

УДК 621.315.592

**ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДА
ГЛУБОКОГО ПРИМЕСНОГО ЦЕНТРА
НА ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ
В СЛОЖНУЮ ВАЛЕНТНУЮ ЗОНУ**

B. И. Галиев, A. A. Пахомов, A. Ф. Полупанов

Обсуждается влияние зарядового состояния глубокого центра на спектральную зависимость его сечения фотоионизации при переходах в сложную валентную зону. Показано, что влияние заряда глубокого центра может быть учтено путем умножения парциальных сечений фотопереходов в подзоны тяжелых и легких дырок на соответствующие факторы Зоммерфельда. Эти факторы зависят лишь от надпороговой энергии фотовозбужденного носителя и параметров зонной структуры и определяются видом кулоновских волновых функций сплошного спектра при $r \rightarrow 0$. Приводятся результаты расчетов в рамках сферического приближения факторов Зоммерфельда для уровней различной симметрии. Обсуждается схема расчета кулоновских волновых функций сплошного спектра сложной зоны, не связанная с конечно-разностными методами решения дифференциальных уравнений.

Введение

Как известно (см., например, [1-3]), зарядовое состояние глубокого центра существенно влияет на вероятности переходов «примесный центр зона». Основную роль здесь играет влияние дальнодействующего кулоновского потенциала заряженного центра на движение свободных носителей после акта ионизации или перед захватом. В то же время локализованное состояние носителя определяется главным образом короткодействующей частью потенциала примеси и при описании этого состояния можно в первом приближении пренебречь кулоновским взаимодействием.

В работах [2, 3] было предложено учитывать зарядовое состояние глубокого центра при вычислении спектральной зависимости его сечения фотоионизации с помощью так называемого множителя Зоммерфельда. Поясним этот подход на примере разрешенных оптических переходов в простую зону. Характерный масштаб волновой функции связанного состояния $R \leq \hbar/\sqrt{2m^*E}$, где E — энергетическое расстояние от глубокого уровня до ближайшей зоны, m^* — эффективная масса носителей в этой зоне. При малой надпороговой энергии вылетевшей частицы ($\epsilon \ll E$) ее де-бройлевская длина волны $\lambda_\epsilon \gg R$, что позволяет при вычислении оптического матричного элемента M_E , к воспользоваться приближенным соотношением

$$M_{E, k} \sim d_0 \int dr \psi_E^*(r) \psi_k(r) = d_0 \psi_k(0) \int dr \psi_E^*(r) + O(\sqrt{\epsilon/E}). \quad (1)$$

Здесь d_0 — матричный элемент оператора дипольного момента, вычисленный на блоховских амплитудах краев зон; $\psi_E(r)$, $\psi_k(r)$ — огибающие волновых функций связанного и ионизованного носителей. В результате выражение для сечения фотоионизации, учитывающее влияние кулоновского поля ионизированного центра, можно представить в виде

$$\sigma(\epsilon) = S(\epsilon) \sigma_0(\epsilon), \quad (2)$$

где $\sigma_0(\varepsilon)$ — сечение, соответствующее нейтральному фотовозбужденному центру, а фактор Зоммерфельда S определяется выражением

$$S(\varepsilon) = \int d\Omega_k |\psi_k^{(c)}(0)|^2 / \int d\Omega_k |\psi_k^{(0)}(0)|^2. \quad (3)$$

Здесь $\psi_k^{(0)}(r)$ — волновая функция свободного носителя с квазимпульсом k ; $\psi_k^{(c)}(r)$ — комбинация кулоновских волновых функций сплошного спектра, нормированная так же, как $\psi_k^{(0)}(r)$, и имеющая при $r \rightarrow \infty$ вид суперпозиции плоской волны и сходящейся сферической волны. Интегрирование по телесному углу Ω_k означает суммирование по всем направлениям вылета частицы.

Данная работа посвящена выяснению влияния заряда глубокого центра на оптические переходы в сложную валентную зону кубических полупроводников, состоящую из двух подзон — тяжелых и легких дырок. При этом задача существенно усложняется по сравнению со случаем простой зоны в силу перемешивания состояний тяжелых и легких дырок в кулоновском поле заряженного центра.

1. Факторы Зоммерфельда для оптических переходов в сложную валентную зону

Как известно, валентная зона большинства кубических полупроводников хорошо описывается сферическим гамильтонианом Латтингдера, в котором пренебрегается членами, ответственными за гофрировку валентной зоны. Этот гамильтониан с учетом кулоновского поля заряженного дефекта можно представить в виде

$$\mathcal{H}_v = \left(1 + \frac{5}{4}\mu\right)\hat{p}^2 - \mu(\hat{p}\mathcal{J})^2 + \frac{2\alpha}{r}. \quad (4)$$

Здесь в качестве единицы длины выбрана величина $a_B^* = \hbar^2 \epsilon_0 \gamma_1 (m_0 Ze^2)^{-1}$, где Ze — заряд дефекта, m_0 — масса свободного электрона, ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла; в качестве единицы энергии выбрана величина $\epsilon_B^* = m_0 Z^2 e^4 (2\hbar^2 \epsilon_0^2 \gamma_1)^{-1}$; $\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2)/5\gamma_1$; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латтингдера; $\hat{p} = -i\nabla$ — оператор импульса дырки; \mathcal{J} — вектор псевдоспина ($\mathcal{J}=3/2$); $\alpha=1$ соответствует отталкивающему центру, а $\alpha=-1$ притягивающему.

В отсутствие кулоновского поля собственные функции гамильтониана (4) характеризуются значениями квазимпульса k и спиральности (проекции \mathcal{J} на направление k) v . Энергетический спектр состоит из двух двукратно вырожденных ветвей: тяжелых и легких дырок

$$\epsilon_h(k) = (1 - \mu)k^2, \quad v = \pm 3/2; \quad \epsilon_l(k) = (1 + \mu)k^2, \quad v = \pm 1/2. \quad (5)$$

При наличии кулоновского поля спиральность v уже не является сохраняющимся квантовым числом, т. е. кулоновское поле приводит к взаимному превращению тяжелых и легких дырок. В этом случае можно построить другую систему функций непрерывного спектра, характеризующихся значением полного момента $F=L+\mathcal{J}$ (L — орбитальный момент дырки) и его проекцией $F_z=M$, а также четностью $I=(-1)^L$

$$\Psi_{F,M,I}(r) = R_{F,L_I}(r) |L_I, \mathcal{J}FM\rangle + R_{F,L_I+2}(r) |L_I+2, \mathcal{J}FM\rangle, \quad (6)$$

где $|L\mathcal{J}FM\rangle$ — известные функции в схеме $L-\mathcal{J}$ -связи [4].

Обобщенные факторы Зоммерфельда для сложной зоны S^n по аналогии с введением естественно определить как отношение

$$S_\eta(\varepsilon) = \sigma_\eta^{(c)}(\varepsilon) / \sigma_\eta^{(0)}(\varepsilon), \quad (7)$$

где $\sigma_\eta^{(0)}$ — парциальное сечение фотоперехода в подзону η ($\eta=l, h$) в отсутствие кулоновского поля; $\sigma_\eta^{(c)}$ — сечение фотоионизации при наличии кулоновского поля, соответствующее конечному состоянию дырки вдали

от дефекта с определенным значением квазимпульса k и спиральности ν . Для вычисления такого сечения необходимо построить комбинацию кулоновских функций Ψ_{FMI} , которая при $r \rightarrow \infty$ имеет вид суперпозиции плоской волны с определенной спиральностью ν , соответствующей данному η (4) и сходящихся сферических волн с разными η [5]. Такая комбинация была построена в [6]

$$\Psi_{\eta, k}^{(-)} = \sum_{FMI}^{\prime} i^{L_I} (-1)^{L_I - 3/2 + \nu} \sqrt{4\pi (2L_I + 1)(2F + 1)} \begin{pmatrix} L_I & 3/2 & F \\ 0 & \nu & -\nu \end{pmatrix} \times \\ \times D_{M\nu}^{(F)}(\mathbf{k}) [R_{F, L_I}^{(\eta)} | L_I, \mathcal{J}FM \rangle + R_{F, L_I+2}^{(\eta)} | L_I + 2, \mathcal{J}FM \rangle]. \quad (8)$$

Здесь $D^{(F)}(\mathbf{k})$ — матрицы конечных вращений, описывающие переход к системе координат с осью z вдоль вектора \mathbf{k} ; в круглых скобках — $3j$ -символ Вигнера [7]. Штрих после знака суммирования в (8) означает, что при $F=1/2$ сумма содержит лишь одно слагаемое с $L=+1$, $L=2$ и одно слагаемое с $L=-1$, $L=1$. Функции $R^{(\eta)}$ нормированы при $r \rightarrow \infty$ условиями

$$R_{F, L_I}^{(\eta)}(r) = \frac{i^{-L_I}}{2ik_{\eta}r} \exp \left\{ ik_{\eta}r - \frac{i\alpha}{\vartheta_{\eta}k_{\eta}} \ln r \right\} + \\ + \sum_{\eta' = h, l} \frac{A_{\eta\eta'}^{F, L_I}}{k_{\eta'}r} \exp \left\{ -ik_{\eta'}r + \frac{i\alpha}{\vartheta_{\eta'}k_{\eta'}} \ln r \right\}, \\ R_{F, L_I+2}^{(\eta)}(r) = \beta_{\eta} \frac{i^{-L_I}}{2ik_{\eta}r} \exp \left\{ ik_{\eta}r - \frac{i\alpha}{\vartheta_{\eta}k_{\eta}} \ln r \right\} + \\ + \sum_{\eta' = h, l} \frac{A_{\eta\eta'}^{F, L_I}}{k_{\eta'}r} \exp \left\{ -ik_{\eta'}r + \frac{i\alpha}{\vartheta_{\eta'}k_{\eta'}} \ln r \right\}, \quad (9)$$

$$\beta_h = \beta^{-1}, \quad \beta_l = -\beta, \quad \beta = 3^{L_I - F + 1} \sqrt{(F + 3/2)/(F - 1/2)}. \quad (10)$$

При $\nu = \pm 3/2$ $k_{\eta} = k_h = \sqrt{\varepsilon/(1-\mu)}$, при $\nu = \pm 1/2$ $k_{\eta} = k_l = \sqrt{\varepsilon/(1+\mu)}$; $\vartheta_h = 1 - \mu$, $\vartheta_l = 1 + \mu$. В Приложении показано, что коэффициенты $A_{\eta\eta'}^{F, L_I}$, $A_{\eta\eta'}^{F, L_I+2}$, характеризующие рассеяние дырок в сложной зоне на кулоновском потенциале, однозначно определяются из условий конечности радиальных волновых функций $R_{FL}^{(\eta)}$, $R_{F, L+2}^{(\eta)}$ при $r = 0$.

При $k_{\eta} \rightarrow \infty$ асимптотика (9) функций $R_{FL}^{(\eta)}$, $R_{F, L+2}^{(\eta)}$ совпадает с асимптотикой сферических функций Бесселя [8]: $j_L(k_{\eta}r)$, $-\beta_{\eta} j_{L+2}(k_{\eta}r)$; при замене $R_{F, L}^{(\eta)}$, $R_{F, L+2}^{(\eta)}$ на $j_L(k_{\eta}r)$, $-\beta_{\eta} j_{L+2}(k_{\eta}r)$ формула (8) описывает свободное движение частицы со спиральностью ν

$$\Psi_{\eta, k}^{(0)} = e^{i\mathbf{k}\eta r} \sum_m D_{m\nu}^{(\mathcal{J})}(\mathbf{k}) u_m. \quad (11)$$

Здесь u_m — блоховские амплитуды вершины валентной зоны, преобразующиеся как компоненты спинора ($\mathcal{J}=3/2$).

Определим факторы Зоммерфельда для разрешенных оптических переходов с глубокого уровня симметрии γ_{6t} в валентную зону. (Симметрия γ_{6t} совпадает с симметрией блоховских амплитуд дна зоны проводимости в прямозонных полупроводниках A^3B^5). Для описания волновой функции локализованного состояния γ_{6t} используем двухзонную модель¹ работы [9]

$$\Psi_M(\gamma_{6t}) = \tilde{R}_0(r) | 0 S^{1/2} M \rangle + \tilde{R}_1(r) | 1 \mathcal{J}^{1/2} M \rangle. \quad (12)$$

Здесь $| L\mathcal{J}FM \rangle$ — функции L - \mathcal{J} -связи, составленные из блоховских амплитуд вершины валентной зоны и сферических гармоник Y_{1m} ;

¹ Состояния γ_{6t} были названы в [9] l -с-центрами.

$\langle LSFM \rangle$ — блоховские амплитуды дна зоны проводимости, преобразующиеся как компоненты спинора ($S=1/2$). Как показано в [9], основной вклад в матричный элемент оптического перехода вносит первое слагаемое в (12). При учете вклада лишь первого слагаемого в (12) оптический матричный элемент определяется единственной компонентой разложения (8) с $F=3/2$, $L=0$. Рассуждая так же, как во Введении, получим выражения для факторов Зоммерфельда парциальных сечений фотопереходов с уровня симметрии γ_{8t} в подзону η

$$S_6^{\eta} = |R_{\frac{3}{2}, 0}^{(\eta)}(0)|^2. \quad (13)$$

Здесь учтено, что для радиальной волновой функции свободного движения $|R_{\frac{3}{2}, 0}^{(\eta)}(0)|^2 = |j_0(0)|^2 = 1$. Напомним, что функции $R^{(\eta)}$ должны быть нормированы при $r \rightarrow \infty$ условием (9).

Для определения факторов Зоммерфельда, соответствующих оптическим переходам из состояния γ_{8t} , волновые функции которого преобразуются как блоховские амплитуды вершины валентной зоны, следуя [9], ограничимся вкладом в состояние на центре лишь волновых функций валентной зоны.² В этом приближении волновые функции состояния γ_{8t} имеют вид

$$\Psi_{M'}(\gamma_{8t}) = \sum_{L'=-0,2} \tilde{R}_{L'}(r) |L'J^{\frac{3}{2}} M'\rangle, \quad (14)$$

где $|LJ^{\frac{3}{2}} M'\rangle$ — функции L — J -связи, составленные из блоховских амплитуд валентной зоны и сферических гармоник. Для дальнейших вычислений нам потребуется явный вид функций $\tilde{R}_{L'}(r)$. В приближении потенциала нулевого радиуса [8] эти функции имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{R}_0(r) &= A \sqrt{2} \cdot (\pi r)^{-1/2} [x_l^{\frac{3}{2}} K_{l/2}(x_l r) + x_h^{\frac{3}{2}} K_{l/2}(x_h r)], \\ \tilde{R}_2(r) &= A \sqrt{2} \cdot (\pi r)^{-1/2} [x_h^{\frac{3}{2}} K_{l/2}(x_h r) - x_l^{\frac{3}{2}} K_{l/2}(x_l r)], \\ A^2 &= 16\pi \sqrt{E} [(1-\mu)^{-\frac{3}{2}} + (1+\mu)^{-\frac{3}{2}}]^{-1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $x_{l,h} = E^{1/2} (1 \mp \mu)^{-1/2}$, где E — энергия уровня, отсчитанная от вершины валентной зоны; $K_a(x)$ — функция Макдональда

$$K_{l/2}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}, \quad K_{l/2}(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \left(1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2}\right) e^{-x}. \quad (16)$$

Для вычисления сечения фотоионизации с вылетом дырки в подзону матричные элементы на функциях $\Psi_{\eta k}^{(-)}$ можно, используя разложение (8), выразить через матричные элементы на функциях Ψ_{FM} , а последние в свою очередь, используя теорему Эккарта—Бигнера [7] — через приведенные матричные элементы оператора координаты

$$a_{\eta} \sim \sum_{M'} \int d\Omega_k |\langle \gamma_{8t}, M' | de | \eta k \rangle|^2 \sim \sum_{F, L_I} \left| \begin{pmatrix} L & 3/2 & F \\ 0 & v & -v \end{pmatrix} \right|^2 \left| \left\langle \frac{3}{2} \| z \| FL_I \right\rangle \right|^2. \quad (17)$$

Здесь индекс M' нумерует четырехкратновырожденные состояния γ_{8t} . Согласно правилам отбора, индекс F принимает значения $F=1/2, 3/2, 5/2$, а индекс L — значения $L=1, 3$. При выводе (17) опущены множители, одинаковые для заряженного и нейтрального центров, поскольку факторы Зоммерфельда определяются отношением соответствующих сечений. Следуя [10], приведенный матричный элемент можно представить в виде

$$\left\langle \frac{3}{2} \| z \| FL_I \right\rangle = 2 (-1)^{F+3/2} \sqrt{2F+1} \sum_{L'=0,2} \left\{ \begin{matrix} L & 3/2 & 3/2 \\ F & L' & 1 \end{matrix} \right\} \langle L' \| 1 \| L \rangle \int_0^{\infty} r^3 \tilde{R}_{L'} R_{FL}^{(\eta)}. \quad (18)$$

² Состояния γ_{8t} были названы в [9] h -центрами.

Здесь в фигурных скобках b_j — символ, $\langle 0 \parallel 1 \parallel 1 \rangle = 1$, $\langle 0 \parallel 1 \parallel 3 \rangle = 0$, $\langle 2 \parallel 1 \parallel 1 \rangle = -\sqrt{2}$, $\langle 2 \parallel 1 \parallel 3 \rangle = \sqrt{3}$. В работе [10] было показано, что ограниченные в нуле кулоновские волновые функции при $r \rightarrow 0$ имеют вид $R_{F,1} \sim r$, $R_{F,3} \sim r^2$. Как отмечалось во Введении, основной вклад в оптический матричный элемент вносит окрестность точки $r=0$, поэтому слагаемым в (18), содержащим $R_{F,3}$, можно пренебречь, а оставшиеся интегралы вычислить, используя приближенное соотношение

$$\int_0^\infty r^3 \tilde{R}_{L'} R_{F,1}^{(\eta)} dr \approx \frac{d R_{F,1}^{(\eta)}}{dr} \Big|_{r=0} \int_0^\infty r^4 \tilde{R}_{L'} dr. \quad (19)$$

В результате элементарных вычислений приходим к следующим выражениям для факторов Зоммерфельда, соответствующих переходам с уровня γ_{8t} в валентную зону:

$$S_{\frac{1}{2}}^l(\varepsilon) = \frac{\sigma_{c,l}(\varepsilon)}{\sigma_{0,l}(\varepsilon)} = \frac{5(5\mu - 2)^2 \xi_{j_3}^l + 4(1+2\mu)^2 \xi_{j_2}^l + 9(2-\mu)^2 \xi_{j_2}^l}{5(5\mu - 2)^2 + 4(1+2\mu)^2 + 9(2-\mu)^2},$$

$$S_{\frac{3}{2}}^l(\varepsilon) \equiv \frac{\sigma_{c,h}(\varepsilon)}{\sigma_{0,h}(\varepsilon)} = \frac{4(1+2\mu)^2 \xi_{j_2}^h + (2-\mu)^2 \xi_{j_2}^h}{4(1+2\mu)^2 + (2-\mu)^2}. \quad (20)$$

Здесь $\varepsilon = \hbar\omega - E$ — надпороговая энергия вылетающей дырки; $\xi_F^{(\eta)}(\varepsilon) = 9k_\eta^{-2} |R_{F,1}^{(\eta)}(r)|_{r=0}^2$; штрих означает дифференцирование по r . При выводе (20) учтено, что в отсутствие кулоновского взаимодействия $R_{F,1}^{(\eta)}|_{r=0} = j'_1(k_\eta r)|_{r=0} = k_\eta/3$.

Аналогичным образом могут быть найдены и факторы Зоммерфельда для переходов с уровня симметрии γ_{7t} (симметрия блоховских амплитуд вершины спин-отщепленной зоны)

$$S_{\frac{1}{2}}^l(\varepsilon) = \frac{1}{6} [5\xi_{j_2}^l + \xi_{j_3}^l], \quad S_{\frac{3}{2}}^h(\varepsilon) = \xi_{j_2}^h. \quad (21)$$

Описание переходов с примесных уровней другой (отличной от γ_{7t} , γ_{6t} , γ_{8t}) симметрии требует выхода за рамки сферического приближения; такие центры в данной работе рассматриваться не будут.

Как показано в [10, 11], кулоновские волновые функции дырок при $F=1/2$, $L=1$ удовлетворяют обычному радиальному уравнению Шредингера с массой, равной эффективной массе подзоны легких дырок

$$\left\{ (1+\mu) \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right] - \frac{2Z}{r} - \varepsilon \right\} R_{j_2,1}^{(l)} = 0. \quad (22)$$

Решения этого уравнения хорошо известны [5]. Соответствующий член в (20) имеет вид

$$\xi_{j_2}^l(\varepsilon) = \pm \frac{2\pi}{k_l} \left(1 + \frac{1}{k_l^2} \right) \left[\exp \left\{ \pm \frac{2\pi}{k_l} \right\} - 1 \right]^{-1}. \quad (23)$$

Знак «+» отвечает отталкивающему центру, а знак «—» притягивающему. Определение вида волновых функций с $F=3/2$, $5/2$ представляет собой значительно более сложную задачу. Вычислению этих функций посвящено Приложение.

2. Обсуждение результатов

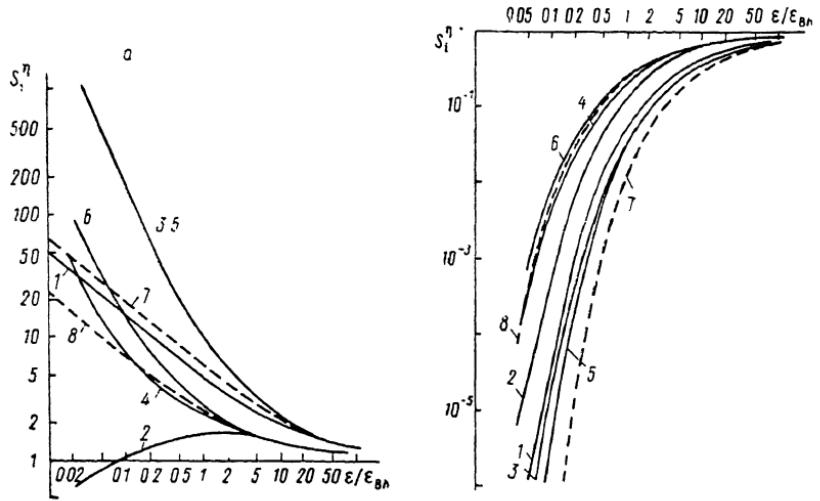
Полное сечение фотоионизации носителя с глубокого уровня в сложную валентную зону с учетом влияния кулоновского поля центра можно, согласно изложенному, представить в виде

$$\sigma_i(\varepsilon) = S_i^l(\varepsilon) \sigma_{0,l}(\varepsilon) + S_i^h(\varepsilon) \sigma_{0,h}(\varepsilon). \quad (24)$$

Здесь $\sigma_{0,h}$; $\sigma_{0,l}$ — парциальные сечения фотопереходов в подзоны тяжелых и легких дырок, при которых примесный центр становится нейтраль-

ным;³ $\varepsilon = \hbar\omega - E$ — надпороговая энергия фотовозбужденного носителя. Факторы S_i^h, l описывают изменение относительных долей тяжелых и легких дырок, рождающихся при фотоионизации, за счет кулоновского поля центра; индекс « i » характеризует симметрию уровня.

Результаты расчетов факторов Зоммерфельда S_6^h, S_7^l, S_8^l для переходов с уровней $\gamma_{6f}, \gamma_{7f}, \gamma_{8f}$ в GaAs ($\mu = 0.753$) представлены на рисунке, а, б. Видно, что в случае притягивающего центра (см. рисунок, а) резко возрастает доля рождающихся при фотоионизации тяжелых дырок, в то время как число легких дырок, образующихся при фотоионизации уровня, меняется по сравнению с нейтральным центром незначительно.



Зависимость факторов Зоммерфельда от надпороговой энергии фотовозбужденных дырок для GaAs для однократно заряженного притягивающего (а) и отталкивающего (б) центра.

1, 2 — энергетическая зависимость факторов S_6^h, S_7^l для переходов с уровня γ_{6f} , соответственно в подзоны тяжелых и легких дырок; 3, 4 — факторы S_6^h, S_8^l для переходов с уровня γ_{8f} ; 5, 6 — факторы S_7^l, S_8^l для уровня γ_{7f} . Штриховые кривые 7, 8 рассчитаны по формуле (25) соответственно для $m^* = m_h, m^* = m_l$. Надпороговая энергия дырки измеряется в «тяжелых» ришбергах: $\varepsilon_{Bh} = Z^2 m_h e^4 / (2 \varepsilon_0^2 \hbar^2)$.

В случае переходов с уровня γ_{6f} при надпороговой энергии дырки $\varepsilon \rightarrow 0$ график зависимости фактора Зоммерфельда для притягивающего центра $S_6^h, l(\varepsilon)$ асимптотически приближается к прямой, описывающей (в двойном логарифмическом масштабе) зависимость $S_6^h, l \approx 4.5 (\varepsilon / \varepsilon_{Bh})^{-1/2}$. (В этом разделе мы используем размерные единицы, $\varepsilon_{Bh} = \varepsilon_B^*/(1-\mu) = Z^2 m_h e^4 / (2 \varepsilon_0^2 \hbar^2)$, m_h — эффективная масса подзоны тяжелых дырок). Для факторов S_7^h, l, S_8^h, l имеют место приближенные соотношения $S_7^h, l(\varepsilon) \approx S_8^h, l(\varepsilon) \approx 5.5 (\varepsilon / \varepsilon_{Bh})^{-1/2}$.

Факторы Зоммерфельда для отталкивающих центров S_7^l, S_8^l приведены на рисунке, б. В этом случае, как видно из рисунка, рождаются в основном легкие дырки. Преобладание легких дырок объясняется тем, что они просачиваются сквозь отталкивающий кулоновский барьер с гораздо большей вероятностью, нежели тяжелые.

Сопоставим результаты расчетов с найденными в [2, 3] факторами Зоммерфельда для простой зоны на примере уровня γ_{6f} . Согласно [2, 3], имеем

$$\tilde{S}_6^\pm(\varepsilon) = \pm 2\pi \sqrt{\varepsilon_B/\varepsilon} [\exp \{ \pm 2\pi \sqrt{\varepsilon_B/\varepsilon} \} - 1]^{-1}, \quad (25)$$

где $\varepsilon_B = Z^2 m^* e^4 / (2 \varepsilon_0^2 \hbar^2)$; m^* — эффективная масса носителя. На рисунке, а, б штриховые линии — зависимости $\tilde{S}_6^\pm(\varepsilon)$ при $m^* = m_h, m_l$. Видно, что в случае притягивающего центра энергетическая зависимость фактора Зоммерфельда для переходов в подзону тяжелых дырок близка к описы-

³ Эти сечения вычислены в [3, 9, 12].

ваемой формулой (25) с $m^* = m_h$. В то же время практически все зависимости $S_{T_p}^{+}(\varepsilon)$ лежат между штриховыми кривыми, соответствующими формуле (25) с $m^* = m_l$ и $m^* = m_h$. Это означает, что вероятность превращения тяжелых дырок в легкие в кулоновском поле центра соизмерима с вероятностью туннельного просачивания легких дырок через отталкивающий кулоновский барьер.

Отметим, что зависимости (см. рисунок) в рамках погрешности сферического приближения ($\sim 10\%$) могут быть использованы для определения множителей Зоммерфельда для Ge ($\mu = 0.766$) и GaP ($\mu = 0.742$).

Учет заряда примесного центра существенно изменяет спектральную зависимость сечения фотоионизации вблизи края примесного поглощения. Однако известно (см., например, [2]), что для глубоких центров на форму края примесного поглощения оказывает значительное влияние электрон-фононное взаимодействие. Детальному сравнению с экспериментом рассчитанных спектральных зависимостей сечений фотоионизации глубоких центров с учетом электрон-фононного взаимодействия планируется посвятить отдельную работу.

Авторы признательны И. Н. Яссиевич за полезные обсуждения.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ВЫЧИСЛЕНИЕ КУЛОНОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ДЫРОК

В разделе 1 было показано, что вычисление множителей Зоммерфельда для переходов в сложную валентную зону сводится к определению вида кулоновских волновых функций сплошного спектра при $r \rightarrow 0$. Кулоновские волновые функции дырки в сложной валентной зоне впервые были найдены в [10] с помощью численного интегрирования системы дифференциальных уравнений. Ниже будет кратко изложен новый подход к решению таких задач, позволяющий получить точные выражения для волновых функций матричных гамильтонианов любой конечной размерности при наличии кулоновского взаимодействия и не связанный с численным интегрированием [13, 14].

Как известно [4, 10, 11], система уравнений для радиальных кулоновских функций R_{FL} (при $F \neq 1/2$) расщепляется на пары уравнений, содержащих функции $R_{FL}, R_{F, L+2}$, где $L=F-3/2$ или $L=F-1/2$ в зависимости от четности состояния. Мы будем использовать функции $\mathcal{F}_{h, l}^{(FL)}$, связанные с R_{FL} соотношениями

$$R_{F, L_I} = \frac{1}{r} \frac{\beta \mathcal{F}_h^{(F, L)} + \mathcal{F}_l^{(FL)}}{\sqrt{1 + \beta^2}}, \quad R_{F, L_I+2} = \frac{1}{r} \frac{\mathcal{F}_h^{(F, L)} - 3\mathcal{F}_l^{(FL)}}{\sqrt{1 + \beta^2}}, \quad (\text{П. 1})$$

где $\beta = 3^{L-F+1} [(F+3/2)/(F-1/2)]^{1/2}$. Система уравнений для функций \mathcal{F} (здесь и далее мы опускаем индексы F, L), согласно [10], имеет вид

$$\begin{aligned} & (\beta_h - \beta_l) \left\{ (1 - \mu) \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2z}{r} + \epsilon \right\} \mathcal{F}_h + \left(\frac{1 + \beta_l^2}{1 + \beta_h^2} \right)^{1/2} \times \\ & \times \{ 2\beta_h(u - v) + (2L + 1)\beta_h^2 w + (2L + 5)w \} \frac{1}{r} \frac{d\mathcal{F}_l}{dr} + \\ & + \{ L(L + 1)\beta_h u - (2L^2 + 6L + 3)w - (L + 2)(L + 3)\beta_h v \} \frac{\mathcal{F}_h}{r^2} - \\ & - \left(\frac{1 + \beta_l^2}{1 + \beta_h^2} \right)^{1/2} \{ L(L + 1)\beta_h u - (L + 2)(L + 3)\beta_h v + 2\beta_h(u - v) + \right. \\ & \left. + (L^2 + 4L + 1)\beta_h^2 w - (L^2 + 2L - 2)w \} \frac{\mathcal{F}_l}{r^2} = 0, \\ & \beta_h = \beta^{-1}, \quad \beta_l = -\beta, \quad u = 1 + [(1 - \beta^2)/(1 + \beta^2)] \mu, \\ & v = 1 - \mu [(1 - \beta^2)/(1 + \beta^2)], \quad w = 2\beta \mu/(1 + \beta^2). \end{aligned} \quad (\text{П. 2})$$

Второе уравнение системы получается из (П.2) заменой μ на $-\mu$ и перестановкой индексов $h \leftrightarrow l$. Уравнение (П.2) удобно представить в виде

$$r^2 \mathcal{F}'' + r \hat{P}_0 \mathcal{F}' + (\hat{Q}_0 + r \hat{Q}_1 + r^2 \hat{Q}_2) \mathcal{F} = 0, \quad (\text{П.3})$$

где \mathcal{F} — вектор $(\mathcal{F}_h, \mathcal{F}_l)$; $\hat{Q}_0, \hat{Q}_1, \hat{Q}_2, \hat{P}_0$ — не зависящие от r матрицы, которые могут быть найдены из сравнения (П.2) с (П.3).

Для определения множителей Зоммерфельда нужно найти ограниченные решения системы (П.3), нормированные на бесконечности условием (9). Сложность этой задачи связана с наличием у системы (П.3) двух особых точек: регулярной при $r=0$ и иррегулярной при $r=\infty$. Решения (П.3) будут найдены с помощью следующей процедуры: на интервале $(0, r_m)$ они строятся в виде комбинации абсолютно сходящихся степенных рядов и степеней логарифма (метод Фробениуса); на интервале (r_m, ∞) решения представляются в виде асимптотических рядов. В точке r_m каждое ограниченное при $r=0$ «левое» решение $\mathcal{F}_<(r)$, найденное при $r \leq r_m$, спивается вместе со своими производными со всеми «правыми» решениями $\mathcal{F}_>(r)$, найденными при $r \geq r_m$.

Будем искать «левые» решения (П.3) в виде

$$\mathcal{F}_<(r) = r^\rho \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{F}_k r^k. \quad (\text{П.4})$$

Определим матрицу

$$\hat{f}(\rho) = \rho(\rho - 1) I + \rho \hat{P}_0 + \hat{Q}_0, \quad (\text{П.5})$$

где I — единичная матрица. Подставив (П.4) в (П.3), получим рекуррентные соотношения

$$\begin{aligned} \hat{f}(\rho) \mathcal{F}_0 &= 0, \\ \hat{f}(\rho + 1) \mathcal{F}_1 + \hat{Q}_1 \mathcal{F}_0 &= 0, \\ \hat{f}(\rho + 2) \mathcal{F}_2 + \hat{Q}_1 \mathcal{F}_1 + \hat{Q}_2 \mathcal{F}_0 &= 0, \\ \vdots &\vdots \\ \hat{f}(k + \rho) \mathcal{F}_k + \hat{Q}_1 \mathcal{F}_{k-1} + \hat{Q}_2 \mathcal{F}_{k-2} &= 0. \end{aligned}$$

Пусть ρ_1, \dots, ρ_4 — корни определяющего уравнения

$$\det \hat{f}(\rho) = 0, \quad (\text{П.7})$$

такие, что $\operatorname{Re} \rho_1 \geq \dots \geq \operatorname{Re} \rho_4$. В нашем случае уравнение (П.7) имеет простой вид

$$(\rho - L - 3)(\rho - L - 1)(\rho + L)(\rho + L + 2) = 0, \quad (\text{П.8})$$

т. е. $\rho_1 = L + 3$ и первое ограниченное в нуле «левое» решение равно

$$\mathcal{F}_<^{(1)}(r) = \rho_1^r \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{F}_k^{(1)} r^k, \quad (\text{П.9})$$

где вектор-коэффициенты $\mathcal{F}_k^{(1)}$ определяются из соотношений (П.6). Поскольку корень $\rho_2 = L + 1$ отличается от ρ_1 на целое число, второе ограниченное в нуле решение следует, согласно [14], искать в виде

$$\mathcal{F}_<^{(2)}(r) = r^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} \mathcal{F}_k^{(2)} r^k + c \mathcal{F}_<^{(1)}(r) \ln r, \quad (\text{П.10})$$

где коэффициенты $\mathcal{F}_k^{(2)}$ и константа c определяются из уравнений

$$\hat{f}(\rho_2) \mathcal{F}_0^{(2)} = 0,$$

$$\begin{aligned} \hat{f}(\rho_2 + k) \mathcal{F}_k^{(2)} + \hat{Q}_1 \mathcal{F}_{k-1}^{(2)} + \hat{Q}_2 \mathcal{F}_{k-2}^{(2)} &= 0, \quad k < \rho_1 - \rho_2, \\ \vdots &\vdots \\ \hat{f}(\rho_2 + n) \mathcal{F}_n^{(2)} + \hat{Q}_1 \mathcal{F}_{n-1}^{(2)} + \hat{Q}_2 \mathcal{F}_{n-2}^{(2)} + & \\ + c \{[2(\rho_2 + n) - 1] I + \hat{P}_0\} \mathcal{F}_{n-\rho_1+\rho_2}^{(1)} &= 0, \quad n \geq \rho_1 - \rho_2. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Остальные два решения, соответствующие корням $\rho_3 = -L$, $\rho_4 = -L-2$, дают расходящиеся при $r \rightarrow 0$ функции R_{FL} . Отметим, что, как показано в [14], степенные ряды в (П. 9) (П. 10) сходятся равномерно на интервале $(0, \infty)$, поэтому формальные разложения (П. 9), (П. 10) представляют собой точные решения системы (П. 3).

«Правые» решения системы (П. 3) при $r \geq r_m$ мы построим в виде асимптотических рядов в окрестности точки $r = \infty$, пользуясь известными методами асимптотического разложения решений дифференциальных уравнений в окрестности иррегулярной особой точки [15]. Удобно перейти от системы (П. 3) к системе уравнений первого порядка с помощью замены

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{>, h} &= y_1 + y_2, \quad \mathcal{F}'_{>, h} = ik_h(y_1 - y_2), \quad \mathcal{F}_{>, l} = y_3 + y_4, \\ \mathcal{F}'_{>, l} &= ik_l(y_3 - y_4), \quad k_{l,h} = [\varepsilon/(1 \pm \mu)]^{1/2}.\end{aligned}\quad (\text{П. 12})$$

Подставив (П. 12) в (П. 3), имеем

$$y' = (\hat{A}_0 + r^{-1}\hat{A}_1 + r^{-2}\hat{A}_2)y, \quad (\text{П. 13})$$

где y — вектор-столбец, составленный из функций $y_1 \dots y_4$; \hat{A}_i — матрицы 4×4 , причем матрица \hat{A}_0 диагональна: $\hat{A}_0 = \text{diag}(ik_h, -ik_h, ik_l, -ik_l)$. Поскольку у матрицы \hat{A}_0 нет одинаковых собственных значений, асимптотическое разложение решений (П. 13), согласно [15], можно представить в виде

$$y(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{R}_n r^{-n} \exp \left\{ \hat{D}_0 r + \hat{D}_1 \ln r + \sum_{n=2}^{\infty} \hat{D}_n \frac{r^{1-n}}{1-n} \right\} C, \quad (\text{П. 14})$$

где C — произвольная вектор-константа, а диагональные матрицы \hat{D}_i и матрицы \hat{R}_i могут быть найдены с помощью рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned}\hat{R}_0 &= I, \quad \hat{D}_0 = \hat{A}_0, \quad (\hat{R}_1)_{ik} = [(\hat{A}_0)_{kk} - (\hat{A}_0)_{ii}]^{-1} (\hat{A}_1)_{ik}, \\ (\hat{D}_n)_{ii} &= (\hat{A}_1 \hat{R}_{n-1} + \hat{A}_2 \hat{R}_{n-2})_{ii}, \quad (\hat{D}_n)_{ij} = 0, \quad i \neq j, \\ (\hat{R}_n)_{ik} &= [(\hat{A}_0)_{ii} - (\hat{A}_0)_{kk}]^{-1} \left\{ \sum_{s=1}^{n-1} (\hat{R}_s)_{ik} (\hat{D}_{n-s})_{kk} - [(\hat{A}_1 + (n-1)I) \hat{R}_{n-1} + \hat{A}_2 \hat{R}_{n-2}]_{ik} \right\}, \\ (\hat{R}_n)_{ii} &= 0, \quad n \geq 1.\end{aligned}\quad (\text{П. 15})$$

Для построения нормированных волновых функций сплошного спектра нужно сплить два «левых», ограниченных в нуле, решения $\mathcal{F}_{<}^{(s)}(r)$ ($s = 1, 2$) вместе с их производными с линейной комбинацией четырех «правых» решений $F_{>}^{(j)}(r)$ в точке r_m

$$\begin{pmatrix} \mathcal{F}_{<}^{(s)}(r_m) \\ \mathcal{F}_{<}^{(s)'}(r_m) \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^4 a_{sj} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{>}^{(j)}(r_m) \\ \mathcal{F}_{>}^{(j)'}(r_m) \end{pmatrix}, \quad (\text{П. 16})$$

где a_{sj} — не зависящие от r_m константы. Поскольку степенные ряды, определяющие «левые» решения, сходятся равномерно на всем интервале $(0, \infty)$, эти решения могут быть найдены при всяком r с любой наперед заданной степенью точности. Поэтому выбор точки спливки определяется лишь условием выхода решений на асимптотику (П. 14): $\sqrt{\varepsilon}r \gg 1$. Оценки погрешностей спливки как функций числа членов асимптотического разложения (П. 14), разложений (П. 9), (П. 10) и энергии ε приведены в [13, 14]. Для проведения спливки «правые» решения удобно выбрать в виде

$$\mathcal{F}_{>}^{(1)} = \begin{pmatrix} \sin \left(k_h r = \frac{\alpha \ln r}{(1-\mu)k_h} \right) \\ 0 \end{pmatrix} + O\left(\frac{1}{r}\right),$$

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{>}^{(2)} &= \begin{pmatrix} \cos\left(k_h r - \frac{\alpha \ln r}{(1-\mu) k_h}\right) \\ 0 \end{pmatrix} + O\left(\frac{1}{r}\right), \\ \mathcal{F}_{>}^{(3)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \sin\left(k_l r - \frac{\alpha \ln r}{k_l (1+\mu)}\right) \end{pmatrix} + O\left(\frac{1}{r}\right), \\ \mathcal{F}_{>}^{(4)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \cos\left(k_l r - \frac{\alpha \ln r}{k_l (1+\mu)}\right) \end{pmatrix} + O\left(\frac{1}{r}\right),\end{aligned}\quad (\text{П. 17})$$

для чего достаточно положить в (П. 14) вектор-константы \mathbf{C} равными

$$C^{(1)} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C^{(2)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C^{(3)} = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad C^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{П. 18})$$

Для определения множителя Зоммерфельда S^η ($\eta=h, l$) радиальная часть волновой функции $R_{FL}^{(\eta)}$ должна быть нормирована при $r \rightarrow \infty$ условием (9). Соответствующая комбинация «левых» решений дается соотношением

$$\mathcal{F}_{<, \eta} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_{<, h, \eta} \\ \mathcal{F}_{<, l, \eta} \end{pmatrix} = \sum_{s=1, 2} b_s^{(\eta)} \mathcal{F}_{<}^{(s)} = \sum_{s=1, 2} \sum_{j=1}^4 a_{s,j} b_s^{(\eta)} \mathcal{F}_{>}^{(j)}, \quad (\text{П. 19})$$

где коэффициенты b должны быть выбраны так, чтобы обеспечить правильную нормировку коэффициента при расходящейся сферической волне с $k=k_\eta$ и обращение в нуль коэффициента при расходящейся сферической волне с $k=k_{\eta'}$ ($\eta' \neq \eta$). Подставляя в (П. 19) асимптотику (П. 17) и сравнивая с учетом (П. 1) коэффициенты при расходящихся сферических волнах в асимптотике (9), приходим к уравнениям

$$\begin{aligned}b_1^{(h)} (a_{11} + ia_{12}) + b_2^{(h)} (a_{21} + ia_{22}) &= i^{-L_I} k_h^{-1} \beta^{-1} (1 + \beta^2)^{1/2}, \\ b_1^{(h)} (a_{13} + ia_{14}) + b_2^{(h)} (a_{23} + ia_{24}) &= 0, \\ b_1^{(l)} (a_{11} + ia_{12}) + b_2^{(l)} (a_{21} + ia_{22}) &= 0, \\ b_1^{(l)} (a_{13} + ia_{14}) + b_2^{(l)} (a_{23} + ia_{24}) &= i^{-L_I} k_l^{-1} (1 + \beta^2)^{1/2}.\end{aligned}\quad (\text{П. 20})$$

Приравняв коэффициенты при сходящихся сферических волнах, получим выражения для коэффициентов $A_{\eta\eta'}$, характеризующих рассеяние дырок в сложной зоне на кулоновском потенциале через константы спивки $a_{s,j}$ и коэффициенты $b_u^{(\eta)}$. Мы не будем приводить элементарные, но довольно громоздкие выражения для коэффициентов $b^{(\eta)}$ через коэффициенты спивки $a_{s,j}$, которые получаются из решения уравнений (П. 20).

Используя выражения (П. 19), (П. 1), получим для факторов Зоммерфельда, характеризующих оптические переходы с уровня $\gamma_{6\pm}$

$$S_6^\eta = |R_{s/\pm, 0}^{(\eta)}(0)|^2 = \frac{1}{2} |b_2^{(\eta)}(3/2, 0)|^2 |\mathcal{F}_{0, h}^{(2)} + \mathcal{F}_{0, l}^{(2)}|^2, \quad (\text{П. 21})$$

где $\mathcal{F}_{0, h}^{(2)}$, $\mathcal{F}_{0, l}^{(2)}$ — коэффициенты при первой степени в разложении (П. 10). Аналогично определяются и величины $|dR_{F, 1}^{(\eta)}/dr|_{r=0}^2$ — компоненты факторов Зоммерфельда для переходов с уровней $\gamma_{7\pm}$, $\gamma_{8\pm}$

$$\left| \frac{dR_{F, 1}^{(\eta)}}{dr} \right|_{r=0}^2 = \frac{|b_2^{(\eta)}(F, 1)|^2}{1 + \beta^2} |\beta \mathcal{F}_{0, h}^{(2)} + \mathcal{F}_{0, l}^{(2)}|^2, \quad (\text{П. 22})$$

где $\beta = \beta(L, F)$ определяются (П. 1); $\mathcal{F}_{0, h}^{(2)}$, $\mathcal{F}_{0, l}^{(2)}$ — коэффициенты при второй степени r в разложении (П. 10) для функций с $F=3/2, 5/2$.

Список литературы

- [1] Bonch-Bruevich V. L., Landsberg P. T. // Phys. St. Sol. 1968. V. 20. P. 1—20.
- [2] Ridley B. K. // J. Phys. C. 1980. V. 13. P. 2015—2026.
- [3] Перель В. И., Яссиевич И. Н. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 1. С. 237—245.
- [4] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1971. Т. 5. № 11. С. 2191—2193.
- [5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. 752 с.
- [6] Аблязов Н. Н., Гельмонт Б. Л., Райх М. Э., Эфрос А. Л. // ЖЭТФ. 1984. Т. 87. № 2(8). С. 646—656; Бейнихес И. Л., Коган Ш. М. // ЖЭТФ. 1985. Т. 89. № 2(8). С. 722—735.
- [7] Эдмондс А. Р. // Сб. «Деформация атомных ядер». М.: ИЛ, 1958. 305 с.
- [8] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1978. 832 с.
- [9] Перель В. И., Яссиевич И. Н. // Сб. «Материалы X Зимней школы ФТИ». Л., 1982. С. 4—25.
- [10] Коган Ш. М., Полупанов А. Ф. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 1. С. 394—412.
- [11] Balderechi A., Lipari N. O. // Phys. Rev. B. 1973. V. 8. N 6. P. 2697—2709.
- [12] Колчанова Н. М., Логинова И. Д., Яссиевич И. Н. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 6. С. 1650—1659.
- [13] Галиев В. И., Полупанов А. Ф. // Препринт ИРЭ АН СССР № 8 (533). М., 1989. 25 с.
- [14] Галиев В. И., Полупанов А. Ф., Шпарлинский И. Е. // Препринт ИРЭ АН СССР № 10 (535). М., 1989. 22 с.
- [15] Вазов В. Асимптотические разложения решений обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1968. 464 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
17 марта 1989 г.
В окончательной редакции
12 июня 1989 г.