

Характеристики основного состояния акцепторного центра в широкозонных полупроводниках со слабым спин-орбитальным взаимодействием

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

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

(Поступила в Редакцию 16 октября 1997 г.)

Для широкозонных полупроводников, таких как GaN, рассчитаны спин-орбитальное расщепление, константы деформационного потенциала и величина g -фактора основного состояния акцепторного центра, описываемого суперпозицией кулоновского потенциала и потенциала центральной ячейки. Получены аналитические выражения для этих параметров в модели потенциала нулевого радиуса, зависящие только от соотношения масс легкой и тяжелой дырок. Показано, что отличия в значениях этих параметров для предельных случаев чисто кулоновского потенциала и потенциала нулевого радиуса не превосходят 7%, что позволяет использовать для оценок простые аналитические формулы. Для основного состояния акцепторного центра в гексагональной модификации GaN теоретический расчет приводит к резкой анизотропии g -фактора, в то время как результаты экспериментальных измерений дают практически изотропное значение g , близкое к величине g фактора свободного электрона. Это противоречие снимается, если в окрестности акцепторного центра возникает перпендикулярная оси C_6 кристалла спонтанная деформация, обусловленная эффектом Яна–Теллера.

Как хорошо известно, в полупроводниках кубической симметрии основное состояние дырки на акцепторе четырехкратно вырождено и описывается полным угловым моментом $3/2$ [1]. Как правило, в полупроводниках типа GaAs энергия спин-орбитального взаимодействия велика по сравнению с энергией связи акцептора, так что основной вклад в волновую функцию связанного состояния вносят подзоны легких и тяжелых дырок. Для этого предельного случая вид волновых функций акцепторного состояния в k -представлении был найден, например, в работах [2–4]. В случае Si и ряда широкозонных полупроводников (GaN, AlN) глубина акцепторных состояний сравнима или даже превосходит величину спин-орбитального расщепления валентной зоны Δ_{so} . Так, для GaN ширина запрещенной зоны $E_G = 3.4$ eV [5], энергия связи акцептора $E_a \geq 200$ meV [6], а $\Delta_{so} = 12$ meV [7]. В этом случае волновая функция связанной на акцепторе дырки содержит заметный вклад от состояний спин-орбитально отщепленной зоны. В [2] расчет волновой функции основного состояния кулоновского акцептора был выполнен в сферическом приближении для двух предельных случаев: бесконечно большого и равного нулю спин-орбитального расщепления. Целью настоящей работы является обобщение развитого в [2] метода расчета на случай, когда энергия спин-орбитального взаимодействия конечна, но мала по сравнению с энергией связи дырки на акцепторе, а притягивающий потенциал является суперпозицией дальнедействующего кулоновского потенциала и короткодействующего потенциала центральной ячейки. Конкретные расчеты проведены для акцепторных центров в нитриде галлия, имеющих структуру вюрцита. Учет гексагональной (не кубической) симметрии этого соединения основан на простей-

шей модели перестройки состояний валентной зоны в присутствии эффективной деформации вдоль оси [111], являющейся осью симметрии C_6 гексагонального кристалла [1].

В разделе 1 найдены волновые функции акцепторных состояний в отсутствие спин-орбитального взаимодействия и деформации. С помощью этих функций в разделе 2 рассчитаны константы спин-орбитального взаимодействия и деформационных потенциалов для связанной на акцепторе дырки. В рассматриваемом предельном случае эти параметры однозначно определяют структуру подуровней основного состояния акцептора. В разделе 3 найденные волновые функции основного состояния использованы для расчета тензора g -фактора дырки на акцепторе. Уже из соображений симметрии и знака эффективной деформации в этом гексагональном кристалле можно сделать вывод о резкой анизотропии тензора \hat{g} . Однако экспериментальные измерения [6] дают практически изотропный вид g -фактора связанной дырки. Это связывается с большой спонтанной деформацией окрестности акцепторного центра, обусловленной эффектом Яна–Теллера.

1. Волновые функции основного состояния акцептора

Как показано в [1], для кристаллов с симметрией вюрцита, как и для алмазоподобных полупроводников, дырку в окрестности центра зоны Бриллюэна можно приближенно рассматривать как квазичастицу с внутренним орбитальным моментом $l = 1$ и спином $S = 1/2$. Вид волновых функций и эффективные массы таких квазичастиц зависят от соотношения между кинетиче-

ской энергией

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + 4\gamma)k^2 - 6\gamma (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{I}})^2], \quad (1)$$

энергией спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{H}_{so} = -\frac{2}{3}\Delta_{so} (\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{S}}) \quad (2)$$

и энергией спинового расщепления уровней дырки в гексагональном кристаллическом поле, которое можно рассматривать как результат эффективной деформации вдоль оси C_{6v} ,

$$\hat{H}_d = -(a + 2b)\text{Sp}(\hat{\varepsilon}^0) + 3b(\hat{f}_\alpha \hat{\varepsilon}_{\alpha\beta}^0 \hat{f}_\beta). \quad (3)$$

Здесь m_0 — масса свободного электрона, \mathbf{k} — волновой вектор дырки, γ_1 и γ — параметры Латтинжера [8], a и b — константы деформационного потенциала (использована сферическая модель $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma$, $b = d/\sqrt{3}$), Δ_{so} — энергия спин-орбитального расщепления валентной зоны в отсутствие кристаллического поля. Тензор эффективной деформации $\hat{\varepsilon}^0$ выбирается таким образом, чтобы получающийся в итоге спектр состояний при равном нулю волновом векторе \mathbf{k} совпадал с реальным спектром кристалла. Это наиболее удобно сделать, направив ось z вдоль оси шестого порядка и считая, что эффективная деформация имеет только одну отличную от нуля компоненту $\varepsilon_{zz}^0 = -\Delta_{cr}/3b$, где Δ_{cr} — расщепление валентной зоны при $\mathbf{k} = 0$ в отсутствие спин-орбитального взаимодействия. Реальные расщепления состояний валентной зоны в окрестности центра зоны Бриллюэна даются разностью собственных чисел гамильтониана

$$\hat{H}_6(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} [(\gamma_1 + 4\gamma)k^2 - 6\gamma (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{I}})^2] - \frac{2}{3}\Delta_{so} (\hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{S}}) - (a + 2b)\text{Sp}(\hat{\varepsilon}^0) - \Delta_{cr} \hat{f}_z^2. \quad (4)$$

Эти расщепления при $\mathbf{k} = 0$ связаны с Δ_{so} и Δ_{cr} следующими формулами [1]:

$$E_1^0 - E_{2,3}^0 = -\frac{1}{2} \left\{ (\Delta_{cr} + \Delta_{so}) \mp \sqrt{(\Delta_{cr} + \Delta_{so})^2 - (8/3)\Delta_{cr}\Delta_{so}} \right\}. \quad (5)$$

Здесь E_1^0 — энергия термина Γ_9 , а $E_{2,3}^0$ — энергия термов Γ_7 .

Рассмотрим мелкий акцепторный уровень, энергия связи которого E_a мала по сравнению с шириной запрещенной зоны E_G ($E_a \ll E_G$), но велика по сравнению с Δ_{so} и Δ_{cr} . Тогда на первом этапе расчетов можно пренебречь кристаллическим и спин-орбитальным расщеплениями и найти волновые функции основного состояния акцепторного центра в модели трехзонного гамильтониана $H(\mathbf{k})$, описывающего двухкратно вырожденную

подзону тяжелых дырок с массой $m_h = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma)$ и подзону легких дырок с массой $m_l = m_0/(\gamma_1 + 4\gamma)$. Спин-орбитальное и кристаллическое расщепления акцепторного уровня можно затем найти по теории возмущений.

Следуя [2], будем искать волновую функцию локализованной дырки в k -представлении. Пренебрегая спин-орбитальным взаимодействием и деформацией, запишем гамильтониан такой дырки в виде:

$$\hat{H}_a(\mathbf{k}) = \hat{H}(\mathbf{k}) + \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (6)$$

где $\hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — интегральный оператор потенциальной энергии, являющийся суперпозицией дальнедействующего кулоновского потенциала и короткодействующего потенциала центральной ячейки, который аппроксимируется потенциалом нулевого радиуса. Явный вид этого оператора приведен, например, в [3,4].

В пренебрежении спином \mathbf{S} полный угловой момент локализованной дырки \mathbf{F} равен сумме углового момента внутреннего орбитального движения \mathbf{I} и углового момента орбитального движения вокруг примесного центра \mathbf{L} ($\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{L}$). Кратность вырождения основного состояния акцептора совпадает с кратностью вырождения состояний в вершине валентной зоны [1], так что $F = I = 1$. При этом волновую функцию магнитного подуровня с проекцией $F_z = M$ можно представить в виде [2]

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

где u_M — блоховская базисная функция вершины валентной зоны, соответствующая $I_z = M$, $\hat{\Lambda}_{h,l}(\mathbf{k})$ — операторы проектирования на состояния тяжелых и легких дырок, которые могут быть записаны в явном виде как

$$\Lambda_h(\mathbf{k}) = \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{I}})^2}{k^2}, \quad \Lambda_l(\mathbf{k}) = \hat{E} - \frac{(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{I}})^2}{k^2}, \quad (8)$$

где \hat{E} — единичная матрица размерности 3×3 . Функции $f_{h,l}(k)$ в сферическом приближении зависят только от модуля волнового вектора k и удовлетворяют условию нормировки (объем кристалла принят равным $(2\pi)^3$)

$$\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty [2f_h^2(k) + f_l^2(k)] k^2 dk = 1. \quad (9)$$

Квадраты модулей $|f_{h,l}(k)|^2$ имеют смысл функций распределения основного состояния акцептора по состояниям валентных подзон и импульсам. Определение явного вида волновой функции Ψ_{FM} , являющейся собственной функцией гамильтониана (6), сводится к решению систе-

мы интегральных уравнений для $f_h(k)$ и $f_l(k)$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} + E_a \right] f_h(k) &= \frac{e^2}{6\pi^2 \varkappa} \\ &\times \left[\int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} f_h(q) [2 + P_2(\cos \theta)] \right. \\ &\left. + \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} f_l(q) [1 - P_2(\cos \theta)] \right] + A, \\ \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_l} + E_a \right] f_l(k) &= \frac{e^2}{6\pi^2 \varkappa} \\ &\times \left[2 \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} f_h(q) [1 - P_2(\cos \theta)] \right. \\ &\left. + \int \frac{d^3 \mathbf{q}}{(\mathbf{k} - \mathbf{q})^2} f_l(q) [1 + 2P_2(\cos \theta)] \right] + A, \quad (10) \end{aligned}$$

где e — модуль заряда электрона, \varkappa — диэлектрическая проницаемость среды, $P_2(\cos \theta) = P_2(\mathbf{k}\mathbf{q}/kq)$ — полином Лежандра, константа A описывает влияние короткодействующего потенциала [3,4]. В случае кулоновского акцептора $A = 0$ и система (10) совпадает с полученной в [2]. Ее решение позволяет найти собственную энергию и волновые функции основного состояния кулоновского акцептора. В отсутствие кулоновской компоненты притягивающего потенциала система (10) описывает волновые функции основного состояния акцептора в модели потенциала нулевого радиуса и имеет аналитические решения [9]

$$\begin{aligned} f_h(k) &= a_B^{3/2} \frac{N}{(ka_B)^2 + \varepsilon}, \quad f_l(k) = a_B^{3/2} \frac{N\beta}{(ka_B)^2 + \beta\varepsilon}, \\ N &= \frac{\varepsilon^{1/4}}{\pi} \sqrt{\frac{3}{2 + \beta\sqrt{\beta}}}, \quad (11) \end{aligned}$$

где $\beta = (m_l/m_h)$, $\varepsilon = E_a/E_B$, $E_B = e^4 m_h / 2\pi\hbar^2$, $a_B = \pi\hbar^2 / e^2 m_h$, $A = NE_B a_B^{3/2}$. В общем случае значение параметра A определяется из условия нормировки (9) при заданном (определенном из эксперимента) значении энергии связи E_a . Использованный нами метод численного решения этой системы и вычисления константы A подробно описан в [3,4].

Для дальнейшего анализа волновую функцию $\Psi_{FM}(\mathbf{k})$ удобно выразить через собственные функции орбитального момента \mathbf{L} и углового момента \mathbf{I}

$$\begin{aligned} \Psi_{FM}(\mathbf{k}) &= f_0(k) Y_{00}(\mathbf{k}/k) u_M \\ &+ f_2(k) \sum_{m,\mu} \langle 2m1\mu | 211M \rangle Y_{2m}(\mathbf{k}/k) u_\mu, \quad (12) \end{aligned}$$

где $Y_{00}(\mathbf{k}/k)$ и $Y_{2m}(\mathbf{k}/k)$ — собственные функции оператора углового момента (шаровые функции), $\langle 2m1\mu | 211M \rangle$ — коэффициент Клебша–Гордана [10], а $f_0(k)$ и $f_2(k)$ — составляющие волновой функции,

отвечающие орбитальным моментам 0 и 2 и связанные с функциями $f_{h,l}$ соотношениями

$$\begin{aligned} f_0(k) &= \frac{\sqrt{4\pi}}{3} (2f_h(k) + f_l(k)), \\ f_2(k) &= -\frac{\sqrt{8\pi}}{3} (f_h(k) - f_l(k)). \quad (13) \end{aligned}$$

2. Спин-орбитальное расщепление и константы деформационного потенциала для акцептора

Воспользовавшись (12) и (13), нетрудно найти матричные элементы гамильтонианов спин-орбитального и деформационного взаимодействий между подуровнями основного состояния. Соответствующие усеченные гамильтонианы совпадают по виду с (2) и (3)

$$\hat{H}'_{so} = -\frac{2}{3} \tilde{\Delta}_{so} (\hat{\mathbf{F}}\hat{\mathbf{S}}), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}'_d &= -(a + 2\tilde{b}) \text{Sp}(\hat{\varepsilon}^0) + 3\tilde{b} (\hat{F}_\alpha \hat{\varepsilon}_{\alpha\beta}^0 \hat{F}_\beta) \\ &= -(a + 2\tilde{b}) \text{Sp}(\hat{\varepsilon}^0) - \tilde{\Delta}_{cr} F_c^2, \quad (15) \end{aligned}$$

причем значения перенормированной константы спин-орбитального взаимодействия $\tilde{\Delta}_{so}$, кристаллической константы $\tilde{\Delta}_{cr} = -3\tilde{b}\varepsilon_{zz}^0$ и констант деформационного потенциала \tilde{b} , \tilde{d} даются выражениями

$$\begin{aligned} x_{so} &= \frac{\tilde{\Delta}_{so}}{\Delta_{so}} = \left[\langle f_0^2(k) \rangle - \frac{1}{2} \langle f_2^2(k) \rangle \right] \\ &= \frac{4\pi}{3} [\langle f_h^2(k) \rangle + 2\langle f_h(k)f_l(k) \rangle], \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_{cr} &= \frac{\tilde{\Delta}_{cr}}{\Delta_{cr}} = \frac{\tilde{b}}{b} = \left[\langle f_0^2(k) \rangle + \frac{1}{10} \langle f_2^2(k) \rangle \right] \\ &= \frac{2}{5} + \frac{4\pi}{5} [\langle f_h^2(k) \rangle + 2\langle f_h(k)f_l(k) \rangle]. \quad (17) \end{aligned}$$

Здесь угловыми скобками обозначено интегрирование по модулю волнового вектора: $\langle F(k) \rangle = \int_0^\infty F(k) k^2 dk$. Отметим, что акцепторная константа a в рассматриваемом приближении не перенормируется и равна зонной.

Поскольку энергии деформационного и спин-орбитального расщепления основного состояния акцептора малы по сравнению с расстояниями до ближайшего возбужденного акцепторного уровня, нахождение поправок к энергиям и волновых функций акцепторных состояний в присутствии этих взаимодействий сводится к нахождению собственных чисел и собственных функций гамильтониана

$$\hat{H}' = \hat{H}'_{so} + \hat{H}'_d. \quad (18)$$

Таким образом, формула (5) после подстановки в нее перенормированных констант $\tilde{\Delta}_{so}$ и $\tilde{\Delta}_{cr}$ даст величины

расщеплений подуровней основного состояния дырки на акцепторе.

Расчет констант деформационного потенциала (17) и спин-орбитального расщепления (16) для конкретного акцептора был проведен на волновых функциях $f_{h,l}(k)$, найденных численно для данной энергии связи (типа примеси) и типа полупроводника по методике, описанной в разделе 1. Зависимость величин x_{so} и x_{cr} от энергии связи акцептора в GaN была рассчитана для параметров Латтинжера $\gamma_1 = 2.18$ и $\gamma = 0.85$, определенных в сферическом приближении по массам тяжелой дырки для двух взаимно перпендикулярных направлений: вдоль оси вюрцита $z \parallel C_{6v}$ $m_h^{\parallel} = 2.03$ и в плоскости xy $m_h^{\perp} = 0.33$ [7]. В сферическом приближении эти величины связаны с параметрами Латтинжера следующими соотношениями: $m_h^{\parallel} = 1/(\gamma_1 - 2\gamma)$ и $m_h^{\perp} = 1/(\gamma_1 + \gamma)$ [1]. При расчете использовалось значение диэлектрической проницаемости $\kappa = 9.5$ [11]. Полный набор параметров, использовавшихся при расчетах, приведен в табл. 1.

Для случая чисто кулоновского акцептора ($E_a = 199.4$ meV) $x_{so} = 0.67$, а $x_{cr} = 0.8$. По мере увеличения роли притягивающего потенциала центральной ячейки (т.е. с ростом энергии связи E_a) эти величины монотонно убывают и достигают значений 0.65 и 0.79 для $E_a = 500$ meV. При дальнейшем увеличении E_a они стремятся к своим нижним пределам: значениям $x_{so} = 0.63$ и $x_{cr} = 0.78$, найденным аналитически в модели потенциала нулевого радиуса с помощью функций (11)

$$x_{so} = \frac{1 + \sqrt{\beta} + 4\beta}{(2 + \beta\sqrt{\beta})(1 + \sqrt{\beta})}, \quad (19)$$

$$x_{cr} = \frac{7 + 7\sqrt{\beta} + 12\beta + 2\beta\sqrt{\beta} + 2\beta^2}{5(2 + \beta\sqrt{\beta})(1 + \sqrt{\beta})}. \quad (20)$$

Выражение (19) было получено ранее в [12]. Из выражений (19), (20) видно, что в модели потенциала нулевого радиуса константы спин-орбитального расщепления и деформационного потенциала не зависят от энергии связи акцептора. Отличие величин этих параметров в GaN для кулоновского акцептора и для глубокого примесного центра, описываемого одним потенциалом нулевого радиуса, не превосходит 7%. Поэтому формулы (20) и (19) можно использовать для оценок величин констант деформационного потенциала и спин-орбитального расщепления в полупроводниках с существенно разными значениями параметров Латтинжера.

Возможность такого использования продемонстрирована на рис. 1, где сопоставлены результаты расчетов значений x_{so} и x_{cr} для двух предельных случаев —

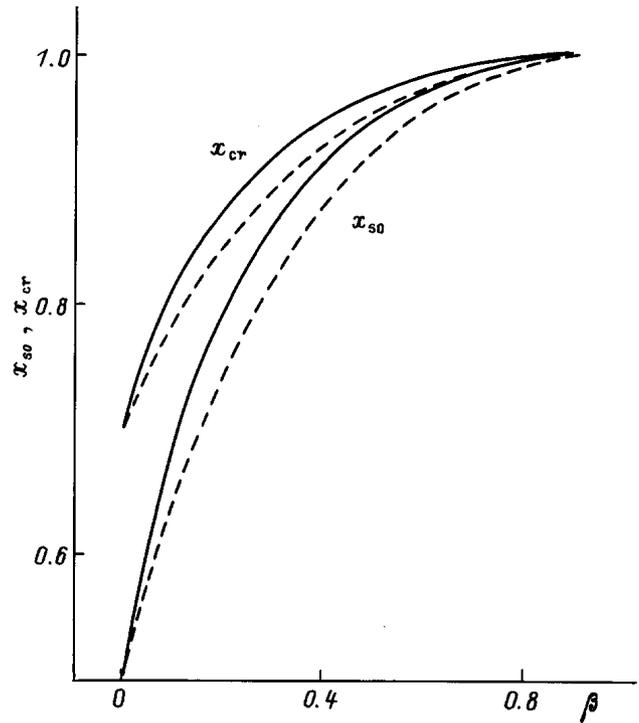


Рис. 1. Зависимость значений $x_{so} = \tilde{\Delta}_{so}/\Delta_{so}$ и $x_{cr} = \tilde{\Delta}_{cr}/\Delta_{cr} = \tilde{b}/b$ от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\beta = m_l/m_h$ для двух предельных случаев: кулоновского акцептора (сплошные линии) и акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса (штриховые линии).

кулоновского акцептора (сплошные линии) и акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса (штриховые линии), — во всем диапазоне значений отношения масс легкой и тяжелой дырок. Максимальные различия между этими моделями возникают при отношениях масс $\beta \approx 0.1$ и составляют величину порядка 7% для x_{so} и 4% для x_{cr} .

Таким образом, аналитические выражения (20) и (19) для акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса, дают хорошую оценку величины констант деформационного потенциала и спин-орбитального расщепления кулоновского акцептора. С еще большей степенью точности они описывают x_{so} и x_{cr} для акцепторов с энергией связи, превосходящей кулоновскую.

Заметим, что при всех значениях β выполняется соотношение $x_{so} < x_{cr}$. Таким образом, для кристаллов, у которых $|\Delta_{so}| \ll |\Delta_{cr}|$ (например, GaN, AlN), при расчете уровней энергии акцептора также можно считать, что $|\tilde{\Delta}_{so}| \ll |\tilde{\Delta}_{cr}|$.

3. g-фактор акцепторного центра

Воспользовавшись полученными результатами, можно рассчитать величины g-фактора акцепторного центра в присутствии однородной деформации и спин-орбитального взаимодействия.

Таблица 1. Параметры GaN, использовавшиеся при расчете

m_h^{\parallel} [7]	m_h^{\perp} [7]	γ_1	γ	κ	\varkappa [12]	Δ_{so} [7]	Δ_{cr} [7]
2.03	0.33	2.18	0.85	0.017	9.5	12	37.5

Рассмотрим случай слабых магнитных полей, т.е. будем считать, что зеемановское расщепление магнитных подуровней много меньше кристаллического и спин-орбитального расщеплений, и учтем взаимодействие с магнитным полем по теории возмущений.

Гамильтониан дырки, связанной на акцепторе, в присутствии внешнего магнитного поля имеет следующий вид:

$$\hat{H}_a(\mathbf{k}, \mathbf{H}) = \hat{H}(\mathbf{p}, \mathbf{H}) + \hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \hat{H}', \quad (21)$$

где в сферическом приближении оператор

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{p}, \mathbf{H}) = & \hat{H}(\mathbf{p}/\hbar) - \mu_B(1 + 3\gamma + 3\kappa)(\hat{\mathbf{I}}\mathbf{H}) \\ & + \mu_B g_0(\mathbf{S}\mathbf{H}) \end{aligned} \quad (22)$$

описывает поведение свободной дырки с моментом $I = 1$ в присутствии внешнего магнитного поля [8], $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - (e/c)\mathbf{A}$ — кинетический импульс дырки, $\mathbf{A} = (1/2)[\mathbf{H} \times \hat{\mathbf{r}}]$ — векторный потенциал магнитного поля $\mu_B = (e\hbar/2m_0c)$ — магнетон Бора, c — скорость света, $g_0 \approx 2$ — g -фактор свободного электрона, κ — магнитная константа Латтинжера [8], $\hat{H}(\mathbf{p}/\hbar)$ — оператор кинетической энергии (1), $\hat{V}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ — оператор потенциальной энергии взаимодействия с акцептором, а \hat{H}' — сумма гамильтонианов спин-орбитального взаимодействия и взаимодействия с полем деформации (18).

Выделяя линейное по магнитному полю возмущение аналогично тому, как это было сделано в работе [13], запишем гамильтониан $\hat{H}(\mathbf{p}, \mathbf{H})$ в виде

$$\hat{H}(\mathbf{p}, \mathbf{h}) = \hat{H}(\mathbf{k}) + \hat{H}'_H, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}'_H = & -\mu_B \left\{ (\gamma_1 + 4\gamma)(\hat{\mathbf{L}}\mathbf{H}) - 6\gamma(\mathbf{k}\hat{\mathbf{I}})([\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{I}}]\mathbf{H}) \right. \\ & \left. + (1 + 3\gamma + 3\kappa)(\hat{\mathbf{I}}\mathbf{H}) - g_0(\hat{\mathbf{S}}\mathbf{H}) \right\} \end{aligned}$$

$$= -\mu_B (g_F \hat{\mathbf{F}} - g_0 \hat{\mathbf{S}}) \mathbf{H}, \quad (24)$$

где g_F — g -фактор акцептора в отсутствие спин-орбитального взаимодействия и внешней деформации. Величина g_F может быть найдена с помощью волновых функций акцептора Ψ_{FM} аналогично тому, как это было сделано в [13]. Она дается выражением

$$g_F = (\gamma_1 + 4\gamma)\langle L_H \rangle - 6\gamma\langle N_H \rangle + (1 + 3\gamma + 3\kappa)\langle I_H \rangle, \quad (25)$$

где

$$\langle L_H \rangle = \left\{ \frac{1}{2} - \frac{2\pi}{3} [4\langle f_h(k)f_l(k) \rangle - \langle f_l^2(k) \rangle] \right\},$$

$$\begin{aligned} \langle N_H \rangle = & \left\{ 1 + \frac{4\pi}{3} [\langle f_h(k)f_l(k) \rangle - \langle f_l^2(k) \rangle \right. \\ & \left. + \langle f'_h(k)k f_l(k) \rangle] \right\}, \end{aligned}$$

$$\langle I_H \rangle = \langle F_H \rangle - \langle L_H \rangle \equiv 1 - \langle L_H \rangle, \quad (26)$$

штрих у функции обозначает производную по модулю волнового вектора k , а $\langle L_H \rangle$, $\langle N_H \rangle$ и $\langle I_H \rangle$ — средние

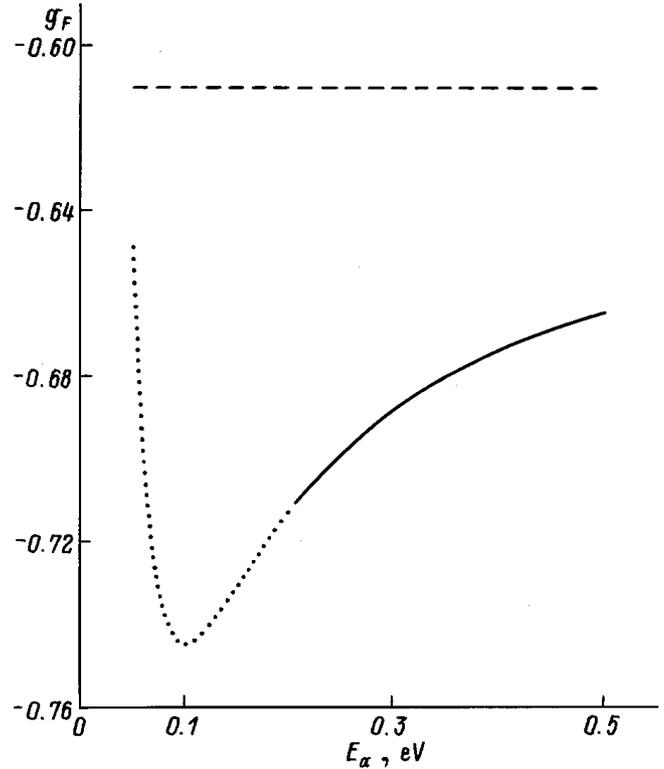


Рис. 2. Зависимость величины g -фактора основного состояния акцептора g_F от энергии связи E_a в отсутствие деформации и спин-орбитального взаимодействия, рассчитанная для параметров GaN в сферическом приближении (сплошная линия). Пунктирной линией показан g_F в области энергий связи, меньших энергии кулоновского акцептора ($E_a \leq 200$ meV). Штриховая линия — g_F в модели потенциала нулевого радиуса.

значения проекций векторов $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{N}} = (\mathbf{k}\hat{\mathbf{I}})[\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{I}}]$ и $\hat{\mathbf{I}}$ на магнитное поле. На рис. 2 приведена зависимость g_F от энергии связи основного состояния акцептора в GaN. При расчетах использовалось значение магнитной константы $\kappa = 0.015$, определенное с помощью соотношения

$$\kappa = \frac{5\gamma - \gamma_1 - 2}{3}.$$

Это соотношение получается из результатов работы [14] при учете в рамках $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -теории взаимодействия с ближайшими зонами симметрии Γ_2^- , Γ_{12}^- и Γ_{15}^- .

Из рис. 2 видно, что g_F слабо зависит от энергии связи E_a и отличается от значения $g_F = -0.61$, рассчитанного в модели потенциала нулевого радиуса, не более чем на 15% в диапазоне энергий связи, больших энергии кулоновского акцептора ($E_a \geq 200$ meV).

На рис. 3 приведены зависимости средних величин $\langle I_H \rangle$ и $\langle N_H \rangle$ от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\beta = m_l/m_h = (\gamma_1 - 2\gamma)/(\gamma_1 + 4\gamma)$, которые позволяют определить значение g_F для произвольных величин параметров γ_1 , γ и κ . Интересно отметить, что в области малых величин β g -фактор локализованной на

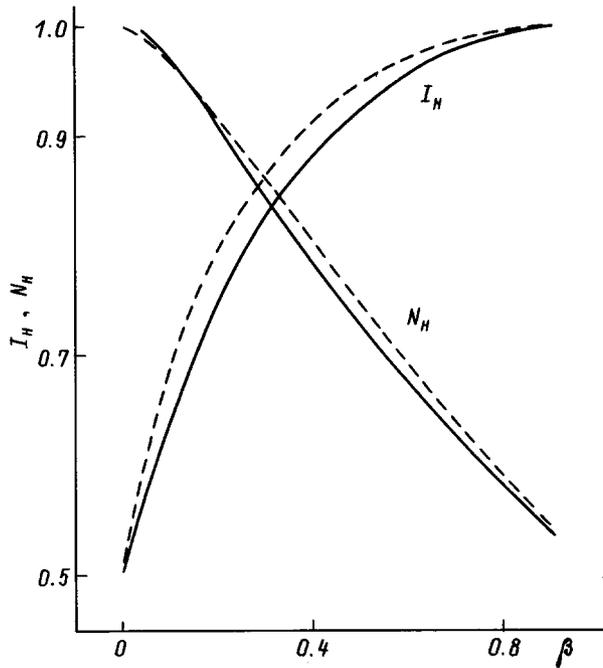


Рис. 3. Зависимости средних величин $\langle I_H \rangle$ и $\langle N_H \rangle$ от отношения масс легкой и тяжелой дырок $\beta = m_l/m_h = (\gamma_1 - 2\gamma)/(\gamma_1 + 4\gamma)$ для двух предельных случаев: кулоновского акцептора (сплошные линии) и акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса (штриховые линии).

акцепторе дырки отрицателен, в то время как g -фактор свободной дырки, равный $g = 1 + 3\kappa$, положителен. Аналогичный результат был получен в работах [15,16] для акцепторного центра в GaAs.

В модели потенциала нулевого радиуса выражение для g_F можно получить аналитически. В этом случае g_F зависит только от соотношения масс легкой и тяжелой дырок и не зависит от энергии связи

$$g_F = (\gamma_1 + 4\gamma) \frac{1 + \beta^{1/2} - 4\beta + \beta^{3/2} + \beta^2}{(1 + \beta^{1/2})(2 + \beta^{3/2})} - 6\gamma \frac{2(1 + 2\beta^{1/2} + \beta - \beta^{3/2})}{(1 + \beta^{1/2})^2(2 + \beta^{3/2})} + (1 + 3\gamma + 3\kappa) \frac{1 + \beta^{1/2} + 4\beta}{(1 + \beta^{1/2})(2 + \beta^{3/2})}. \quad (27)$$

В присутствии деформации и конечного спин-орбитального взаимодействия шестикратно вырожденный акцепторный уровень расщепляется на три подуровня, каждый из которых двукратно вырожден по направлению спина. Собственные волновые функции таких подуровней являются собственными функциями гамильтониана H' (18), в котором в общем случае вместо тензора кристаллической деформации $\hat{\epsilon}_0$ будем рассматривать произвольный тензор деформации $\hat{\epsilon}$.

Поведение двукратно вырожденного дырочного подуровня в магнитном поле описывается гамильтонианом

вида

$$\hat{H}_H = -\mu_B \frac{1}{2} \sum g_{ij}^{(n)} \hat{\sigma}_i H_j, \quad (28)$$

где $g_{ij}^{(n)}$ — компоненты тензора g -фактора, n нумерует подуровни, $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули, а H_j — компоненты вектора магнитного поля. Записав гамильтониан H'_H (24) в базисе собственных волновых функций рассматриваемого подуровня и сравнив его с гамильтонианом \hat{H}_H (28), можно определить все компоненты тензора g -фактора.

Выражения для g -факторов подуровней основного состояния акцептора в присутствии аксиальной (одноосной: $\epsilon_{zz} \neq 0$, $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0$) деформации приведены в табл. 2. Для неаксиальной (двухосной: $\epsilon_{zz} \neq \epsilon_{xx} \neq 0$, $\epsilon_{yy} = 0$) деформации в рассматриваемом случае слабого спин-орбитального взаимодействия ($|\hat{\Delta}_{so}| \ll |\hat{b}\epsilon_{zz}|$) простые аналитические выражения для компонент тензора \hat{g} удастся получить в двух перекрывающихся областях значений $\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx}$: $|\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx}| \ll |\epsilon_{zz}|$ и $|\hat{\Delta}_{so}| \ll |\hat{b}(\epsilon_{zz} - \epsilon_{xx})|$, $|\hat{b}\epsilon_{xx}|$. Соответствующие выражения для компонент тензора g -фактора приведены в табл. 3 и 4. Заметим, что общий случай трехосной деформации ($\epsilon_{zz} \geq \epsilon_{xx} \geq \epsilon_{yy}$) сводится к рассматриваемой двухосной ситуации тривиальным выделением всесторонней (гидростатической) деформации, не влияющей на вид волновой функции акцепторного уровня ($\hat{\epsilon}_{\alpha\alpha} = \epsilon_{\alpha\alpha} - \epsilon_{yy}$).

В одноосном случае (табл. 2), соответствующем эффективной деформации ϵ_{zz}^0 в GaN, g -фактор основного состояния ($J_z = F_z + S_z = \pm 3/2$) предельно анизотропен ($g_{zz} \neq 0$, $g_{xx} = g_{yy} = 0$). Из табл. 4 видно, что в случае двухосной деформации и слабого спин-орбитального взаимодействия g -фактор всех трех подуровней практически изотропен и приблизительно равен по величине g -фактору свободного электрона.

В [6] экспериментально измерялся g -фактор основного состояния акцепторов (Mg и Zn) в GaN. Было показано, что величина g -фактора близка к g_0 , а его анизотропия мала, что противоречит изложенной выше простой теории, согласно которой g -фактор основного состояния акцептора в GaN должен быть предельно анизотропным. Качественно этот результат можно объяснить возникновением спонтанной локальной деформации в плоскости, перпендикулярной оси C_6 , вюрцита (эффекта Яна–Теллера). В этом случае начальная аксиальная деформация превращается в неаксиальную, что приводит к практически изотропному g -фактору, как показано в табл. 4 (на роль эффекта Яна–Теллера в изотропизации g -фактора акцепторных состояний в GaN указывалось в [6]). Детальное рассмотрение такой спонтанной деформации выходит за рамки данной работы.

В заключение обратим внимание на то, что развитая выше теория становится несправедливой для достаточно мелких акцепторных центров, энергия связи которых сравнима с величиной спин-орбитального или кристаллического расщепления валентной зоны. В частности, для случая большой энергии спин-орбитального взаимодействия неаксиальная деформация уже не приводит

Таблица 2. g -фактор и энергии подуровней основного состояния акцептора в присутствии одноосной деформации ($\varepsilon_{zz} \neq 0$, $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0$) для случая слабой спин-орбитальной связи ($|\tilde{\Delta}_{so}| \ll |\tilde{b}\varepsilon_{zz}|$)

E_n	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})\varepsilon_{zz} + 3\tilde{b}\varepsilon_{zz} - \frac{\tilde{\Delta}_{so}}{3}$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})\varepsilon_{zz} + 3\tilde{b}\varepsilon_{zz} + \frac{\tilde{\Delta}_{so}}{3} + \frac{2\tilde{\Delta}_{so}^2}{27\tilde{b}\varepsilon_{zz}}$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})\varepsilon_{zz} - \frac{2\tilde{\Delta}_{so}^2}{27\tilde{b}\varepsilon_{zz}}$
g_{xx}	0	$\frac{V_{zz}^2}{2}g_0 + V_{zz}(2 - V_{zz})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{zz}^2}{2}\right) + V_{zz}(2 - V_{zz})g_F$
g_{yy}	0	$-\frac{V_{zz}^2}{2}g_0 - V_{zz}(2 - V_{zz})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{zz}^2}{2}\right) + V_{zz}(2 - V_{zz})g_F$
g_{zz}	$-g_0 + 2g_F$	$-g_0(1 - V_{zz}^2) - V_{zz}(2 - V_{zz})g_F$	$-g_0(1 - V_{zz}^2) + V_{zz}^2g_F$

П р и м е ч а н и е. E_n — энергии расщепившихся подзон. За начало отсчета принято положение акцепторного уровня в отсутствие деформации и спин-орбитального взаимодействия. Использовано обозначение $V_{zz} = 2\tilde{\Delta}_{so}/9\tilde{b}\varepsilon_{zz}$.

Таблица 3. g -фактор и энергии E_n подуровней основного состояния акцептора в присутствии слабо-двухосной деформации ($|\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}| \ll |\varepsilon_{zz}| \neq 0$, $\varepsilon_{yy} = 0$, $|\tilde{\Delta}_{so}| \ll |\tilde{b}\varepsilon_{zz}|$)

E_n	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx})$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}\varepsilon_{xx} + \frac{3}{2}\tilde{b}\varepsilon_{zz}F_+$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}\varepsilon_{xx} + \frac{3}{2}\tilde{b}\varepsilon_{zz}F_-$
g_{xx}	$-g_0 - \left(V_{zz}V_- + \frac{V_{zz}V_+}{h}\right)g_F$	$-\frac{F_+^2 - V_{zz}^2}{F_+^2 + V_{zz}^2}g_0 - \frac{V_{zz}V_+}{h}g_F$	$-\frac{V_{zz}^2 - F_-^2}{V_{zz}^2 + F_-^2}g_0 + (V_{zz}V_-)g_F$
g_{yy}	$-g_0$	$-g_0 - \frac{4V_{zz}F_+}{F_+^2 + V_{zz}^2}g_F$	$-g_0 - \frac{4V_{zz}F_-}{F_-^2 + V_{zz}^2}g_F$
g_{zz}	$g_0 - \left(V_-F_- + \frac{V_+F_+}{h}\right)g_F$	$-\frac{F_+^2 - V_{zz}^2}{F_+^2 + V_{zz}^2}g_0 + \frac{V_+F_+}{h}g_F$	$-\frac{F_-^2 - V_{zz}^2}{F_-^2 + V_{zz}^2}g_0 - (V_-F_-)g_F$

П р и м е ч а н и е. За начало отсчета принято положение акцепторного уровня в отсутствие деформации и спин-орбитального взаимодействия. Использованы следующие обозначения: $V_{\pm} = 2V_{zz}\sqrt{V_{zz}^2 + F_{\pm}^2}$, $F_{\pm} = 1 - h \pm \sqrt{(1-h)^2 + V_{zz}^2}$, $h = \varepsilon_{xx}/\varepsilon_{zz}$.

Таблица 4. g -фактор и энергии E_n подуровней основного состояния акцептора в присутствии сильно-двухосной деформации ($|\tilde{\Delta}_{so}/\tilde{b}| \ll |(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})|$, $|\varepsilon_{zz}|, |\varepsilon_{xx}|, \varepsilon_{yy} = 0$)

E_n	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) \left(1 + \frac{V_{xx}V_{zz}}{4}\right)$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}\varepsilon_{xx} - \frac{3}{4}V_{xx}V_{xz}\tilde{b}(\varepsilon_{xx} - 2\varepsilon_{zz})$	$-(\tilde{a} + 2\tilde{b})(\varepsilon_{zz} + \varepsilon_{xx}) + 3\tilde{b}\varepsilon_{zz} + \frac{3}{4}V_{xx}V_{xz}\tilde{b}(\varepsilon_{zz} - 2\varepsilon_{xx})$
g_{xx}	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xx}^2}{2}\right) - V_{xx}(2 + V_{xx})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xz}^2}{2}\right) + V_{xx}(2 + V_{xz})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xx}^2 + V_{xz}^2}{2}\right) + V_{xx}V_{xz}g_F$
g_{yy}	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xx}^2 + V_{zz}^2}{2}\right) + V_{xx}V_{zz}g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{zz}^2}{2}\right) - V_{xz}(2 - V_{zz})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xx}^2}{2}\right) + V_{xz}(2 - V_{xx})g_F$
g_{zz}	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{zz}^2}{2}\right) - V_{xx}(2 + V_{zz})g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{zz}^2 + V_{xz}^2}{2}\right) - V_{xz}V_{zz}g_F$	$-g_0 \left(1 - \frac{V_{xz}^2}{2}\right) + V_{xx}(2 - V_{xz})g_F$

П р и м е ч а н и е. За начало отсчета принято положение акцепторного уровня в отсутствие деформации и спин-орбитального взаимодействия. Использованы следующие обозначения: $V_{xx} = (2\tilde{\Delta}_{so}/9\tilde{b}\varepsilon_{xx})$, $V_{xz} = 2\tilde{\Delta}_{so}/9\tilde{b}(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})$.

к замораживанию орбитального движения дырки, и ее g -фактор должен заметно отличаться от g -фактора свободного электрона.

Мы благодарны Ал.Л.Эфросу, обратившему наше внимание на данную задачу, а также П.Г.Баранову и Б.Майеру за полезные обсуждения.

Выполнение этой работы поддержано грантами Российского фонда фундаментальных исследований № 96-1596392 и 95-02-04055.

Список литературы

- [1] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972). 584 с.
- [2] Б.Л. Гельмонт, А.В. Родина. ФТП **25**, 12, 2189 (1991).
- [3] A.V. Malyshev, I.A. Merkulov, A.V. Rodina. Phys. Rev. **B55**, 4388 (1997).
- [4] А.В. Малышев, И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП **30**, 1, 159 (1996).
- [5] H.P. Marasuka, J.J. Tietjen. Appl. Phys. Lett. **15**, 327 (1969).
- [6] U. Kaufmann, M. Kunzer, C. Merz, I. Akasaki, H. Amano. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. **395** (1996).
- [7] G.D. Chen, M. Smith, J.Y. Lin, H.X. Jiang, S.-H. Wei, M. Khan, C.J. Sun. Appl. Phys. Lett. **68**, 2784 (1996).
- [8] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [9] В.И. Перель, И.Н. Ясиевич. ЖЭТФ **82**, 237 (1982).
- [10] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989).
- [11] Landolt-Borstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Springer-Verlag (1982). V. 17. Subvol. a.
- [12] И.В. Костин, Е.Б. Осипов, Н.А. Осипова. ФТП **27**, 10, 1743 (1993).
- [13] А.В. Малышев, И.А. Меркулов. ФТТ **39**, 1, 58 (1997).
- [14] G. Dresselhaus, A.F. Kip, C. Kittel. Phys. Rev. **98**, 368 (1955).
- [15] Р.И. Джиоев, Б.П. Захарченя, В.Г. Флейшер. Письма в ЖЭТФ **17**, 5, 224 (1973).
- [16] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. ФТП **7**, 12, 2013 (1973).