

# Многодолинное расщепление энергетического спектра мелкого донора в полупроводниках со структурой типа алмаза и сфалерита

© С.М. Зубкова, В.А. Изюмов, Л.Н. Русина<sup>¶</sup>, Е.В. Смелянская\*

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича Национальной академии наук Украины, 252680 Киев, Украина

\* Национальный технический университет "Киевский политехнический институт", 252056 Киев, Украина

(Получена 27 апреля 1999 г. Принята к печати 13 ноября 1999 г.)

Последовательное применение теории возмущений к решению уравнения Шредингера, описывающего состояние мелкого донора в многодолинных полупроводниках, позволило получить секулярное уравнение, порядок которого равен числу долин. Решение этого уравнения дает как характер, так и величины расщепления основного состояния донорного центра. Матричные элементы междолинного взаимодействия, входящие в секулярный детерминант, строились в представлении псевдофункций Блоха. Псевдоволновые функции вычислялись как собственные векторы системы уравнений метода эмпирического псевдопотенциала (65 плоских волн). Матричные элементы на псевдофункциях Блоха оказались существенно отличными от точечных на плоских волнах. Возмущающий потенциал примесного центра аппроксимировался как точечный экранированный кулоновский потенциал. Численные расчеты проиллюстрированы на примере мелких изоэлектронных доноров группы в Ge и Si. Наши результаты очень хорошо согласуются с экспериментальными данными для наинизшего уровня  $A_1$  (1) и отличаются на 14–15% для уровней  $T_1$  (3) и  $E$  (2).

## 1. Введение

Проблема энергетического спектра мелкого донора V группы в полупроводниках типа алмаза и сфалерита исследуется не менее 40 лет. Но, несмотря на множество фундаментальных исследований, интерес к ней в мировой литературе существует. Это связано с различными путями обобщения уравнений метода эффективной массы (МЭМ) для многодолинных полупроводников, расхождениями в оценках вклада междолинных членов в энергию связи донорного центра и способах их учета, в выборе потенциала и волновой функции донорного центра. Кроме того, интерес к проблеме возрос в связи с повсеместным вхождением в практику численных псевдопотенциальных расчетов и возможностью корректно конструировать кристаллический и примесный псевдопотенциалы.

Развитое Коном и Латтинджером приближение МЭМ [1–2] в течение многих лет использовалось для описания мелких примесных состояний в полупроводниках. Уравнение Шредингера для донорного электрона в Si сводилось к шести независимым уравнениям для каждой долины в отдельности и давало шестикратно вырожденный уровень энергии основного состояния донорного центра. Через 10 лет опыты по инфракрасному поглощению [3] показали, что вырождение частично снимается и шестикратно вырожденный уровень расщепляется на уровни  $A_1$  (1),  $E$  (2) и  $T_1$  (3).

В работе [4] впервые последовательно развито приближение МЭМ, учитывающее многодолинность. Модельный потенциал примеси с двумя подгоночными параметрами  $V_{\text{imp}}$  стремится к постоянной величине при  $r \rightarrow 0$  и становится кулоновским при  $r \rightarrow \infty$ . Энергии основного состояния вычислялись вариационным методом.

В работе [5] для расчета мелкого донора в Si впервые был использован модельный примесный псевдопотенциал без подгоночных параметров (*ab initio*). В работах [6–8] построена теория псевдопримеси, учитывающая междолинное смешивание и применимая для расчета как мелких, так и глубоких уровней доноров замещения и внедрения в полупроводниках типа Si и в GaP. В работе [9] выведено обобщенное уравнение МЭМ с перенормированным видом потенциала внешнего поля. Перенормировка обусловлена интерференцией блоховских функций из разных долин. Уравнение решено численно с модельным потенциалом примеси для доноров в Si и с использованием псевдопотенциальных функций Блоха. Результаты очень чувствительны к поведению потенциала на малых расстояниях и обладают нестабильностью типа мелкая–глубокая примесь. Модельный учет пространственной дисперсии приводит к появлению глубокого уровня основного состояния донора, что качественно согласуется с экспериментальными данными для примесей водорода и муония. В работе [10] приближение эффективной массы для донорного центра в GaAs обобщается на случай учета междолинного взаимодействия. В уравнении Шредингера фигурирует перенормированный кулоновский потенциал, в котором перенормировочный множитель существенно отличен от 1 внутри сферы малого радиуса  $r_0$  вокруг примесного иона. Решение дает положение основного состояния примесного центра, соответствующее точкам  $\Gamma$ ,  $X$  и  $L$  зоны Бриллюэна. Для  $L$ -долины донорный уровень оказался глубоким благодаря междолинному взаимодействию. В работах [11,12] из спектров инфракрасного поглощения азота в 4H-SiC и 6H-SiC найдены величины долинно-орбитального расщепления донора N в гексагональных позициях ( $h$ ): 7.6 и 12.6 мэВ для 4H-SiC и 6H-SiC соответственно.

<sup>¶</sup> Факс: (380 44) 4442078

E-mail: ludm@rus.semicond.kiev.ua

Наша работа посвящена теоретическому исследованию и численному расчету энергетического спектра мелкого донора в полупроводниках типа алмаза с учетом реальной зонной структуры этих кристаллов. Аналогично [13], где рассматривалось многодолинное расщепление экситонов Ваннье–Мотта в кубических полупроводниках, матричные элементы междолинного взаимодействия (смешивания) будем рассматривать по теории возмущений [10], а волновую функцию электрона примесного центра выбираем в виде линейной комбинации псевдопотенциальных функций Блоха, являющихся собственными векторами системы уравнений метода эмпирического псевдопотенциала при различных  $\mathbf{k}_i$ ,  $i = 1, \dots, p$ , где  $p$  — число эквивалентных минимумов энергии.

## 2. Вывод секулярного уравнения для нахождения поправок к энергии основного состояния мелкого донора

Запишем уравнение Шредингера для идеального кристалла:

$$H^0 \Psi_{nk}^0(\mathbf{r}) = E_n^0(\mathbf{k}) \Psi_{nk}^0(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $n$  — номер энергетической зоны,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор,

$$\Psi_{nk}^0(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{v}) U_{nk}^0(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2)$$

— функции Блоха, являющиеся полной ортонормированной системой волновых функций идеального кристалла.

Для кристалла с примесью уравнение Шредингера имеет вид

$$[H^0 + V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $V(\mathbf{r})$  — возмущающий потенциал примесного центра. Запишем волновую функцию примесного электрона в представлении Блоха:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \sum_{\mathbf{k}} B_n(\mathbf{k}) \psi_{nk}^0(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Для мелких доноров в разложении (4) можно ограничиться только наинизшей зоной проводимости. Тогда (3) переписывается в виде

$$[E_C^0(\mathbf{k}) - E] B_C(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} B_C(\mathbf{k}') = 0, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= \int (\psi_{\mathbf{k}'}^0)^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) d\tau \\ &= \frac{1}{v} \int (U_{C\mathbf{k}'}^0)^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) U_{C\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d\tau, \end{aligned} \quad (5')$$

$U_{C\mathbf{k}}^0(\mathbf{r})$  — периодическая часть функции Блоха.

Применим к решению системы (5)–(5') метод теории возмущений, считая матричные элементы  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  величинами нулевого порядка малости, если  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  близки к одному и тому же минимуму  $\mathbf{k}_i$ , и величинами 1-го порядка малости, если вектор  $\mathbf{k}$  близок к  $\mathbf{k}_i$ -му, а  $\mathbf{k}'$  — к  $\mathbf{k}_j$ -минимуму. Разложим  $E_C^0(\mathbf{k})$  в ряд до членов, квадратичных по  $(\mathbf{k} - \mathbf{k}_i)$  вблизи минимума  $E(\mathbf{k}_i)$ :

$$E_C^0(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_i) + \sum_{\alpha,\beta} (1/2m_{\alpha,\beta}^i)(k_\alpha - k_{i\alpha})(k_\beta - k_{i\beta}), \quad (6)$$

где  $\alpha, \beta = x, y, z$ ,  $1/m_{\alpha,\beta}^i$  — тензор обратной приведенной эффективной массы для  $i$ -го минимума. Тогда система (5) в нулевом приближении распадается на несколько независимых систем по числу минимумов  $k$ :

$$\begin{aligned} \left[ E(\mathbf{k}_i) + \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{2m_{\alpha,\beta}^i} (k_\alpha - k_{i\alpha})(k_\beta - k_{i\beta}) \right] B^0(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0, \\ \mathbf{k} \approx \mathbf{k}' \approx \mathbf{k}_i, \\ B^0(\mathbf{k}') = E_{\text{imp}}^0 B^0(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (7)$$

Решение этих уравнений даст систему коэффициентов  $B_i(\mathbf{k})$ , быстро убывающих с удалением  $\mathbf{k}$  от  $\mathbf{k}_i$ . Тогда для решения системы уравнений первого приближения возьмем в качестве нулевого приближения линейную комбинацию:

$$B^0(\mathbf{k}) = \sum_j C_j B_j^0(\mathbf{k}). \quad (8)$$

Уравнения первого приближения для  $\mathbf{k}_i$ -минимума примут вид

$$\begin{aligned} \left[ E(\mathbf{k}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{2m_{\alpha,\beta}^i} (k_\alpha - k_{i\alpha})(k_\beta - k_{i\beta}) \right] B^1(\mathbf{k}) \\ + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^0, \mathbf{k} \approx \mathbf{k}' \approx \mathbf{k}_i B^1(\mathbf{k}') - E_{\text{imp}}^0 B^1(\mathbf{k}) \\ = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^1, \mathbf{k} \approx \mathbf{k}_i, \mathbf{k}' \approx \mathbf{k}_j B^0(\mathbf{k}') + E^1 B^0(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (9)$$

Из условия разрешимости (9) — ортогональности правой части к любому решению  $B_i^0(\mathbf{k}')$  левой части — имеем

$$E^1 C_i \sum_{\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_i} |B_i^0(\mathbf{k})|^2 - \sum_{j \neq i} \sum_{\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_i} \sum_{\mathbf{k}' \approx \mathbf{k}_j} C_j B_i^{*0}(\mathbf{k}) V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^1 B_j^0(\mathbf{k}') = 0. \quad (10)$$

При этом

$$\sum_j^p B_j^0(\mathbf{k}) B_i^0(\mathbf{k}) = \delta_{j,i},$$

$p$  — число эквивалентных минимумов энергии. После введения сглаженной функции

$$\varphi_i^0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_i} B_i^0(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (11)$$

система линейных однородных алгебраических уравнений относительно  $C_i$  примет вид

$$\frac{1}{v} C_i E^1 - \sum_{j \neq i}^p C_j \varphi_i^*(0) V_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j}^1 \varphi_j(0) = 0. \quad (12)$$

Из условия разрешимости системы (12) получаем уравнение  $p$ -й степени относительно поправки к энергии связи примесного центра:

$$\left| \frac{1}{v} E^1 \delta_{ij} - \sum_{j \neq i}^p \varphi_i^*(0) V_{ij}^1 \varphi_j(0) \right| = 0. \quad (13)$$

Таким образом, вырождение основного состояния донорного уровня, связанное с учетом многодолинного смешивания, по крайней мере частично снимается и энергетический уровень расщепляется в общем случае на  $p$  уровней по числу эквивалентных минимумов.

### 3. Получение матричных элементов междолинного смешивания

Из соотношения (5') следует, что

$$V'_{ij} \equiv V'_{\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j}(\mathbf{r}) = \frac{1}{v} \int (U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_j}^0)^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_i}^0(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)\mathbf{r}} d\tau. \quad (14)$$

Возмущающий потенциал в случае мелкого донора запишем:

$$V(r) = -1/\varepsilon_0 \tau, \quad (15)$$

где  $\varepsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость.

Воспользуемся известным разложением произведения периодических частей функций Блоха в ряд по плоским волнам с волновыми векторами, равными векторам обратной решетки  $\mathbf{G}$ :

$$(U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_i}^0)^*(\mathbf{r}) U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_j}^0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} b_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (16)$$

где функции

$$(U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_i}^0)^*(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} a_{\mathbf{g}}^c(\mathbf{k}_i) e^{-i\mathbf{g}\mathbf{r}},$$

$$U_{\mathbf{c}\mathbf{k}_j}^0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}'} a_{\mathbf{g}'}^c(\mathbf{k}_j) e^{-i\mathbf{g}'\mathbf{r}} \quad (17)$$

будем находить как собственные векторы системы уравнений метода эмпирического псевдопотенциала. Из (16)–(17) имеем

$$b_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j) = \sum_{\mathbf{g}} (a_{\mathbf{g}}^c)^*(\mathbf{k}_i) a_{\mathbf{g}+\mathbf{G}}^c(\mathbf{k}_j). \quad (18)$$

После подстановки (15)–(18) в (14) и ряда преобразований получим

$$V'_{ij} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 v} \sum_{\mathbf{G}} \frac{b_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)}{|\mathbf{G} + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i|^2} = -\frac{4\pi e^2}{\varepsilon v} \sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{g}} \frac{(a_{\mathbf{g}}^c)^*(\mathbf{k}_i) a_{\mathbf{g}+\mathbf{G}}^c(\mathbf{k}_j)}{|\mathbf{G} + \mathbf{k}_j - \mathbf{k}_i|^2}. \quad (19)$$

### 4. Нахождение энергии основного состояния и сглаженной волновой функции примесного центра в однодолинном приближении

Для нахождения величин  $\varphi_i^0(\mathbf{r})$  (11) и  $E_{\text{imp}}^0$  (7) для примесного центра воспользуемся уравнением метода эффективной массы, которое в безразмерных переменных имеет вид

$$\left[ -\frac{m_0}{2m_{1,2}^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{m_0}{2m_3^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\varepsilon_0 \rho} \right] \varphi_0(\rho) = \varepsilon \varphi_0(\rho),$$

$$\rho = r m_0 e^2 / \hbar^2, \quad \varepsilon = E \hbar^2 / m_0 e^4. \quad (20)$$

Здесь  $m_{1,2}^*$  и  $m_3^*$  — поперечные и продольная эффективные массы эллипсоида постоянной энергии электрона у дна наинижней зоны проводимости. Для решения (20) применим прямой вариационный метод. Пробную функцию выбираем в виде

$$\varphi_i^0(\rho) = A \exp \left( -\sqrt{\alpha(x^2 + y^2) + \beta z^2} \right),$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — вариационные параметры,  $A^2 = \alpha \sqrt{\beta} / \pi$  — нормировочный коэффициент.

Из вариационной процедуры получаем следующую систему уравнений для нахождения вариационных параметров:

$$\begin{cases} \frac{x}{3m_{1,2}^*} + \frac{1}{6m_3^*} - \frac{1}{2\varepsilon_0} \sqrt{\frac{x}{(1-x)\beta}} \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{1-x}{x}} = 0, \\ \frac{\sqrt{\beta}}{3m_{1,2}^*} + \frac{1}{2\varepsilon_0(1-x)} - \frac{1}{2\varepsilon_0} \sqrt{\frac{1}{x(1-x)^3}} \operatorname{arctg} \sqrt{\frac{1-x}{x}} = 0, \end{cases} \quad (21)$$

где  $x = \alpha/\beta$  ( $\alpha < \beta$ ). Случай  $\alpha > \beta$  приводит к значению, соответствующему возбужденному уровню энергии примесного центра, лежащего в зоне проводимости.

### 5. Иллюстрация численных расчетов для Ge и Si

Проведенные в этом разделе расчеты позволили получить качественную и количественную информацию о характере расщепления, относительном расположении и

**Таблица 1.** Вариационные параметры ( $\alpha, \beta$ ), квадрат нормировочного коэффициента ( $A^2$ ) и энергия связи примеси  $E_{\text{имп}}^0$

Полупроводник	$X$	$\beta, 10^{-4} a_B^2$	$\alpha, 10^{-5} a_B^2$	$A^2, 10^{-7} a_B^3$	$E_{\text{имп}}^0, \text{мэВ}$
Ge	0.126	5.82	7.36	5.65	-12.33
Si	0.330	15.06	49.61	61.31	-41.21

**Таблица 2.** Энергии связи в мэВ компонент основного состояния доноров V группы в Si и Ge

Источник данных	Si			Ge	
	$A_1$	$T_1$	$E$	$A_1$	$T_1$
Настоящая работа	45.5	39.5	37.4	14.3	11.7
Baldereschi [14]	40.5	29.5	28.8	10.1	9.5
Ning, Sah [4]	45.5	33.7	32.4		
Altarelli, Hsu et al. [16]	47.5	31.4	30.6	12.5	9.7
Экспериментальные результаты [3]	45.3	33.7	32.3	14.2	10.0

**Таблица 3.** Сравнение матричных элементов  $V'_{ij}$

Полупроводник	Приближение плоских волн	Приближение функций Блоха
Ge	1.44	1.47
Si	1.85, 0.924	2.27, 1.31

величине уровней энергии основного состояния мелкого донора V группы (P, N, As) в Si и Ge. Численное решение системы (21) для Ge и Si дало результаты, помещенные в табл. 1.

Вычисление матричных элементов примесного потенциала  $V'_{ij}$  (19) свелось к нахождению собственных векторов  $a_{\mathbf{g}}^c(\mathbf{k}_i)$  и  $a_{\mathbf{g}+\mathbf{G}}^c(\mathbf{k}_j)$  для системы уравнений в методе эмпирического псевдопотенциала (65 плоских волн) — в точках эквивалентных наинизших минимумов энергии в зоне проводимости, и последующему двойному суммированию по векторам обратной решетки. В Ge имеется 4 таких минимума в точках  $\mathbf{k}_i = \frac{\pi}{a}(\bar{1}\bar{1}\bar{1}, \bar{1}11, 1\bar{1}\bar{1}, 11\bar{1})$ , в Si — 6 минимумов в точках  $\mathbf{k}_i = 0.85\frac{\pi}{a}(100, 010, 001, \bar{1}00, 0\bar{1}0, 00\bar{1})$ . Значения форм-факторов псевдопотенциала для этих кристаллов брались из работы [15].

Решение секулярного уравнения (12) для определения поправки  $E'$  привело к частичному снятию вырождения примесного уровня. Так, в случае Ge получаем

$$E'_1 = -1.97 \text{ мэВ}, \quad E'_{2,3,4} = 0.66 \text{ мэВ}.$$

В случае Si имеем

$$E'_1 = -4.30 \text{ мэВ}, \quad E'_{2,3,4} = 1.73 \text{ мэВ}, \quad E'_{5,6} = 3.83 \text{ мэВ}.$$

В табл. 2 приведены полученные нами энергии связи уровней основного состояния изохорического донора V группы в Si и Ge, теоретические результаты из [4,14,16] и экспериментальные данные [3]. Из табл. 2 видно, что наинизший уровень  $A_1$  в Si и Ge очень хорошо согласуется с экспериментальными результатами. Величины уровней  $T_1$  и  $E$  на 14–15% отличаются от имеющихся опытных данных.

По данным [14], экспериментальные значения энергии расщепления  $\Delta = E(T_1) - E(A_1)$  в Ge равны 2.83, 4.23 и 0.32 мэВ для примесей P, As и Sb соответственно. В Si экспериментальные величины расщепления  $\Delta_1 = E(A_1) - E(T_1)$  равны 11.85, 21.15 и 9.94 мэВ и  $\Delta_2 = E(T_1) - E(E)$  равны 1.35, 1.42 и 2.50 мэВ для примесей P, As и Sb соответственно.

## 6. Обсуждение результатов

Вопрос о применимости псевдопотенциальных функций Блоха и использовании их для расчета междолинного взаимодействия обсуждался, например, в [16,17]. Наши значения фактора  $b_{\mathbf{G}} = (\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$ , вычисленные при  $\mathbf{G} = 0$  в Si для случаев, когда минимумы зоны проводимости расположены на одной и той же оси ( $\mathbf{k}_i = -\mathbf{k}_j$ ), составляют  $b = 0.17$ , и на взаимно перпендикулярных осях —  $b = -0.44$  (65 плоских волн). Они хорошо согласуются с данным из работы [17], соответственно:  $b = 0.18$  и  $b = 0.41$  (59 плоских волн). Послойные вклады в  $b_{\mathbf{G}}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j)$  при суммировании по  $\mathbf{g}$  в (18) оказались существенно отличными от единицы и хорошо согласуются с данными [16] для Si и Ge.

Как и следовало ожидать, матричные элементы междолинного взаимодействия  $V'_{ij}$  (19), вычисленные на псевдопотенциальных функциях Блоха, которые более приспособлены к описанию реальных кристаллов, чем единичная плоская волна, существенно отличаются от матричных элементов на плоских волнах. В последнем случае  $V'_{ij} \propto 1/|\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|^2$  (см. табл. 3).

## 7. Заключение

Анализ зависимости величин матричных элементов междолинного взаимодействия  $V'_{ij}$  от порядка системы уравнений в методе электронных плоских волн (ЭПП) и количества векторов обратной решетки  $\mathbf{G}$  в разложении (16) показал, что дальнейшего уточнения результатов расчета и улучшения согласования с экспериментальными результатами при данном выборе примесного потенциала можно достичь путем увеличения числа плоских волн в методе ЭПП и числа векторов обратной решетки в разложении произведения периодических частей функций Блоха.

## Список литературы

- [1] W. Kohn, J.M. Luttinger. В сб.: *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.А. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957) с. 551.
- [2] J.M. Luttinger, W. Kohn. В сб.: *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.А. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957) с. 515.
- [3] R.L. Aggarwal, A.K. Ramdas. Phys. Rev., **140**, A1246 (1965); J.H. Reuszer, P. Fisher. Phys. Rev., **135**, A1125 (1964).
- [4] T.H. Ning, C.T. Sah. Phys. Rev. B, **4**, 3468 (1971).
- [5] S.T. Pantelides, C.T. Sah. Sol. St. Commun., **11**, 1713 (1972).
- [6] S.T. Pantelides, C.T. Sah. Phys. Rev. B, **10**, 621 (1974).
- [7] S.T. Pantelides. Sol. St. Commun., **14**, 1255 (1974).
- [8] S.T. Pantelides. Sol. St. Commun., **30**, 65 (1979).
- [9] L. Resca, R. Resta. Sol. St. Commun., **29**, 275 (1979).
- [10] J.C. Bourgoin, A. Mauger. Appl. Phys. Lett., **53**, 749 (1988).
- [11] W. Suttrop, W.J. Choyke, W. Gotz, A. Schoner, G. Pensi, R. Stein, S. Leibenzeder. J. Appl. Phys., **73**, 3332 (1993).
- [12] W. Suttrop, G. Pensi, W.J. Choyke, R. Stein, S. Leibenzeder. J. Appl. Phys., **72**, 3708 (1992).
- [13] С.М. Зубкова, Л.Н. Русина, К.Б. Толпыго. ФТП, **21**, 1429 (1987).
- [14] A. Baldereschi. Phys. Rev. B, **1**, 4673 (1970).
- [15] M.L. Cohen, T.K. Bergstresser. Phys. Rev., **141**, 789 (1966).
- [16] M. Altarelli, W.Y. Hsu, R.A. Sabatini. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **10**, L605 (1977).
- [17] R. Resta. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **10**, L179 (1977).

Редактор Т.А. Полянская

## A many-valley splitting of shallow donor binding energy in semiconductors with diamond and sphalerite type structures

S.M. Zubkova, V.A. Izjumov, L.N. Rusina,  
E.V. Smelyansky\*

Institute of Material Science Problems,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
252680 Kyiv, Ukraine

\* National Technical University,  
252056 Kyiv, Ukraine

**Abstract** A successive application of the perturbation theory to solving the Schrödinger's equation that describes the shallow-donor state in many-valley semiconductors has allowed us to obtain a secular equation its order being equal a valleys' number. Intervalley interaction matrix elements entering the secular determinant have been constructed in the Bloch pseudofunction representation. The pseudowave functions have been computed from the local empirical form factors and a basis set of 65 plane waves. These matrix elements differ considerably from those constructed in the plane wave approximation. The impurity centre perturbing potential was approximated as a point screened Coulomb potential. The numerical calculations have been illustrated by examples of the shallow isochoric donors of V group in Ge and Si. Our results are in excellent agreement with experimental data for the lowest level  $A_1$  (1) and have 14–15% discrepancy for levels  $T_1$  (3) and  $E$  (2).