

в запрещенной зоне полупроводников. Сущность метода заключается в снятии спектральных зависимостей неравновесной фотопроводимости двух видов: при фиксированных длинах волн предварительного возбуждения (см. рисунок, б, кривая 2) и при фиксированных длинах волн наблюдения (см. рисунок, б, кривая 3). В совокупности приведенные исследования позволили обнаружить, например, в ZnSe акцепторы, залегающие в запрещенной зоне на глубине  $E_{c1} = 1.61, 2.53, 2.46, 2.41, 2.36, 2.30, 2.19, 2.10$  эВ от дна зоны проводимости, а также глубокие центры с  $E_{c1} = 1.27, 1.31, 1.44, 1.61, 1.85, 1.91, 1.97$  эВ. В заключение отметим, что, по-видимому, эффект спектральной памяти фотопроводимости высокоомных ZnSe, ZnS, CdS связан с существованием в них дефектов с метастабильными состояниями по типу так называемых  $EL2$ -дефектов в арсениде галлия [5, 6]. Однако для выяснения природы локальных центров (центра) требуются дополнительные исследования.

### Список литературы

- [1] Аркадьева Е. Н., Парицкий Л. Г., Рывкин С. М. // ФТТ. 1960. Т. 2. В. 6. С. 1160—1168.
- [2] Рывкин С. М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. М., 1963. 494 с.
- [3] Корсунская Н. Е., Кривко Т. Г., Маркевич И. В., Торчинская Т. В., Шейнкман М. К. // УФЖ. 1981. Т. 26. В. 4. С. 662—663.
- [4] Гаплевская С. П., Завертанная Л. С., Кривко Т. Г., Рвачев А. Л., Сакалас А. П. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 1. С. 98—102.
- [5] Baraff G. A., Schluter M. // Phys. Rev. 1987. V. 35. N 12. P. 6154—6164.
- [6] Оборина Е. И., Остапенко С. С., Шейнкман М. К. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 46. В. 11. С. 449—451.

Кяшиневский государственный университет им. В. И. Ленина

Получено 18.11.1988  
Принято к печати 5.07.1989

ФТП, том 23, вып. 11, 1989

## ***k*-*p*-ПАРАМЕТРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ, РАСЧИТАННЫЕ МЕТОДОМ НЕЛОКАЛЬНОГО ЭМПИРИЧЕСКОГО ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА**

Белов Н. П., Прокопенко В. Т., Яськов А. Д.

Теория возмущений —  $k$ - $p$ -метод [1] часто применяется для анализа физических свойств полупроводников. Для кристаллов со структурой типа цинковой обманки этот метод был использован в основном для описания состояний, относящихся к центру зоны Бриллюэна и являющихся наиболее важными в практическом отношении. Межзонные матричные элементы импульса, которые являются параметрами  $k$ - $p$ -метода, находятся, как правило, из экспериментальных данных (например, эффективных масс и  $g$ -факторов электронов проводимости [2, 3]) или же с помощью полуэмпирических расчетов [4]. Значительный интерес представляет сравнение этих величин с данными, полученными на основании расчетов электронной структуры. Несмотря на большое количество публикаций расчетов электронной структуры полупроводников, рассчитанные  $k$ - $p$ -параметры приводятся редко и в основном относятся к значениям эффективных масс [5, 6].

Цель настоящей работы состояла в расчетах значений  $k$ - $p$ -параметров для ряда полупроводников с тетраэдрической координацией атомов с использованием метода эмпирического нелокального псевдопотенциала [7], который позволяет с хорошей точностью воспроизвести основные оптические зазоры.

Гамильтониан настоящей задачи

$$H = \frac{p^2}{2m} + V + V_{nl} \quad (1)$$

включает локальную  $V$  и нелокальную  $V_{нл}$  части псевдопотенциала. Вклад, вносимый нелокальной  $V_{нл}$  частью в межзонные матричные элементы импульса, можно учесть, записав [8]

$$\mathbf{p} = -\frac{im}{\hbar} [\Gamma, H], \quad (2)$$

что приводит к следующему виду матричных элементов между плоскими волнами с волновыми векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ :

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{p} | \mathbf{k}' \rangle = \hbar k \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}'} \right) \langle \mathbf{k} | V_{нл} | \mathbf{k}' \rangle. \quad (3)$$

Для расчетов использовался базис из 113 плоских волн, из которых 27 были учтены точно [9]. Все параметры были взяты из оригинальной работы [7], модельные радиусы  $R_2$  и параметры для расчета спин-орбитального взаимодействия даны в [10].

Межзонные матричные элементы импульса между состояниями  $\Gamma_{15}^p$ ,  $\Gamma_1^c$  и  $\Gamma_{15}^c$

$$\begin{aligned} P &= \langle \Gamma_{15}^p, x | p_x | \Gamma_1^c \rangle, \\ P_1 &= \langle \Gamma_{15}^c, x | p_x | \Gamma_1^c \rangle, \\ Q &= \langle \Gamma_{15}^c, x | p_x | \Gamma_{15}^c, z \rangle \end{aligned} \quad (4)$$

были получены с волновыми функциями, являющимися решением уравнения

$$H \psi_{nk} = E_{nk} \psi_{nk}, \quad (5)$$

где  $H$  — гамильтониан (1).

Для сравнения с данными, полученными в эксперименте, удобнее пользоваться энергетическими эквивалентами (4)

$$\begin{aligned} P^2 &= \frac{2}{m} |\langle \Gamma_{15}^p, x | p_x | \Gamma_1^c \rangle|^2, \\ P_1^2 &= \frac{2}{m} |\langle \Gamma_{15}^c, x | p_x | \Gamma_1^c \rangle|^2, \\ Q^2 &= \frac{2}{m} |\langle \Gamma_{15}^p, x | p_x | \Gamma_{15}^c, z \rangle|^2. \end{aligned} \quad (6)$$

Расчитанные значения  $P^2$  и  $Q^2$  приведены в табл. 1 вместе с  $P^2$  (4),  $Q^2$  (4), полученными с учетом лишь первой части в (3), а также данными из работ [2, 4].  $Q^2$  [4] было найдено из параметров [4] как

$$Q^2 = (\gamma_1 - 2\gamma_2 + 1) E_0', \quad (7)$$

где для  $E_0'$  был взят энергетический зазор  $\Gamma_8^c - \Gamma_8^v$ .

Т а б л и ц а 1

$k \cdot p$ -Параметры, рассчитанные в настоящей работе, и экспериментальные результаты из работ [2, 4]

Материал	$P^2$ [4], эВ	$P^2$ [2], эВ	$P^2$ (1), эВ	$P^2$ , эВ	$Q^2$ [4], эВ	$Q^2$ (1), эВ	$Q^2$ , эВ
InSb	23.1	24.1	14.3	17.8	17.1	9.2	14.2
InP	20.4	20.7	17.6	16.3	15.3	11.9	15.4
InAs	22.2	22.2	16.0	18.2	18.1	10.6	16.6
GaSb	22.4	27.9	16.4	18.3	17.8	11.1	14.4
GaP	22.2	—	20.6	18.8	17.0	14.6	18.2
GaAs	25.7	28.9	18.8	18.6	18.2	13.2	17.1
ZnSe	24.2	23.1	16.6	16.8	17.2	13.5	18.4
CdTe	20.7	18.5	13.1	15.8	14.1	8.3	15.1
Si	21.6	—	21.2	17.7	15.2	14.5	14.5
Ge	26.3	—	20.3	19.3	19.1	13.4	16.2

Примечание.  $P^2$  (1) и  $Q^2$  (1) рассчитаны на основании (2), где вкладом, обусловленным некогерентностью  $V_{нл}$  и  $\tau$ , пренебрегалось.

Результаты расчета показывают, что второй член в правой части (3), возникающий вследствие некоммутативности  $V_{nl}$  и  $\gamma$ , вносит значительный вклад и должен учитываться при расчете межзонных матричных элементов импульса. Величина  $P^2$ , рассчитанная нами, оказалась ниже значений, приводимых в [2, 4], для всех исследованных здесь материалов. Аналогичную тенденцию можно заметить и в расчетах [5, 6], рассмотрев значения приводимых там энергетических зазоров и эффективных масс. Значения  $P_i^2$  (в табл. 1 не приводятся) существенно расходятся с данными [2, 3] (более чем на порядок величины) и не согласуются с теорией, предсказывающей увеличение  $P^2$  с возрастанием антисимметричной части псевдопотенциала [3]. Например, мы получили  $P_i^2=0.01$  эВ для ZnSe и  $P_i^2=0.5$  эВ для InSb.

Лучшее совпадение между расчетными и экспериментальными данными обнаруживается для  $Q^2$  (табл. 1).

Для расчета эффективных масс мы использовали энергетические зазоры и матричные элементы импульса, полученные с учетом спин-орбитального взаимодействия по теории возмущений [7].

Таблица 2

Сравнение эффективных масс  $m_c^*$  ( $\Gamma_6^*$ ) и  $m_{so}^*$  ( $\Gamma_7^*$ ), рассчитанных в настоящей работе, и данных работы [4]

Материал	$\frac{m_c^*}{m}$	$\frac{m_c^*}{m}$ [4]	$\frac{m_{so}^*}{m}$	$\frac{m_{so}^*}{m}$ [4]
InSb	0.018	0.014	0.115	0.107
InP	0.089	0.080	0.164	0.170
InAs	0.023	0.023	0.094	0.089
GaSb	0.054	0.045	0.145	0.140
GaP	0.134	0.170	0.186	0.240
GaAs	0.082	0.067	0.156	0.150
ZnSe	0.146	0.140	0.239	0.300
CdTe	0.105	0.096	0.218	0.280
Si	0.188	0.230	0.192	0.240
Ge	0.048	0.038	0.107	0.092

Размерность матрицы, приводимой к диагональному виду, с учетом спина электрона составляла  $18 \times 18$ . Эффективные массы  $m_c^*$  ( $\Gamma_6^*$ ) и  $m_{so}^*$  ( $\Gamma_7^*$ ) приведены в табл. 2 вместе с данными из работы [4], которые отлично совпадают с экспериментальными для большинства материалов и часто используются в качестве справочных. Рассчитанные величины  $m_c^*$  отличаются от данных [4] вследствие заниженных значений  $P^2$ , в основном определяющих величину  $m_c^*$ .

В целом результаты расчета показали, что нелокальный псевдопотенциал [7] позволяет получить достаточно надежные значения  $k$ - $p$ -параметров. Улучшение результатов, по-видимому, возможно за счет более корректного выбора  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -компонент псевдопотенциала.

#### Список литературы

- [1] Kane O. E. // Semiconductors and semimetals. 1966. V. 1. P. 75—100.
- [2] Hermann C., Weisbuch C. // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. N 2. P. 823—833.
- [3] Chadi D. J., Clark A. H., Burnham R. D. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 10. P. 4465—4469.
- [4] Lawaetz P. // Phys. Rev. B. 1971. V. 4. N 10. P. 3460—3467.
- [5] Bowers R. L., Mahan G. D. // Phys. Rev. 1969. V. 185. N 3. P. 1073—1078.
- [6] Wang C. S., Klein B. M. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 6. P. 3393—3416.
- [7] Chelikowsky J. R., Cohen M. L. // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. N 2. P. 556—582.
- [8] Blount E. I. // Sol. St. Phys. 1962. V. 13. P. 305—373.
- [9] Brust D. // Phys. Rev. 1964. V. 134. N 5A. P. A1337—A1353.
- [10] Pötz W., Vogl P. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 4. P. 2025—2037.