцептора сформирована только из пакета тяжелых дырок [7] [заметим, что формально $f_l(0)=f_h(0)$ и при $\beta=0$]. В этом случае из системы (10) получается известное интегральное уравнение для функции $f_h(k)$ [7]

$$\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}-E_z\right)f_h(k)=\frac{e^2z}{8\pi^2\varkappa}\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1+\frac{3(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right].\tag{11}$$

В случае $m_l=m_h$ ($\beta=1$) система (10) переходит в уравнение для дырки с простым параболическим законом дисперсии.

Для решения системы интегральных уравнений (10) удобно перейти к безразмерным единицам

$$k=ka_Bz,\quad \varepsilon=-E_z/(E_Bz^2),\tag{12}$$

где $a_B=\hbar^2\varkappa/m_he^2$ — боровский радиус тяжелой дырки. В результате получаем систему интегральных уравнений, в которую β входит как параметр простейшим образом,

$$\begin{gathered}(k^2+\varepsilon)f_h(k)=\frac{1}{4\pi^2}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}j_h(q)\left[1+\frac{3(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.\\ \left.+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(k-\mathbf{q})^2}f_l(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\},\end{gathered}\tag{13}$$

$$\left(\frac{k^2}{\beta}+\varepsilon\right) f_l(k)=\frac{1}{4\pi^2}\left\{3\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_h(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.$$
$$\left.+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2} f_l(q)\left[1+\frac{3(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\}.$$

Опишем кратко метод решения системы (13). Сферическая симметрия функций $f_h(q)$ и $f_l(q)$ позволяет аналитически выполнить угловое интегрирование в правой части и получить систему двух одномерных интегральных уравнений. Ядра этих уравнений в точке $p=q$ имеют слабую (логарифмическую) особенность, которую можно проинтегрировать аналитически. Вводя новые функции $f_{hh}(q)=f_h(1/q)$ и $f_{ll}(q)=f_l(1/q)$, приходим к системе четырех интегральных уравнений на отрезке [0, 1], которая решается численно по методу Фред-

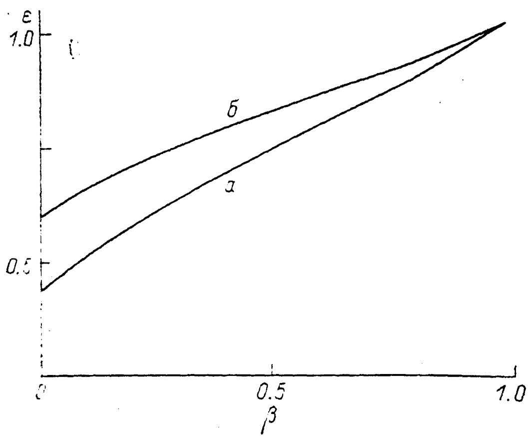

Рис. 1. Зависимость энергии основного состояния z-зарядного акцептора $\varepsilon=-E_z/(E_B z^2)$ от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\beta=m_l/m_h$ для случаев $\Delta=\infty$ (*а*) и $\Delta=0$ (*б*).

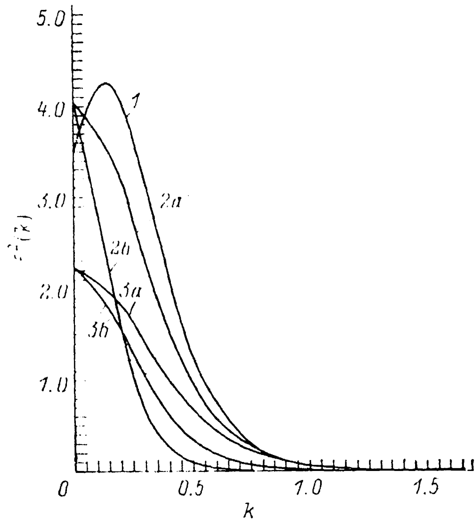

Рис. 2. Распределение тяжелых f_h^2 (*1*, *2а* и *3а*) и легких f_l^2 (*б*) (*2б* и *3б*) дырок по импульсам в случае $\Delta=\infty$ для значений $\beta=0$, 0.2 и 0.5 соответственно.

Величины f_h^2 и f_l^2 здесь в ед. a_B^3, волновой вектор k в ед. $1/a_B$.

гольма [11]. Важно отметить, что численный метод решения системы интегральных уравнений (13) точнее метода Рунге—Кутта [12], использованного в [5, 9] для решения эквивалентной (13) системы дифференциальных уравнений, отвечающей рассмотрению акцептора в координатном пространстве. Это обстоятельство обусловлено прежде всего тем, что система дифференциальных уравнений [5, 9] имеет два линейно независимых решения, конечных в начале координат. Как следствие, возникает необходимость решать задачу на собственные значения с двумя неизвестными константами. Оба конечных в начале координат решения при малом отклонении от собственных значений экспоненциально нарастают, что приводит к неустойчивости метода и проблеме выбора шага [12]. Кроме того, значительные проблемы порождает наличие особой точки в начале координат. Эти трудности отсутствуют при решении системы интегральных уравнений.

На рис. 1, *а* приведена полученная в результате численного решения системы (13) зависимость $\varepsilon(\beta)$. Предельному случаю $\beta=0$ соответствует значение $\varepsilon=0.436$. Как следует из сказанного выше, это значение точнее известного ранее значения $\varepsilon=4/9$, полученного в [5] путем численного решения системы дифференциальных уравнений. Решение системы (13) дает также распределение связанных на акцепторе дырок по импульсам. На рис. 2 приведены зависимости $f_h^2(k)$ и $f_l^2(k)$ для разных значений β. На рис. 3 представлена характеризующая относительный вклад в волновую функцию акцептора легких и тяжелых дырок функция $\alpha(k)=[f_h^2(k)-f_l^2(k)]/[f_h^2(k)+f_l^2(k)]$ для разных значений β. Как известно, этот относительный вклад определяет степени линейной и циркулярной поляризации люминесценции, обусловленной рекомбинацией электронов и связанных на акцепторе дырок [1] [для $\beta=0$ $\alpha(k)=1$, для $\beta=1$ $\alpha(k)=0$].

При малых β, как и было показано ранее [10], волновая функция акцептора при больших импульсах в основном сформирована из тяжелых дырок. При возрастании β область импульсов, в которой легкие дырки дают сравнимый вклад в волновую функцию, быстро расширяется. Спад волновой функции с ростом импульса удовлетворяет известной ранее [10] аппроксимации $f_h \sim 1/k^4$, $f_l \sim$ $\sim \beta/k^4$.

Выясним теперь область применимости модели четырехзонного гамильтониана. Так как при любом соотношении масс легкой и тяжелой дырок величина $\varepsilon \sim 1$ (т. е. $|E_z| \sim E_B z^2$), необходимо сравнивать $E_B z^2$ с величиной спин-орбитального расщепления Δ. Следовательно, модель четырехзонного гамильтониана ($\Delta=\infty$) хорошо описывает z-зарядные центры, для которых справедливо соотношение $\delta=\Delta/(E_B z^2) \gg 1$.

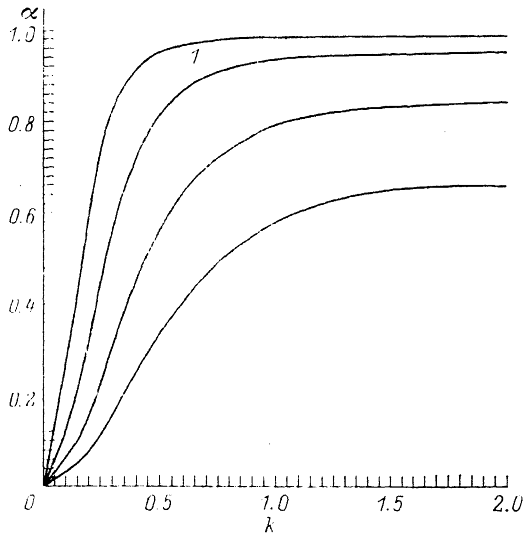

Рис. 3. Зависимость величины $\alpha(k)=$ $=[f_h^2(k)-f_l^2(k)]/[f_h^2(k)+f_l^2(k)]$ в случае $\Delta=\infty$ для значений $\beta=0.1$ (*1*), 0.2 (*2*), 0.3 (*3*) и 0.5 (*4*).

Волновой вектор k здесь в ед. $1/a_E$.

Для сравнения приведем данные для Ge [13]: $E_B=$ $=0.018$ эВ ($m_h=0.34m_0$, $\varkappa=16$), $E_g=0.664$ эВ, $\Delta=0.3$ эВ, $\beta=0.13$. Оказывается, что $\delta=16.67 \gg 1$ для $z=1$, $\delta=1.85$ для $z=3$ и модель хорошо описывает энергию основного состояния однозарядного акцептора E_1 (в рамках метода эффективной массы, не учитывающего потенциал центральной ячейки), хуже — второй потенциал ионизации E_2 двухзарядного акцептора, для $z=3$ модель становится неадекватной. Для однозарядного акцептора в Ge мы получили значение $E_1=$ $=-0.010$ эВ ($\varepsilon=0.528$), тогда как известно экспериментальное значение $E_1^i=$ $=-0.011$ эВ (Al) [13].

Рассмотрим теперь второй предельный случай $\Delta=0$. Представим трехзонный гамильтониан (3) в виде

$$\hat{H}_0^3(\mathbf{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}\Lambda^h(\mathbf{k})+\frac{\hbar^2k^2}{2m_l}\Lambda^l(\mathbf{k}), \tag{14}$$

где $m_{l,h}=m_0/(\gamma_1\pm 2\gamma)$ — массы связанных на акцепторе легкой и тяжелой дырок,

$$\begin{gathered}\Lambda^h(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k})=\frac{1}{k^2}[[\mathbf{k}\times\Psi(\mathbf{k})]\times\mathbf{k}],\\ \Lambda^l(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{k})=\frac{1}{2}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{k}\cdot\Psi(\mathbf{k})),\end{gathered} \tag{15}$$

а волновую функцию основного состояния — в виде $\psi(\mathbf{k})=\psi^h(\mathbf{k})+\psi^l(\mathbf{k})$. Функции $\psi^h(\mathbf{k})$ и $\psi^l(\mathbf{k})$ представляют собой трехмерные столбцы и удовлетворяют системе шести интегральных уравнений вида (7). Для произвольного соотношения масс легкой и тяжелой дырок β будем искать решение в виде

$$\Psi(\mathbf{k})=[f_h(\mathbf{k})\Lambda^h(\mathbf{k})+f_l(k)\Lambda^l(\mathbf{k})]\mathbf{M}, \tag{16}$$

где $\mathbf{M}$ — постоянный, не зависящий от $\mathbf{k}$ вектор с одной отличной от нуля компонентой (основное состояние трехкратно вырождено, а с учетом спинового вырождения — шестикратно). Функции $f_h(k)$ и $f_l(k)$ нормированы теперь условием

$$\int_0^\infty k^2 dk\,[2f_h^2(k)+f_l^2(k)]=\frac{3}{4\pi}. \tag{17}$$

После подстановки функции $\psi(\mathbf{k})$ в виде (16) в систему (7) получаем систему интегральных уравнений для $f_h(\mathbf{k})$ и $f_l(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}-E_z\right)f_h(k)&=\frac{e^2z}{4\pi^2\varkappa}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1+\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.\\&\left.+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\},\\ \frac{1}{2}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_l}-E_z\right)f_l(k)&=\frac{e^2z}{4\pi^2\varkappa}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\right.\\&\left.+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\cdot\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right\}.\end{aligned} \tag{18}$$

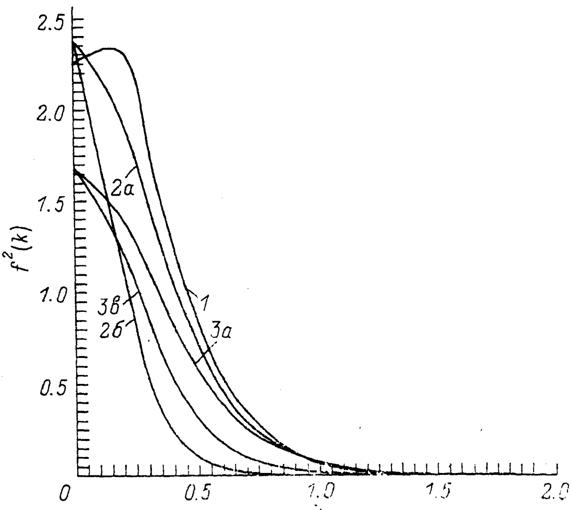

Рис. 4. Распределение тяжелых f_h^2 (*1*, *2а* и *3а*) и легких f_l^2 (*б*) (*2б* и *3б*) дырок по импульсам в случае $\Delta=0$ для значений $\beta=0$, 0.2 и 0.5 соответственно.

Величины f_h^2 и f_l^2 здесь в ед. a_B^3, волновой вектор k в ед. $1/a_B$.

Как и в случае $\Delta=\infty$, независимо от значения $\beta=m_l/m_h$ в точке $k=0$ имеем $f_l(0)=f_h(0)$, при $\beta=1$ система (18) переходит в уравнение для частицы с простым параболическим законом дисперсии. В пределе $\beta=0$ из системы (18) следует $f_l(\mathbf{k})\equiv 0$ (волновая функция сформирована из пакета тяжелых дырок), а функция $f_h(\mathbf{k})$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m_h}-E_z\right)f_h(\mathbf{k})=\frac{e^2z}{4\pi^2\varkappa}\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1+\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]. \tag{19}$$

После обезразмеривания системы (18) вида (12) получаем систему интегральных уравнений для функций $f_h(k)$ и $f_l(k)$ с параметром β

$$\begin{aligned}(k^2+\varepsilon)f_h(k)&=\frac{1}{2\pi^2}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1+\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]\right\};\\ \frac{1}{2}\left(\frac{k^2}{\beta}+\varepsilon\right)f_l(k)&=\frac{1}{2\pi^2}\left\{\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_h(q)\left[1-\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right]+\int\frac{d^3\mathbf{q}}{(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2}f_l(q)\cdot\frac{(\mathbf{kq})^2}{k^2q^2}\right\}.\end{aligned} \tag{20}$$

На рис. 1, *б* представлена полученная в результате численного решения системы (20) зависимость энергии основного состояния ε от параметра β. В пределе

$\beta=0$ ε стремится к конечному значению $\varepsilon=0.598$. Распределение легких $f_l^2(k)$ и тяжелых $f_h^2(k)$ дырок на акцепторе по импульсам для разных значений β представлено на рис. 4. Как и в случае $\Delta=\infty$, при малых β волновая функция акцептора в области больших импульсов в основном сформирована из тяжелых дырок. При возрастании β область импульсов, в которой легкие дырки дают сравнимый вклад в волновую функцию, быстро расширяется.

В отличие от случая $\Delta=\infty$ модель трехзонного гамильтониана хорошо описывает z-зарядные центры в полупроводниках с малой величиной спин-орбитального расщепления ($\Delta \ll E_g$), если выполняется условие $\delta=\Delta/(E_B z^2) \ll 1$. Для сравнения приведем данные для Si [13]: $E_B=0.053$ эВ ($m_h=0.537m_0$, $\varkappa=11.7$), $\Delta=0.044$ эВ, $E_g=1.11$ эВ. Масса легкой дырки у вершины валентной зоны $m_l=0.153$, но для сравнения необходимо взять пересчитанную массу связанной на акцепторе легкой дырки $m_l=0.113$ и $\beta=0.210$. Таким образом, $\delta\approx0.83$ для $z=1$, но $\delta=0.09 \ll 1$ для $z=3$, и модель хорошо описывает трехзарядный «водородоподобный» акцептор в Si: рассчитанное значение $E_3=-0.338$ эВ ($\varepsilon=0.710$), экспериментальное — $E_3^i=-0.400$ эВ (Ag) [13].

Таким образом, в настоящей работе впервые получены в импульсном представлении системы интегральных уравнений для нахождения энергии и волновых функций основного состояния дырки, связанной на z-зарядном акцепторе, для случаев малой и большой величин спин-орбитального расщепления Δ. Рассчитаны зависимости энергии основного состояния z-зарядного акцептора от отношения масс легкой и тяжелой дырок β и распределения легких и тяжелых дырок по импульсам при разных значениях β для случаев $\Delta=0$ и $\Delta=\infty$.

Предложенные модели позволяют по известным значениям масс легкой и тяжелой дырок m_l и m_h вычислить последний потенциал ионизации мелкого z-зарядного акцептора. Критерием применимости моделей, соответствующих $\Delta=0$ и $\Delta=\infty$, служит величина параметра $\delta=\Delta/(E_B z^2)$. В области $\delta\sim1$ необходимо рассматривать шестизонный гамильтониан, описывающий валентную зону, с учетом конечной величины спин-орбитального расщепления. Такое рассмотрение будет предметом следующей публикации.

Авторы благодарны И. А. Меркулову и Ал. Л. Эфросу за обсуждение результатов работы.

Список литературы

[1] Дымников В. Д., Перель В. И., Полупанов А. Ф. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 2. С. 235—239.
[2] Алексеев М. А., Карлик И. Я., Мирлин Д. Н., Сапега В. Ф. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 5. С. 761—779.
[3] Ulbrich R. G., Kash J. A., Tsang J. C. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. N 8. P. 949—952.
[4] Luttinger J. M. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1030—1041.
[5] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1971. Т. 5. В. 11. С. 2191—2193.
[6] Baranov A. N., Dysholonenko P. E., Kopylov A. A., Sherstnyev V. V. // Sol. St. Commun. 1990. V. 74. N 6. P. 429—432.
[7] Гельмонт Б. Л., Иванов-Омский В. И., Цидильковский И. М. // УФН. 1976. Т. 120. В. 3. С. 337—362.
[8] Baldereschi A., Lipari N. O. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 6. P. 2696—2709.
[9] Полупанов А. Ф., Коган Ш. М. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 12. С. 2338—2341.
[10] Дымников В. Д., Мирлин Д. Н., Перель В. И., Решина И. И. // ФТТ. 1978. Т. 20. В. 7. С. 2165—2172.
[11] Васильева А. Б., Тихонов Н. А. Интегральные уравнения. М., 1989. 158 с.
[12] Арушанян О. Б., Залеткин С. Ф. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений на Фортране. М., 1990. 336 с.
[13] Landolt-Borstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. V. 17. Subvol. a. Berlin, 1982.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Санкт-Петербург

Получена 24.06.1991
Принята к печати 18.07.1991