

Акцепторные состояния в кубических полупроводниках с большим отношением масс дырок

© Т.Л. Линник, В.И. Шека

Институт физики полупроводников Академии наук Украины,
252650 Киев, Украина

E-mail: lynnyk@class.semicond.kiev.ua,
sheka@class.semicond.kiev.ua

(Поступила в Редакцию 30 октября 1998 г.)

В кубических полупроводниках отношение масс дырок невелико, что позволяет использовать предел нулевой массы легкой дырки. В этом популярном пределе оказалось возможным отойти от вариационных методов решения уравнения Латтинжера и определить с хорошей точностью не только весь энергетический спектр для связанных состояний акцептора и собственные функции, в том числе и в импульсном пространстве, но и их поведение при больших радиусах. Этот подход позволил предположить сравнительно простые соотношения для самых нижних состояний каждой серии при различных моментах импульса, охватывающие весь интервал возможных отношений масс для полупроводников.

Первые расчеты уровней энергии акцептора относятся к началу 60-х годов и непосредственно связаны с Латтинжером и Коном, их удачная формулировка метода эффективной массы и сделала эти работы возможными [1–4], хотя впервые проблема была сформулирована в работе [5]. Через несколько лет был сделан и следующий шаг — в рамках модели Кейна [6] был произведен учет конечной ширины запрещенной зоны [7,8]. Все эти работы опираются на вариационные вычисления. Видимо, наиболее известными являются статьи [9,10], где в несколько более оглубленном по сравнению с [8] приближении (двухзонная модель Латтинжера [2] в сферическом приближении [9], а также с учетом кубических поправок [10,11]) подробно рассчитаны акцепторные уровни с параметрами реальных кристаллов. В последнее время вновь возник интерес к этой проблеме, связанный с желанием выяснить асимптотическое поведение волновой функции как в реальном, так и в импульсном пространстве, что актуально, например, для прыжковой проводимости и для горячей люминесценции. С этой точки зрения вариационные методы могут оказаться неэффективными, так как пробная волновая функция, вырабатывая весьма точные значения уровней энергии, может слишком грубо описывать асимптотику реальной функции. Примером отказа от вариационных вычислений могут служить работы [4,12], где радиальные уровни Латтинжера решались разложением в ряд по степеням радиуса. В полупроводниках с большим отношением масс легких и тяжелых дырок (m_l и m_h) энергия акцептора определяется практически лишь массой m_h [8,13–17] и, следовательно, в них допустим предел $m_l = 0$. Этот предел заслуживает внимания и тем, что допускает невариационное решение задачи. Сравнение расчетов подтвердило, в частности, достаточно высокую надежность вариационных вычислений работы [8], по нашему мнению, это же должно относиться и к работе [9].

В настоящей работе удалось в сферическом приближении в радиальных уравнениях типа Латтинжера провести разложение по отношению масс. При бесконечном отно-

шении масс дырок новым результатом по сравнению с работами [13–17] является расчет не только основного состояния, но и возбужденных как для различных моментов количества движения, так и для высших уровней одной серии. Задача осложнялась тем, что радиальные функции ведут себя по-разному на бесконечности и, в частности, одна из них спадает не экспоненциально, а как степень радиуса. Поведение функций на бесконечности и при произвольном отношении масс отражает эту специфику.

1. Вариационный функционал и уравнение для акцептора

Несмотря на то что целью работы является рассмотрение предельных случаев уравнений для акцепторных состояний, удобно исходить из более общей многозонной постановки — схемы Кейна [6]. В сферическом приближении переменные в соответствующих уравнениях были разделены в работе [8]. Волновая функция с полным моментом j может быть представлена в виде

$$\Psi^{jm}(\mathbf{r}) = U_e^{jm} G_e(r) + U_1^{jm} G_1(r) + U_{-1}^{jm} G_{-1}(r) + U_s^{jm} G_s(r). \quad (1)$$

Здесь в отличие от [8] радиальные функции определены так, что матричные элементы на этих функциях вычисляются с весом 1.

Сферические четырехкомпонентные функции валентной зоны ($\nu = 1, -1$)

$$U_\nu^{jm}(\mathbf{r}/r) = \sum_\mu \left(\frac{3}{2}, l + \nu, \mu, m - \mu | j, m \right) \times Y_{l+\nu, m-\mu} e_\mu \quad (2)$$

с помощью коэффициентов Клебша–Гордона [18] выражаются через спиноры e_μ и обычные одномерные

сферические функции Y_{lm} с моментом l . Следуя [8], полный момент системы определяется по моменту электронной компоненты волновой функции как $j = l + \sigma/2$, ($\sigma = \pm 1$).

Поскольку главным образом рассматриваются акцепторные состояния, мы воспользовались вариационным функционалом [8], записанным в дырочном представлении: массы дырок положительны и ветви валентной зоны направлены вверх, а отсчет энергии ведется от дна валентной зоны, и для связанных состояний энергия отрицательна. На данном этапе более общая модель Кейна позволила объединить два предельных случая для спин-отщепленного параметра $\Delta = \infty$ и $\Delta = 0$. При этом удобно ввести следующие обозначения:

$$\gamma_\sigma = \begin{cases} \sqrt{(L+2)/(2L+1)}, & \Delta = \infty \\ \sqrt{3(L+2)/(2L+1)}, & \Delta = 0 \end{cases}$$

$$\gamma_{-\sigma} = \sqrt{3L/(2L+1)},$$

где $L = l$ для $\sigma = 1$ и $L = -l - 1$ для $\sigma = -1$.

На этапе перехода к двузонной модели дырочных зон типа Латтинжера мы исключаем электронную компоненту G_e волновой функции. Отметим, что при таком переходе ширина запрещенной зоны E_g принимается большой по сравнению с характерными энергиями акцептора. Варьируя функционал модели Кейна по G_e и учитывая предыдущее замечание, можно получить

$$\frac{\sqrt{3}E_g}{P} G_e = \gamma_1 \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) G_1 + \gamma_{-1} \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) G_{-1}. \quad (3)$$

В результате после подстановки G_e функционал зависит только от дырочных функций и принимает вид

$$J_h = - \int_0^\infty \left\{ \sum_{\nu=1,-1} G_\nu \left(\frac{\hbar^2}{2m_h} \alpha_\nu \Delta_{l+\nu} + \frac{Ze^2}{r} + E \right) G_\nu + \frac{\hbar^2}{m_h} \alpha_0 G_1 \left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) G_{-1} \right\} dr. \quad (4)$$

Здесь

$$\frac{P^2}{3E_g} = \frac{\hbar^2}{4m_h} \frac{1-\beta}{\beta}, \quad \beta = \frac{m_l}{m_h}, \quad \Delta_l = \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

$$\alpha_{\pm 1} = 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta} - 1 \right) \gamma_{\pm 1}^2,$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta} - 1 \right) \gamma_{-1} \gamma_1, \quad (5)$$

а Z для мелких акцепторов равно обратной диэлектрической проницаемости. И наконец, варьируя по G_1 и G_{-1} ,

получим систему уравнений для акцептора типа Латтинжера в сферическом приближении, объединяющую два предельных случая $\Delta = \infty$ и 0 ,

$$\begin{cases} - \left(\frac{\hbar^2}{2m_h} \alpha_1 \Delta_{l+1} + \frac{Ze^2}{r} + E \right) G_1 \\ \quad - \frac{\hbar^2}{2m_h} \alpha_0 \left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) G_{-1} = 0, \\ - \frac{\hbar^2}{2m_h} \alpha_0 \left(\frac{d}{dr} + \frac{l}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) G_1 \\ \quad - \left(\frac{\hbar^2}{2m_h} \alpha_{-1} \Delta_{l-1} + \frac{Ze^2}{r} + E \right) G_{-1} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Эта система для произвольного L рассматривалась в работе [13] и может быть получена из гамильтониана Латтинжера [2] для случая $\Delta = \infty$

$$H_L = \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{1}{m_h} \right) \hat{\mathbf{k}}^2 \mathbf{I} - \frac{\hbar^2}{4} \left(\frac{1}{m_l} - \frac{1}{m_h} \right) \times \left[(\mathbf{J}\hat{\mathbf{k}})^2 - \frac{5}{4} \mathbf{k}^2 \mathbf{I} \right] - \frac{Ze^2}{r}, \quad (7)$$

где \mathbf{J} — матрицы момента $3/2$ [2], $\hat{\mathbf{k}}$ — оператор квазиимпульса, а \mathbf{I} — единичная матрица 4-го порядка.

При $\Delta = 0$, когда спин-орбитальное взаимодействие не входит в гамильтониан, два варианта для L совпадают, а $j = l$. В сферических функциях (2) спиноры e_μ становятся трехмерными столбцами, принадлежащими моменту 1, и в (2) следует заменить $3/2 \rightarrow 1$. Соответствующий гамильтониан Латтинжера приобретает форму трехмерной матрицы [2].

В полупроводниках с малым отношением эффективных масс легких и тяжелых дырок возможно дальнейшее упрощение. Как видно из уравнений Кейна [8], при больших E_g электронная часть G_e радиальной функции мала и, если попытаться исключить ее полностью из вариационного функционала, то одновременно исчезнет и зависимость от параметра P , т.е. от легкой дырки. На это обстоятельство было обращено внимание в работе [8] при $\Delta = 0$, в этом же приближении рассматривался акцептор в [17], а случай $\Delta = \infty$ в работах [13–17].

В уравнениях Латтинжера эффективная масса легких дырок входит как большая величина и ее исчезновение из функционала (4) возможно, если выполняется равенство (3) с $G_e = 0$ (в дальнейшем при ссылке на соотношение (3) мы будем предполагать выполнение этого условия). Такое соотношение позволяет исключить одну из функций из функционала J_g , и, поскольку установлена дополнительная связь между функциями, значения энергий получатся завышенными. Равенство (3) не налагает никаких ограничений на величины E_g и m_l , но естественно приводит к более точным результатам с уменьшением m_l . Соответствующие гамильтонианы уравнений Шредингера для функций G_ν принимают вид

$$H_\nu = - \frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_{l+\nu} - Ze^2 \left[\frac{1}{r} + \delta(\nu) \right] \times D \left(-l + \frac{1+\nu}{2} \right) \frac{1}{r^3} D \left(l - \frac{1+\nu}{2} \right). \quad (8)$$

Здесь коэффициент $\delta(\nu) = -\nu\gamma_\nu^2(2l+1)/(\gamma_1^2 + \gamma_{-1}^2)$ и введен обратный оператор (см. Приложение 1)

$$D(\alpha) = \left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r} \right)^{-1}. \quad (9)$$

Для основного состояния ($j = 3/2, l = 1$) и $\Delta = \infty$ уравнение Шредингера, отвечающее гамильтониану H_{-1} , совпадает с соответствующим уравнением работы [15], записанным в импульсном пространстве.

Хотя уравнение (8) не содержит величины щели E_g и при выводе можно избежать ограничений на ее величину, предполагалось, что сама задача требует щели более широкой, чем энергия ионизации акцептора, чтобы спектр акцептора смог разместиться в запрещенной зоне (однако возможно и рассмотрение резонансных уровней в бесщелевых полупроводниках [14]).

2. Невариационное решение уравнения для акцептора при $m_l = 0$

Этот предельный случай, как показывают вычисления раздела 4, недостаточно точно описывают реальные полупроводники. Однако он интересен тем, что позволяет получить невариационное решение уравнений (6) и таким образом установить надежность приближенных вариационных вычислений.

Соотношение (3) с $G_e = 0$ позволяет установить связь между функциями в виде

$$G_1(\gamma) = -\frac{\gamma_{-1}}{\gamma_1} \frac{1}{r^{l+1}} \int_0^r x^{l+1} \left(\frac{d}{dx} - \frac{l}{x} \right) G_{-1}(x) dx, \quad (10)$$

$$G_{-1}(\gamma) = -\frac{\gamma_1}{\gamma_{-1}} r^l \int_\infty^r x^{-l} \left(\frac{d}{dx} + \frac{l+1}{x} \right) G_1(x) dx. \quad (11)$$

Для основного состояния соотношение (3) и формула (10) для функций другого вида использовались в [16]. Из этих формул видно, что G_1 в отличие от G_{-1} спадает на бесконечности по степенному закону и поэтому поиск решения для G_1 в виде разложения по водородоподобным функциям (что полнее всего отвечает духу задачи) должен быть неэффективен, а успеха следует ожидать при акцентировании внимания на функции G_{-1} .

Записывая уравнение Шредингера $(H_{-1} - E)G_{-1} = 0$, удобно как всегда перейти к безразмерным единицам, измеряя r в боровских радиусах тяжелой дырки $a_B = \hbar^2/m_h Z e^2$, а энергию в ридбергах $R_y = (Z e^2)^2 m_h / 2 \hbar^2$. Если избавиться от обратных операторов, то уравнение для G_{-1} принимает вид

$$\left\{ \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+3}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) \left[\Delta_{l-1} + \frac{2}{r} + E \right] + \delta(-1) \frac{2}{r^3} \right\} G_{-1}(r) = 0. \quad (12)$$

Решение найдено в виде ряда

$$G_{-1}(r) = \frac{\gamma_1}{N_0} \sqrt{2\lambda} (2\lambda r)^l e^{-\lambda r} \sum_{n=0}^N A_n L_n^{2l-1}(2\lambda r),$$

$$N_0^2 = 2(\gamma_1^2 + \gamma_{-1}^2)$$

$$\times \sum_n A_n^2 (n+l) \frac{(n+2l-1)!}{n!}, \quad N \rightarrow \infty, \quad (13)$$

Здесь $L_n^\alpha(x)$ — обобщенные полиномы Лагерра [19]. Из соотношения (3) видно, что нормировки функций G_ν отличаются лишь множителем γ_1/γ_{-1} , и коэффициент в определении G_{-1} выбран так, чтобы была нормирована на единицу полная волновая функция (1) (в приближении Латтинжера $G_e = G_s = 0$).

Из условия поведения на бесконечности для дискретного спектра следует, что $E = -\lambda^2$, а уравнение для коэффициентов принимает вид

$$a_n A_{n-2} + b_n A_n + A_{n+2} = 0, \quad (14)$$

где

$$a_n = n(n-1)[1 - \lambda(n+l-2)]/d_n,$$

$$b_n = \left\{ 4\delta(-1) - 2[1 - \lambda(n+l)](n^2 + 2nl + 2l^2 + 5l + 2) \right\} / d_n,$$

$$d_n = (n+2l)(n+2l+1)[1 - \lambda(n+l+2)]. \quad (15)$$

Обратим внимание, что в уравнение для A_n входят только четные или нечетные n , что приводит к двум различным наборам уровней. Соотношение (14) может быть записано в виде

$$\frac{A_n}{A_{n-2}} = \frac{-a_n}{b_n + \frac{A_{n+2}}{A_n}} \quad (16)$$

и развернуто, скажем для четных n , в цепную дробь

$$\frac{A_2}{A_0} = -b_0 = -\frac{a_2}{b_2 - \frac{a_4}{b_4 - \dots}}, \quad (17)$$

а это уже является уравнением для λ и, следовательно, для энергии. По существу, это условие равенства нулю детерминанта системы (14) и, значит, ее разрешимости. Для нечетных n в уравнении (16) следует n увеличить на 1.

Найденное решение и нормировка N_0 сходятся только в корнях уравнения (17). Можно также убедиться, что второе решение уравнения (12) тоже регулярное в нуле и на бесконечности (оно начинается с r^{l+2}) не удовлетворяет исходному уравнению (8).

Исходя из соотношения (10), функцию $G_1(r)$, как оказалось, удобно представить в виде

$$G_1(r) = \frac{\gamma_{-1}}{N_0} \sqrt{2\lambda} \left\{ (2\lambda r)^{l+2} e^{-\lambda r} \sum_{n=\mu, \mu+2, \dots}^{N-2} B_n L_n^{2l+3}(2\lambda r) + \tilde{\gamma} \frac{\lambda}{(2\lambda r)^{l+1}} \int_0^r (2\lambda x)^{2l+1} e^{-\lambda x} L_\mu^{2l+1}(2\lambda x) dx \right\}, \quad (18)$$

выделив явно особенность поведения на бесконечности, $\mu = 0$ относится к решениям из набора с четными n ,

Энергии основного и нескольких возбужденных состояний акцептора в предельном случае нулевого отношения эффективных масс

l	$\Delta = \infty, j = l + 1/2$			$\Delta = 0, j = l$		
	$-E_0$	$-E_1$	E_2	$-E_0$	$-E_1$	E_2
$l = 1$	0.4360	0.1349	0.0703	0.5976	0.1687	0.0826
$l = 2$	0.1213	0.0629	0.0395	0.1589	0.0772	0.0465
$l = 3$	0.0610	0.0382	0.0264	0.0760	0.0455	0.0306
$\Delta = \infty, j = l - 1/2$						
$l = 2$	0.2252	0.1019	0.0582			
$l = 3$	0.0986	0.0565	0.0367			

а $\mu = 1$ — с нечетными n (в формуле (13) должна фигурировать сумма такого же типа).

Коэффициенты B_n и $\tilde{\gamma}$ получаются из рекуррентных соотношений

$$B_n = \frac{1}{(n + 2l + 2)(n + 2l + 3)} \times \left\{ (A_n - A_{n+2}) + n(n - 1)B_{n-2} - \tilde{\gamma}\delta_{n,\mu} \right\}. \quad (19)$$

Особый интерес представляет коэффициент $\tilde{\gamma}$, так как он стоит возле слагаемого с нестандартным поведением на бесконечности

$$\tilde{\gamma} = \frac{2}{(2l + 2)^\mu} \sum_{n=\mu, \mu+2, \dots}^N \frac{(n + 2l - 1)!}{(2l)n!} (n + l)A_n. \quad (20)$$

Для основного состояния ($j = 3/2, L = 1, \mu = 0$) $\tilde{\gamma} = 0.703$.

Результаты расчетов абсолютных значений энергии для первых возбужденных состояний при различных значениях полного момента j приведены в таблице.

В случае $\Delta = \infty, j = l - 1/2$ и $l = 1$ соотношение (3) теряет смысл, поскольку γ_1 обращается в нуль, но система уравнений (6) вырождается в два несвязанных водородных уравнения с массами легких и тяжелых дырок. При $\Delta = 0$ нет зависимости от спада и, следовательно, $j = 1$.

3. Простой вариационный метод при $m_l = 0$

Как показали численные вычисления, для самых нижних уровней каждой серии по l в разложении (13) наибольшим оказывается коэффициент A_0 , поэтому $G_{-1}(r)$ может быть описано простой вариационной функцией вида

$$G_{-1}(r) = N_{-1}r^l e^{-\tilde{\lambda}r}, \quad N_{-1} = \frac{\gamma_1}{N_p} (2\tilde{\lambda})^{l+1/2},$$

$$N_p^2 = (\gamma_1^2 + \gamma_{-1}^2)(2l)!. \quad (21)$$

Действительно, оказалось, что по сравнению с предыдущим разделом нормировки N_p и N_0 близки, мало отличаются параметры λ и, следовательно, собственные значения и сами собственные функции.

Средняя энергия для гамильтониана H_{-1} из соотношения (8) после минимизации по $\tilde{\lambda}$ равна

$$E = -\tilde{\lambda}^2, \quad \tilde{\lambda} = \frac{1}{l} + \frac{\delta(-1)}{(l + 1)(2l + 1)} \left[w - \frac{l + 1}{l} \right],$$

$$w = (2l + 1)2^{2l+1} \left[\ln 2 - \sum_{n=1}^{2l+1} \frac{1}{2^n n} \right]. \quad (22)$$

Аппроксимация (21) оказалась удачной (для основного состояния она совпадает с аппроксимацией работы [15]). Действительно, самые нижние уровни энергии в каждой из серий с фиксированными j и l с тремя знаками совпадают с приведенными в таблице. Менее точно рассчитывается основное состояние ($j = 3/2, l = 1$), где энергия $E = -0.434$ Ry при $\Delta = \infty$ [15]. При $\Delta = 0$ в работе 8 было получено $E = -0.598$ Ry.

Как уже отмечалось, важной особенностью поведения функции $G_1(r)$ является не экспоненциальное, а степенное спадание на бесконечности, и при простой вариационной функции (21) для самого нижнего состояния каждой серии оно описывается подобно последнему слагаемому в (18)

$$G_1(r) = \frac{1}{2} \frac{\gamma_{-1}}{N_p} \sqrt{2\tilde{\lambda}} \left(\frac{2\tilde{\lambda}}{r} \right)^{l+1} \int_0^r x^{2l+1} \exp(-\tilde{\lambda}x) dx$$

$$\rightarrow \frac{1}{2} \frac{\gamma_{-1}}{N_p} \sqrt{2\tilde{\lambda}} \left(\frac{2\tilde{\lambda}}{r} \right)^{l+1} (2l + 1)! \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (23)$$

Эта приближенная оценка асимптотики волновой функции отличается от точного значения, согласно (18), только коэффициентом $\tilde{\gamma}$, близким для основного состояния к единице.

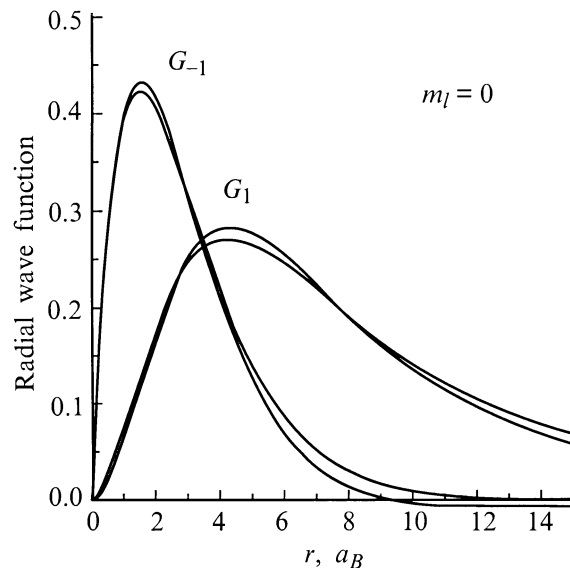


Рис. 1. Радиальные волновые функции для основного состояния ($j = 3/2, l = 1, \mu = 0$) в пределе $m_l = 0$. Кривые с большим максимумом соответствуют точному решению (разд. 2), с меньшим — приближенному (разд. 3). Перемена знака у функции G_{-1} допустима, так как теорема о числе нулей собственных функций не применима к уравнению (12).

Для серии с $l = 1$ и $j = 3/2$, к которой принадлежит основное состояние, набор из четырех вырожденных волновых функций повторяет вид гамильтониана Латтинжера (7)

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left\{ G_{-1} \mathbf{I} - \left[(\mathbf{Jr})^2 / r^2 - \frac{5}{4} \mathbf{I} \right] G_1 \right\} \frac{1}{r}, \quad (24)$$

а сами функции $\Psi^m(\mathbf{r})$ являются соответствующими столбцами этой матрицы. Последний множитель следует учитывать при переходе к стандартному определению волновых функций (см. текст после формулы (1)). Угловая часть при G_1 содержит только d -функции и, следовательно, согласно (23), на больших расстояниях волновые функции для основного состояния существенно анизотропны.

На рис. 1 приведены обе компоненты волновой функции основного состояния для вариационного и точного решений. Отметим, что расчеты по методу работы [8] (см. раздел 6) на рисунке совпадают с точными расчетами предыдущего раздела: отличие в третьем знаке в максимуме.

4. Поправки к энергии и собственной функции порядка m_l/m_h

Определяя из первого уравнения системы (6) функцию G_1 в безразмерных единицах

$$G_1 = -\frac{\alpha_0}{\alpha_1} \frac{1}{\Delta_{l+1} + \frac{2}{\alpha_1 r} + \frac{E}{\alpha_1}} \hat{R}(r) G_{-1},$$

$$\hat{R}(r) = \left(\frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) \left(\frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right), \quad (25)$$

преобразуем вариационный функционал J_h (4) к виду

$$J'_h = \int_0^\infty G_{-1} \left\{ - \left(\alpha_{-1} \Delta_{l-1} + \frac{2}{r} + E \right) + \frac{\alpha_0^2}{\alpha_1} \hat{R}(r) + \frac{1}{\Delta_{l+1} + \frac{2}{\alpha_1 r} + \frac{E}{\alpha_1}} \hat{R}(r) \right\} G_{-1} dr. \quad (26)$$

В знаменателе в (26) $1/\alpha_1 \propto m_l/m_h$, и по сравнению с другими слагаемыми среднее характерное значение $\Delta_{l+1} \propto \tilde{\lambda}^2$ велико, поэтому можно разложить знаменатель по $1/\alpha_1$, воспользовавшись соотношением

$$\frac{1}{A+B} = \frac{1}{A} - \frac{1}{A} B \frac{1}{A+B}$$

$$= \frac{1}{A} - \frac{1}{A} B \frac{1}{A} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A} B \frac{1}{A} - \dots \quad (27)$$

при

$$A = \Delta_{l+1}, \quad B = \frac{2}{\alpha_1 r} + \frac{E}{\alpha_1}.$$

Тогда в уравнении для G_{-1} будет фигурировать разложение

$$\hat{R}(r)^+ \frac{1}{\Delta_{l+1} + \frac{2}{\alpha_1 r} + \frac{E}{\alpha_1}} = \Delta_{l-1} - \frac{E}{\alpha_1} - \frac{2}{\alpha_1} I_1$$

$$+ \left(\frac{E}{\alpha_1} \right)^2 I_2 + \frac{2E}{\alpha_1^2} (I_1 I_2 + I_2 I_1) + \left(\frac{2}{\alpha_1} \right)^2 I_1 I_2 I_1 + \dots,$$

$$I_1 = \frac{1}{r} + \frac{2l+1}{2l+2} \left\{ D(-l) \frac{1}{r^2} - \frac{1}{r^2} D(l) \right\},$$

$$I_2 = \frac{1}{2l-1} \{ D(-l)r - rD(l) \}. \quad (28)$$

При работе с обратными операторами использовались формулы Приложения 1; формулы (П. 5) дают возможность выразить произведения типа $I_\mu I_{\mu'}$ через первые степени $D(\nu)$. Для вариационной функции (21) все интегралы вычисляются. В результате отдельные слагаемые J'_h оказываются пропорциональными степеням $1/\tilde{\lambda}$, что плохо отражает поведение J'_h при малых $\tilde{\lambda}$. Действительно, как следует из формулы (26), в этой области изменения $\tilde{\lambda}$ функционал ограничен. Это связано с тем, что разложение J'_h по $\tilde{\lambda}$ плохо описывается степенным рядом. Альтернативным разложением, лишенным этого недостатка, может служить цепная дробь, область сходимости которой шире, чем область сходимости соответствующего ей ряда. С учетом сказанного

$$J'_h = \left(\alpha_{-1} - \frac{\alpha_0^2}{\alpha_1} \right) \tilde{\lambda}^2 - \frac{2\tilde{\lambda}}{l} - \frac{\alpha_0^2}{\alpha_1^2} \frac{C_1}{1 - \frac{1}{\alpha_1} \frac{C_2/C_1}{1+\dots}} - E, \quad (29)$$

где

$$C_1 = E + \frac{2\tilde{\lambda}}{l+1} w,$$

$$C_2 = \left(\frac{E}{\tilde{\lambda}} \right)^2 \frac{2l+3}{2l-1} + \frac{2E}{\tilde{\lambda}} \left[\frac{l+1}{l} - w \right] + 8 \frac{1-w}{2l+3}. \quad (30)$$

Если в формулах (29) и (30) устремить $m_l \rightarrow 0$, то из J'_h получается средняя энергия формулы (22). Исходный оператор для J'_h при фиксированном E в правой части формулы (26) имеет эрмитовый вид и поэтому можно минимизировать J'_h по $\tilde{\lambda}$, причем его минимум должен равняться нулю. Найденные значения энергий хорошо совпадают с вычислениями работы [9] при всех использованных там отношениях масс. Точное решение при $m_l/m_h = 0$ для функции G_{-1} было найдено в виде разложения по водородным функциям с экспоненциальным спаданием на бесконечности, в то время как для функции G_1 выработалось степенное спадание. При конечном отношении масс дырок также можно ожидать изменения поведения G_{-1} , однако соответствующая поправка должна быть порядка отношения масс m_l/m_h . Выбирая вариационную функцию в простом виде (21), мы игнорировали это обстоятельство, однако достигнутый хороший результат при реальных отношениях масс оправдывает такой выбор.

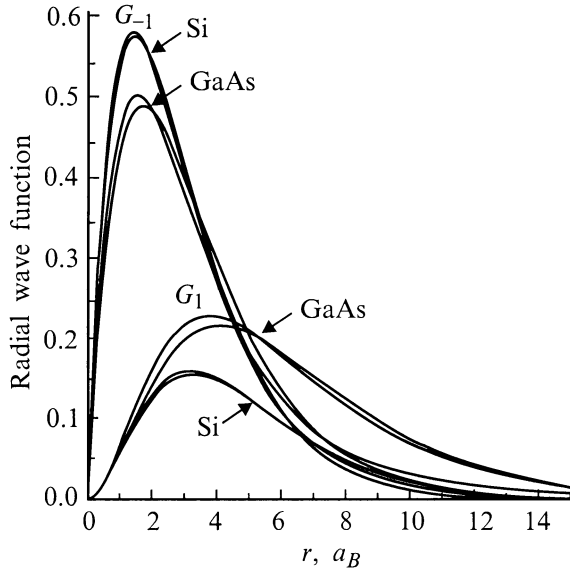


Рис. 2. Радиальные волновые функции для основного состояния акцептора для двух значений отношений масс $\beta = m_l/m_h$ ($\beta = 0.14$ для GaAs и 0.348 для Si [9]). Кривые с большим максимумом соответствуют вариационному решению (разд. 6), с меньшим — приближенному (разд. 4).

Заметим, что при анализе асимптотики следует ориентироваться на медленно спадающую функцию G_1 , для которой, как показывает (25), следует ожидать существенного изменения поведения при больших r .

Для нахождения второй компоненты волновой функции G_1 воспользуемся уравнением (25)

$$\begin{aligned} \left[\Delta_{l+1} + \frac{2\eta k}{r} - k^2 \right] G_1(r) &= -\frac{\alpha_0}{\alpha_1} \hat{R}(r) G_{-1}(r) \\ &= \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \tilde{\lambda} C \left(\frac{d}{dr} - \frac{l+1}{r} \right) r^l e^{-\lambda r}, \\ \eta &= \frac{1}{\alpha_1 k}, \quad k^2 = -E/\alpha_1. \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь по-прежнему G_{-1} выбирается в виде (21), однако вместо нормировочного множителя N_{-1} введен новый (C), так как изменится функция G_1 и, следовательно, общая нормировка.

Разложением в ряд по полиномам Лагерра нетрудно получить решение для функции $\partial/\partial\tilde{\lambda}(G_1/\tilde{\lambda})$, этот ряд суммируется и в результате

$$\begin{aligned} G_1(r) &= \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \tilde{\lambda} C r^{l+2} \int_{\tilde{\lambda}}^{\infty} \frac{\tau d\tau}{(\tau - k)^{l+2-\eta} (\tau + k)^{l+2+\eta}} \\ &\times \int_k^{\tau} (t - k)^{l+1-\eta} (t + k)^{l+1+\eta} e^{-rt} dt, \end{aligned} \quad (32)$$

и на бесконечности функция ведет себя как

$$\begin{aligned} G_1(r) &= \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \tilde{\lambda} C (2k)^{2l+3} \Gamma(l+2-\eta) r^{l+2} e^{-kr} U'(r) \\ &\times \int_{\tilde{\lambda}}^{\infty} \frac{\tau d\tau}{(\tau - k)^{l+2-\eta} (\tau + k)^{l+2+\eta}}, \end{aligned} \quad (33)$$

где $U'(r) = U(l+2-\eta, 2l+4, 2kr)$ — спадающая на бесконечности вырожденная гипергеометрическая функция [19]. При малых m_l , когда η и k аннулируются, соотношение (33) переходит в формулу (23).

Величина η не мала (например, для GaAs $\eta = 0.66$), и ею следует пренебрегать, несмотря на возможность оборвать ряд $U'(r)$, переходя к функциям Бесселя. Реальная волновая функция связана с G_1 множителем r и для основного состояния с учетом главного на бесконечности слагаемого в $U'(r)$ спадает как $r^\eta \exp(-kr)/r$ (ср. с [13,14]). Найденная закономерность слабо меняется при уточнении расчетов (в частности, от способа вычисления G_{-1}). Для параметров GaAs обе компоненты волновой функции основного состояния, рассчитанные по методу этого раздела, а также вариационным методом по формулам разд. 6, приведены на рис. 2.

Радиальные функции G_ν связаны друг с другом через гипергеометрические функции U и M , входящие в фундаментальные решения соответствующих водородных операторов системы (6), и содержат слагаемые с $\ln(r)$ при r , близких к нулю [3], что было отражено и в работе [12], где система уравнений (6) решалась разложением в степенной ряд с учетом этого обстоятельства. Эта особенность исчезает в пределе $m_l \rightarrow 0$, что и дало нам возможность найти решение в виде разложения по полиномам (13).

5. Импульсное представление

Акцептор с нулевой массой легких дырок впервые рассматривался в импульсном представлении для основного состояния в [15], этот подход был принят в большинстве дальнейших работ, где использовалось это приближение. Проведенные в настоящей работе расчеты позволяют легко записать волновые функции в \mathbf{k} -пространстве.

При вычислении интегралов со сферическими функциями важна только их зависимость от l и на этом этапе в угловых частях U_ν можно рассматривать лишь одно слагаемое (например, $Y_{l+\nu,m}$). Волновая функция (1) условно представляется в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=-1,1} Y_{l+\nu,m}(\mathbf{r}/r) G_\nu(r), \quad (34)$$

а ее фурье-образ равен

$$\begin{aligned}\Psi(\mathbf{k}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r})/r d\mathbf{r} \\ &= i^{l+\nu} \frac{1}{\sqrt{k}} \sum_{\nu=-1,1} Y_{l+\nu,m}(\mathbf{k}/k) \\ &\quad \times \int_0^{\infty} J_{l+\nu+1/2}(kr) G_{\nu}(r) r^{1/2} dr. \quad (35)\end{aligned}$$

Здесь использовано разложение плоской волны по сферическим функциям [18], $J_n(r)$ — функции Бесселя. Если воспользоваться соотношением (10), то интегралы в (35) с точностью до постоянного множителя оказываются равными. Согласно (13), радиальная функция G_{-1} может быть записана как

$$G_{-1}(r) = \frac{\gamma_1}{N_0} \sqrt{2\lambda} \frac{(2\lambda r)^l}{(1-t)^{2l}} \exp\left(-\frac{1+t}{1-t} \lambda r\right), \quad (36)$$

если в разложении G_{-1} по t произвести замену $t^n \rightarrow A_n$ (здесь использована производящая функция для полиномов Лаггера [19]). После вычисления интеграла образуется производящая функция для полиномов Гегенбауэра C_n^l [20], в результате

$$\begin{aligned}\Psi^{jm}(\mathbf{k}) &= \left(\gamma_1 U_{-1}^{jm}(\mathbf{k}/k) - \gamma_{-1} U_1^{jm}(\mathbf{k}/k)\right) F(k), \\ F(k) &= \frac{(4q)^{l-1} (l-1)!}{N_0 \lambda \sqrt{\pi \lambda}} \frac{8}{(1+q^2)^{l+1}} \\ &\quad \times \sum_{n=\mu}^{\infty} (n+1) C_n^l \left(\frac{q^2-1}{q^2+1}\right) A_n, \quad (37)\end{aligned}$$

где $q = k/\lambda$.

Для серии с основным состоянием ($J = 3/2$, $l = 1$, $\Delta = \infty$)

$$\Psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{(\mathbf{J}\mathbf{k})^2}{k^2} - \frac{1}{4}\right) F(k). \quad (38)$$

Угловая зависимость для этой серии совпадает с найденной в работе [15].

Ближе всего к результатам разд. 2, но в импульсном пространстве, подходит работа [21], где полученное уравнение является аналогом уравнения (8). В этой работе приближенно найдены уровни энергии и волновые функции первых четырех состояний для $j = 3/2$ (по два для $l = 1$ и $l = 2$, $\Delta = \infty$), однако использованный метод решения не позволил исследовать весь спектр.

6. Сравнение с вариационным методом

Основной недостаток вариационных методов — пониженная точность вычисления собственных функций по сравнению с собственными значениями. Однако в случае

с $m_l = 0$ мы убедились, что точные и вариационные вычисления по методам работы [8] обеих компонент G_1 и G_{-1} практически совпадают. В работе [8] рассчитывался гамильтониан Кейна; в принятом здесь приближении Латтинжера аналогичные вычисления могут быть проведены, если воспользоваться тем же, что и в [8] разложением $G_i(r)$ по полиномам Лагерра с дополнительным множителем r (как было указано в начале разд. 1)

$$G_i(r) = \sqrt{2\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^i F_n(2\lambda r),$$

$$F_n(x) = \sqrt{\frac{n!}{(n+2\nu)!}} x^\nu \exp(-x/2) L_n^{2\nu}(x), \quad \nu \leq l. \quad (39)$$

Такой выбор базисных функций с $\nu \neq l$ удобен при вычислении матричных элементов оптических переходов между сериями с разными l [22]. Матричные элементы входящих в функционал (4) операторов на ортонормированных функциях $F_n(x)$ равны

$$\begin{aligned}\left\langle n \left| \frac{1}{x} \right| m \right\rangle &= \frac{1}{2\nu}, \\ \left\langle n \left| \frac{1}{x^2} \right| m \right\rangle &= \frac{1}{2\nu} \left(\frac{n+1}{2\nu-1} - \frac{m}{2\nu+1} \right), \\ \left\langle n \left| \frac{1}{x} \frac{d}{dx} + \frac{d}{dx} \frac{1}{x} \right| m \right\rangle &= \frac{n-m}{2\nu}, \\ \left\langle n \left| \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\nu^2}{x^2} \right| m \right\rangle &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} \delta_{nm} + n - m \right). \quad (40)\end{aligned}$$

Эти формулы справедливы при $n \geq m$, и их правые части должны быть умножены на

$$h_{nm} = \sqrt{\frac{n!(m+2\nu)!}{m!(n+2\nu)!}}. \quad (41)$$

Числовая матрица для гамильтониана полностью повторяет структуру уравнений (6) с заменой операторов на соответствующие матрицы, согласно предыдущим соотношениям. Диагонализация по параметрам a_n^i проводится стандартным образом, а при вариации по λ можно и для возбужденных состояний серии с полным моментом j ориентироваться на самое нижнее состояние этой серии [8].

Как уже говорилось, в случае $m_l = 0$ волновые функции, посчитанные этим вариационным методом, и точные практически совпадают. Чтобы проверить качество этих функций и при $m_l \neq 0$, мы восстановили функцию $\tilde{G}_1(r)$ по посчитанной вариационной функции $G_{-1}(r)$, согласно второму уравнению системы (6) через фундаментальные решения водородного множителя возле $G_1(r)$. Функции $\tilde{G}_1(r)$ и $G_1(r)$ хорошо совпадают при $r < 15$, их отличие проявляется в третьем знаке. Аналогично рассчитанная через $\tilde{G}_1(r)$ функция $\tilde{G}_{-1}(r)$ совпадает примерно с этой же точностью с вариационной функцией $G_{-1}(r)$.

Работа выполнена при поддержке Международного Научного Фонда.

Приложение

Обратный оператор $D(\alpha)$ мы определим по решению уравнения

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r}\right)F(r) = f(r) \quad (\text{П.1})$$

как

$$f(r) = D(\alpha)f(r) \equiv r^{-\alpha} \int_c^r x^\alpha f(x) dx, \quad (\text{П.2})$$

$(c = 0, \alpha > 0 \text{ и } c = \infty, \alpha \leq 0).$

Функции F и f должны нужным образом вести себя в нуле и на бесконечности, подобно поведению собственных функций для связанных состояний. Из этого условия и выбран нижний предел интегрирования c .

Из перестановочного соотношения

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\beta}{r}\right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r}\right) = \left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha+1}{r}\right) \left(\frac{d}{dr} + \frac{\beta-1}{r}\right) \quad (\text{П.3})$$

формально получается

$$D(\alpha)D(\beta) = D(\beta-1)D(\alpha+1). \quad (\text{П.4})$$

Это равенство может быть проверено решением уравнения, подобного (П.1), но уже с двумя операторами. Аналогично устанавливаются остальные соотношения

$$D(\alpha)\frac{1}{r} = \frac{1}{r}D(\alpha-1), \quad D(\alpha)r = rD(\alpha+1),$$

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha}{r}\right)D(\beta) = D(\beta+1)\left(\frac{d}{dr} + \frac{\alpha+1}{r}\right),$$

$$D(\alpha)D(\beta) = \frac{1}{\beta-\alpha-1}[D(\alpha)r - rD(\beta)]. \quad (\text{П.5})$$

Список литературы

- [1] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- [2] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [3] D. Shechter. J. Phys. Chem. Solids **23**, 237 (1962).
- [4] K.S. Mendelson, H.M. James. J. Phys. Chem. Solids **25**, 729 (1964).
- [5] C. Kittel, A.H. Mitchell. Phys. Rev. **96**, 1488 (1954).
- [6] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [7] Л.В. Келдыш. ЖЭТФ **45**, 364 (1963).
- [8] В.И. Шека, Д.И. Шека. ЖЭТФ **51**, 1445 (1966).
- [9] A. Baldereschi, N.O. Lipari. Phys. Rev. **B8**, 2697 (1973).
- [10] A. Baldereschi, N.O. Lipari. Phys. Rev. **B9**, 1525 (1974).
- [11] И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП **28**, 321 (1994).
- [12] Ш.М. Коган, А.Ф. Полупанов. ЖЭТФ **80**, 394 (1981).
- [13] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. ФТП **5**, 2191 (1971).
- [14] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. ЖЭТФ **62**, 713 (1972).
- [15] Б.Л. Гельмонт, В.И. Иванов-Омский, И.М. Цидильковский. УФН **120**, 337 (1976).
- [16] Ю.Ф. Берковская, Б.Л. Гельмонт, Э.И. Цидильковский. ФТП **22**, 855 (1988).
- [17] Б.Л. Гельмонт, А.В. Родина. ФТП **25**, 2189 (1991).

- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Наука, М. (1989).
- [19] Nandbook of Mathematical Functions / Ed. by M. Abramowitz, I.A. Stegun. National Bureau of standards Applied mathematics series (1964) [Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. Наука, М. (1979).]
- [20] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. ГИФМЛ, М. (1962).
- [21] Y.T. Rebane. Phys. Rev. **B48**, 11 772 (1993).
- [22] В.И. Шека, Д.И. Шека. УФЖ **14**, 720 (1969).
- [23] А.В. Малышев, И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП **40**, 1002 (1998).