

УДК 621.315.592

Расчет резонансных состояний кулоновских акцепторов в бесщелевых полупроводниках

© М.С. Жолудев^{1,2}, В.В. Румянцев^{1,2}, С.В. Морозов^{1,2}

¹ Институт физики микроструктур Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, Россия

² Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

E-mail: zholudev@ipmras

Поступила в Редакцию 22 декабря 2020 г.

В окончательной редакции 30 декабря 2020 г.

Принята к публикации 30 декабря 2020 г.

Проведены расчеты волновых функций электрона в зоне проводимости бесщелевого полупроводника вблизи кулоновского акцептора. Использовалась модель Латтинжера в приближении сферической симметрии. Получена зависимость энергии резонансных состояний акцептора от отношения масс электронов и дырок.

Ключевые слова: бесщелевой полупроводник, примесь, резонансные состояния, матрица рассеяния.

DOI: 10.21883/FTP.2021.05.50825.9582

1. Введение

В последнее время все большую актуальность приобретает изучение примесных состояний в узкозонных полупроводниковых структурах, таких как объемные пленки и квантовые ямы на основе $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ (кадмий–ртуть–теллур, КРТ). Помимо фундаментального интереса к таким системам, этому способствуют значительные успехи в получении длинноволнового стимулированного излучения в узкозонных гетероструктурах с квантовыми ямами $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}/\text{Cd}_y\text{Hg}_{1-y}\text{Te}$ [1]. Последнее обстоятельство делает весьма актуальными задачи создания p - n -перехода и изучения влияния примесей на процессы безызлучательной рекомбинации в образцах такого типа.

Предыдущие работы, посвященные расчету характеристик дискретных и резонансных примесных уровней [2–6], позволили существенно продвинуться в понимании природы примесно-дефектных центров в КРТ. Было показано, что большинство экспериментально наблюдаемых линий в спектрах фотопроводимости и фотолюминесценции могут быть объяснены влиянием вакансий ртути, представляющих собой двухвалентные акцепторы. Однако влиянию таких центров на непрерывный спектр (в том числе их резонансным состояниям) на данный момент уделяется мало внимания.

В работе [6] был впервые представлен расчет волновых функций и энергий резонансных состояний кулоновского акцептора в бесщелевом соединении HgCdTe . Однако предложенный там подход имеет ограниченную область применимости из-за того, что используемые численные методы не являются устойчивыми в случае многозонных моделей. В данной работе мы предлагаем другой подход, основанный на устойчивом методе матрицы рассеяния [7]. Возможности нового метода

расчета будут показаны на примере двухзонной модели бесщелевых полупроводников [8].

2. Метод расчета

При расчетах мы будем использовать модель Латтинжера в приближении сферической симметрии [8]. В рамках данной модели состояние электрона описывается тремя квантовыми числами: модулем полного углового момента (J), его проекцией на ось z (M) и орбитальным моментом $L = J \pm 1/2$. Волновая функция электрона в таком состоянии есть [6,8,9]

$$\Psi_L^{(J,M)}(\mathbf{r}) = f_{L+1}^{(J)}(r)\Phi_{L+1,3/2}^{(J,M)}(\mathbf{r}) + f_{L-1}^{(J)}(r)\Phi_{L-1,3/2}^{(J,M)}(\mathbf{r}),$$

где $\Phi_{L,3/2}^{(J,M)}$ — собственные функции полного углового момента, составленные из сферических функций $Y_{L,m}(\theta, \varphi)$ и элементов базиса Кона–Латтинжера $u_{3/2,v}(\mathbf{r})$ с собственным моментом $3/2$:

$$\Phi_{L,3/2}^{(J,M)}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-L}^L \sum_{v=-3/2}^{3/2} C_{L,m,3/2,v}^{J,M} Y_{L,m}(\theta, \varphi) u_{3/2,v}(\mathbf{r}),$$

$C_{L,m,3/2,v}^{J,M}$ — коэффициенты Клебша–Гордона [10].

Таким образом, волновая функция электрона однозначно определяется парой функций $f_{L+1}^{(J)}(r)$ и $f_{L-1}^{(J)}(r)$, которые зависят только от расстояния до примесного центра, т. е. решение можно записать в виде вектора

$$\mathbf{f}_L^{(J)}(r) = \begin{pmatrix} f_{L+1}^{(J)}(r) \\ f_{L-1}^{(J)}(r) \end{pmatrix}. \quad (1)$$

В зависимости от минимального значения орбитального момента в формуле (1) состояния акцептора делятся на уровни S -типа, P -типа и т. д. [8].

Стационарное уравнение Шредингера для такого вектора имеет следующий вид:

$$[\hat{H}_0^{(J,L)} + V(r)]\mathbf{f}_L^{(J)} = E\mathbf{f}_L^{(J)}. \quad (2)$$

Гамильтониан однородного полупроводника в сферически симметричной модели Латтинжера [6,8,9] равен

$$\hat{H}_0^{(J,L)} = \begin{pmatrix} \mu_+^{(J,L)} \hat{K}_-^{(L+2)} \hat{K}_+^{(L+1)} & \mu_2^{(J,L)} \hat{K}_+^{(L)} \hat{K}_+^{(L-1)} \\ \mu_2^{(J,L)} \hat{K}_-^{(L)} \hat{K}_-^{(L+1)} & \mu_-^{(J,L)} \hat{K}_-^{(L)} \hat{K}_+^{(L-1)} \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} \hat{K}_+^{(L)} &= -i \left(\frac{d}{dr} - \frac{L}{r} \right), \\ \hat{K}_-^{(L)} &= i \left(\frac{d}{dr} + \frac{L+1}{r} \right), \\ \mu_+^{(J,L)} &= 1 + \mu w^{(J,L)}, \\ \mu_-^{(J,L)} &= 1 - \mu w^{(J,L)}, \\ \mu_2^{(J,L)} &= \mu w_2^{(J,L)}, \\ w^{(J,J-1/2)} &= -\frac{2J-3}{4J}, \\ w^{(J,J+1/2)} &= \frac{2J+5}{4(J+1)}, \\ w_2^{(J,J-1/2)} &= \frac{\sqrt{3(2J-1)(2J+3)}}{4J}, \\ w_2^{(J,J+1/2)} &= \frac{\sqrt{3(2J-1)(2J+3)}}{4(J+1)}. \end{aligned}$$

Здесь в качестве единиц измерения длины и энергии используются соответственно эффективный борковский радиус и эффективный Ридберг [8]:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\hbar^2 \epsilon_0 \gamma_1}{m_0 e^2}, \\ E_0 &= \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2 \epsilon_0^2 \gamma_1}. \end{aligned}$$

Поэтому потенциал кулоновского центра в уравнении (2) равен

$$V(r) = -2 \frac{Z}{r}, \quad (3)$$

где Z — зарядовое число примесного центра.

Система из двух уравнений второго порядка (2) имеет 4 линейно независимых частных решения. Нам нужно найти такую их линейную комбинацию, для которой волновая функция будет конечной при $r = 0$ и $r \rightarrow \infty$. Поскольку потенциал (3) имеет особенность в нуле, для вычисления функций (1) при малых значениях r лучше всего подходит обобщенный метод Фробениуса [11]. Решение уравнений при больших r можно найти методом Рунге–Кутта, однако из-за присутствия валентной зоны частные решения будут экспоненциально расти, т.е. данный метод будет неустойчивым. Для решения

этой проблемы можно использовать метод стрельбы, как это было сделано в работе [6], однако такой подход не очень эффективен с точки зрения времени расчета и очень сложен для реализации в случае большого количества зон. В данной работе мы предлагаем использовать метод матрицы рассеяния [7,12–14], который обладает численной устойчивостью.

Выберем близкую к нулю точку r_0 , такую, что при $r \leq r_0$ неустойчивость не мешает получить решение уравнения (2) с помощью последовательного применения обобщенного метода Фробениуса и метода Рунге–Кутта. Выберем также точку r_N , достаточно далекую от нуля, чтобы при $r \geq r_N$ мы могли считать потенциал примеси равным нулю. В области $[r_0, r_N]$ мы будем искать решение уравнения (2) с помощью метода матрицы рассеяния. Для этого разобьем ее на отрезки серией точек r_0, r_1, \dots, r_N и на каждом отрезке $[r_j, r_{j+1}]$ будем считать потенциал постоянным и равным

$$V_j = \frac{V(r_j) + V(r_{j+1})}{2}.$$

Тогда уравнение (2) примет вид

$$\hat{H}_0^{(J,L)} \mathbf{f}_j = (E - V_j) \mathbf{f}_j. \quad (4)$$

Уравнение (4) фактически описывает движение электрона в однородном полупроводнике. Его решениями будут комбинации из сферических функций Бесселя:

$$\mathbf{f}_{j,n}^{(a,b)}(r) = \begin{pmatrix} c_{j,n,1} s_{L+1, \pm k_{j,n}}(r) \\ c_{j,n,2} s_{L-1, \pm k_{j,n}}(r) \end{pmatrix}; \quad n = 1, 2, \quad (5)$$

где $s_{L,k}(r) = j_L(kr) + iy_L(kr)$, а j_L и y_L — сферические функции Бесселя 1-го и 2-го рода соответственно. Отметим, что эти функции определены как для вещественных, так и для мнимых значений $k_{j,n}$ (см., например, [15]). Мы можем считать, что в выражении (5) $k_{j,n}$ является положительным вещественным числом или мнимым числом с положительной мнимой частью. Тогда функции $\mathbf{f}_{j,n}^{(a)}(r)$ будут сферическими волнами, бегущими от центра (для вещественных $k_{j,n}$), либо экспоненциально затухающими решениями (для мнимых $k_{j,n}$). В то же время функции $\mathbf{f}_{j,n}^{(b)}(r)$, имеющие противоположный знак волнового числа, будут соответственно сферическими волнами, бегущими к центру, либо экспоненциально растущими решениями. Такая классификация решений обеспечивает устойчивость метода матрицы рассеяния [7].

Подставив выражение (5) в уравнение (4), мы получим уравнение для волновых чисел $k_{j,n}$ и коэффициентов $c_{j,n,L}$:

$$\begin{pmatrix} -\mu_+ k_{j,n}^2 + V_j - E & -\mu_2 k_{j,n}^2 \\ -\mu_2 k_{j,n}^2 & -\mu_- k_{j,n}^2 + V_j - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{j,n,L+1} \\ c_{j,n,L-1} \end{pmatrix} = 0.$$

В случае бесщелевого полупроводника решения $k_{j,n}^2$ будут иметь противоположные знаки, поскольку ветви одной зоны направлены вверх, а другой — вниз. Далее для определенности мы будем считать, что $k_{j,1}^2 > 0$, а $k_{j,2}^2 < 0$.

Приближенное решение уравнения (2) на отрезке $[r_j, r_{j+1}]$ будет линейной комбинацией всех частных решений (5):

$$\mathbf{f}_j(r) = \mathbf{F}_j^{(a)}(r)\mathbf{a}_j + \mathbf{F}_j^{(b)}(r)\mathbf{b}_j, \quad (6)$$

где

$$\mathbf{F}_j^{(a,b)}(r) = \begin{pmatrix} c_{j,1,L+1}S_{L+1,\pm k_{j,1}}(r) & c_{j,2,L+1}S_{L+1,\pm k_{j,2}}(r) \\ c_{j,1,L-1}S_{L-1,\pm k_{j,1}}(r) & c_{j,2,L-1}S_{L-1,\pm k_{j,2}}(r) \end{pmatrix}.$$

Неизвестные коэффициенты \mathbf{a}_j и \mathbf{b}_j должны обеспечить непрерывность функции $\mathbf{f}_j(r)$ и ее первой производной на границах отрезков. Из этого условия мы можем найти выражения для трансфер-матриц, связывающих значения этих коэффициентов на соседних отрезках:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_j \\ \mathbf{b}_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_j^{(aa)} & \mathbf{T}_j^{(ab)} \\ \mathbf{T}_j^{(ba)} & \mathbf{T}_j^{(bb)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{j-1} \\ \mathbf{b}_{j-1} \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}_j^{(aa)} & \mathbf{T}_j^{(ab)} \\ \mathbf{T}_j^{(ba)} & \mathbf{T}_j^{(bb)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_j^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}_j^{(b)}(r_j) \\ \mathbf{F}'_j^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}'_j^{(b)}(r_j) \end{pmatrix}^{-1} \times \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{j-1}^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}_{j-1}^{(b)}(r_j) \\ \mathbf{F}'_{j-1}^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}'_{j-1}^{(b)}(r_j) \end{pmatrix},$$

а штрихи в последнем выражении означают производные по r .

По определению, матрица рассеяния для области $[r_{j_1}, r_{j_2}]$ удовлетворяет соотношению

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_{j_2} \\ \mathbf{b}_{j_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{j_1,j_2}^{(aa)} & \mathbf{S}_{j_1,j_2}^{(ab)} \\ \mathbf{S}_{j_1,j_2}^{(ba)} & \mathbf{S}_{j_1,j_2}^{(bb)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{j_1} \\ \mathbf{b}_{j_2} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Метод вычисления матриц рассеяния изложен в работе [7]. Здесь мы приведем только результат:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{S}_{0,0}^{(aa)} & \mathbf{S}_{0,0}^{(ab)} \\ \mathbf{S}_{0,0}^{(ba)} & \mathbf{S}_{0,0}^{(bb)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{N,N}^{(aa)} & \mathbf{S}_{N,N}^{(ab)} \\ \mathbf{S}_{N,N}^{(ba)} & \mathbf{S}_{N,N}^{(bb)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{X}_j = (\mathbf{T}_j^{(bb)})^{-1} (\mathbf{T}_j^{(ba)} \mathbf{S}_{0,j-1}^{(ab)} (\mathbf{T}_j^{(bb)})^{-1} + 1)^{-1},$$

$$\mathbf{S}_{0,j}^{(ab)} = (\mathbf{T}_j^{(aa)} \mathbf{S}_{0,j-1}^{(ab)} + \mathbf{T}_j^{(ab)}) \mathbf{X}_j,$$

$$\mathbf{S}_{0,j}^{(bb)} = \mathbf{S}_{0,j-1}^{(bb)} \mathbf{X}_j,$$

$$\mathbf{S}_{0,j}^{(aa)} = (\mathbf{T}_j^{(aa)} - \mathbf{S}_{0,j}^{(ab)} \mathbf{T}_j^{(ba)}) \mathbf{S}_{0,j-1}^{(aa)},$$

$$\mathbf{S}_{0,j}^{(ba)} = \mathbf{S}_{0,j-1}^{(ba)} - \mathbf{S}_{0,j}^{(bb)} \mathbf{T}_j^{(ba)} \mathbf{S}_{0,j-1}^{(aa)},$$

$$\tilde{\mathbf{X}}_j = \left(1 - (\mathbf{T}_j^{(bb)})^{-1} \mathbf{S}_{j,N}^{(ba)} \mathbf{T}_j^{(ab)} \right)^{-1} (\mathbf{T}_j^{(bb)})^{-1},$$

$$\mathbf{S}_{j-1,N}^{(ba)} = \tilde{\mathbf{X}}_j (\mathbf{S}_{j,N}^{(ba)} \mathbf{T}_j^{(aa)} - \mathbf{T}_j^{(ba)}),$$

$$\mathbf{S}_{j-1,N}^{(bb)} = \tilde{\mathbf{X}}_j \mathbf{S}_{j,N}^{(bb)},$$

$$\mathbf{S}_{j-1,N}^{(aa)} = \mathbf{S}_{j,N}^{(aa)} (\mathbf{T}_j^{(aa)} - \mathbf{T}_j^{(bb)} \mathbf{S}_{j-1,N}^{(ba)}),$$

$$\mathbf{S}_{j-1,N}^{(ab)} = \mathbf{S}_{j,N}^{(ab)} - \mathbf{S}_{j,N}^{(aa)} \mathbf{T}_j^{(ab)} \mathbf{S}_{j-1,N}^{(bb)}.$$

Коэффициенты \mathbf{a}_j и \mathbf{b}_j вычисляются с помощью следующих выражений [7]:

$$\mathbf{a}_j = (1 - \mathbf{S}_{0,j}^{(ab)} \mathbf{S}_{j,N}^{(ba)})^{-1} (\mathbf{S}_{0,j}^{(aa)} \mathbf{a}_0 + \mathbf{S}_{0,j}^{(ab)} \mathbf{S}_{j,N}^{(bb)} \mathbf{b}_N),$$

$$\mathbf{b}_j = (1 - \mathbf{S}_{j,N}^{(ba)} \mathbf{S}_{0,j}^{(ab)})^{-1} (\mathbf{S}_{j,N}^{(ba)} \mathbf{S}_{0,j}^{(aa)} \mathbf{a}_0 + \mathbf{S}_{j,N}^{(bb)} \mathbf{b}_N).$$

Чтобы воспользоваться этими формулами, как очевидно, нам потребуются значения \mathbf{a}_0 и \mathbf{b}_N . Из условия конечности волновой функции при $r \rightarrow \infty$ следует, что все компоненты вектора \mathbf{b}_N , соответствующие растущим экспонентам, должны быть равны нулю. Поскольку мы считаем, что $k_{j,2}^2 < 0$, этот вектор равен

$$\mathbf{b}_N = \begin{pmatrix} b_{N,1} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Значение коэффициента $b_{N,1}$ мы найдем из условия нормировки:

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr [\Psi_{L,E}^{(J,M)}]^* \Psi_{L,E'}^{(J,M)} = \delta(E - E').$$

Для вычисления вектора \mathbf{a}_0 сначала нужно с помощью обобщенного метода Фробениуса и метода Рунге–Кутты найти в области $r < r_0$ два линейно независимых решения уравнения (2), которые не имеют особенностей в нуле. Эти решения $\mathbf{f}_{-1,n}(r)$ имеют вид (1) и образуют квадратную матрицу

$$\mathbf{F}_{-1}(r) = \begin{pmatrix} f_{-1,1,L+1}(r) & f_{-1,2,L+1}(r) \\ f_{-1,1,L-1}(r) & f_{-1,2,L-1}(r) \end{pmatrix},$$

где используется индекс -1 , поскольку мы рассматриваем область слева от отрезка с индексом 0. Тогда искомое решение на отрезке $[0, r_0]$ будет равно

$$\mathbf{f}_{-1}(r) = \mathbf{F}_{-1}(r)\mathbf{a}_{-1}, \quad (8)$$

где неизвестный вектор \mathbf{a}_{-1} должен обеспечить выполнение условий непрерывности функции $\mathbf{f}(r)$ и ее первой производной в точке r_0 :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_{-1}(r_j) \\ \mathbf{F}'_{-1}(r_j) \end{pmatrix} \mathbf{a}_{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_0^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}_0^{(b)}(r_j) \\ \mathbf{F}'_0^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}'_0^{(b)}(r_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} \mathbf{a}_0 \\ \mathbf{b}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_0^{(a)} \\ \mathbf{T}_0^{(b)} \end{pmatrix} \mathbf{a}_{-1}, \quad (9)$$

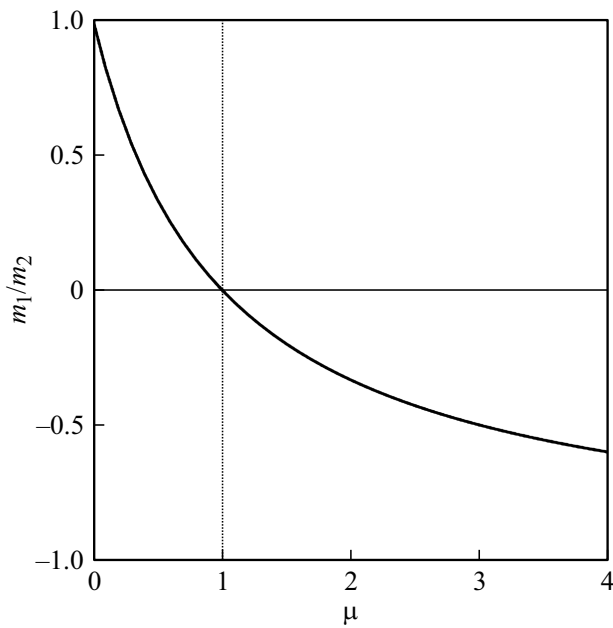


Рис. 1. Зависимость отношения эффективных масс в модели Латтинжера от параметра μ .

где

$$\begin{pmatrix} \mathbf{T}_0^{(a)} \\ \mathbf{T}_0^{(b)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_0^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}_0^{(b)}(r_j) \\ \mathbf{F}'_0^{(a)}(r_j) & \mathbf{F}'_0^{(b)}(r_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{F}_{-1}(r_j) \\ \mathbf{F}'_{-1}(r_j) \end{pmatrix}.$$

Подставив $j_1 = 0$ и $j_2 = N$ в (7), и с учетом выражения (9) мы получим

$$\mathbf{a}_{-1} = (\mathbf{T}_0^{(b)} - \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)} \mathbf{T}_0^{(a)})^{-1} \mathbf{S}_{0,N}^{(bb)} \mathbf{b}_N.$$

Откуда, воспользовавшись формулой (9), получаем

$$\mathbf{a}_0 = \mathbf{T}_0^{(a)} (\mathbf{T}_0^{(b)} - \mathbf{S}_{0,N}^{(ba)} \mathbf{T}_0^{(a)})^{-1} \mathbf{S}_{0,N}^{(bb)} \mathbf{b}_N.$$

Таким образом, нам известны решения $\mathbf{f}_{-1,n}(r)$ и $\mathbf{f}_{j,n}^{(a,b)}(r)$, а также коэффициенты \mathbf{a}_{-1} , \mathbf{a}_j и \mathbf{b}_j , где $j = 0, \dots, N$. Это позволяет вычислить функцию $\mathbf{f}(r)$ для любого r с помощью формул (6) и (8).

3. Результаты и обсуждение

Главным параметром модели является величина

$$\mu = \frac{4\gamma_2 + 6\gamma_3}{5\gamma_1},$$

которая определяется отношением эффективных масс в двух зонах:

$$m_{1,2} = \frac{m_0}{1 \pm \mu}.$$

Для бесщелевого полупроводника одна из масс должна быть отрицательной, и это условие выполняется при $\mu > 1$. Однако из рис. 1 хорошо видно, что в рамках данной модели масса в валентной зоне будет всегда меньше, чем в зоне проводимости. Нам же интересен обратный случай, так как именно он реализуется в соединении HgTe. Для того чтобы описать такую систему, мы, воспользовавшись симметрией двухзонной модели, рассмотрим донор ($Z = 1$) вместо акцептора ($Z = -1$) и изменим направление оси энергий на противоположное. Таким образом, в новой системе координат эффективная масса носителей в валентной зоне будет больше, чем в зоне проводимости.

Для того чтобы определить положение резонансных уровней, мы провели расчеты волновых функций в

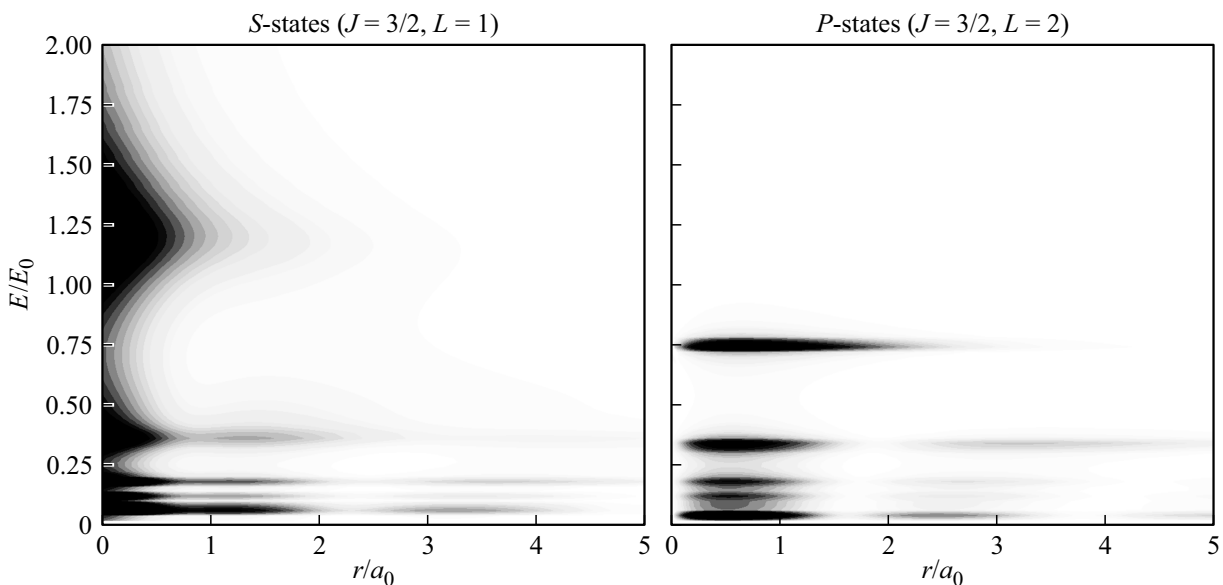


Рис. 2. Усредненная по углам зависимость плотности вероятности обнаружения электрона от его энергии (E) и расстояния до примесного центра (r).

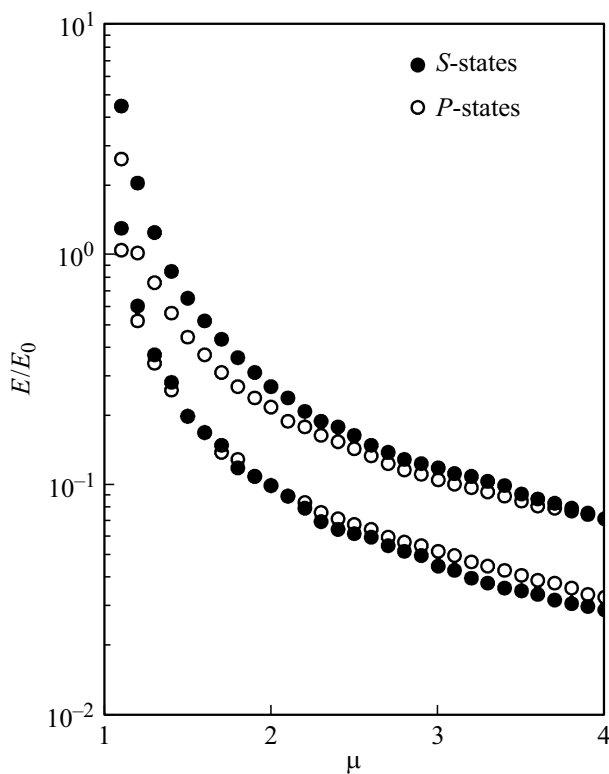


Рис. 3. Зависимость рассчитанной энергии наиболее глубоких резонансных состояний от параметра μ .

зоне проводимости в широком диапазоне энергий при различных значениях параметра μ . Пример полученных таким образом результатов представлен на рис. 2. Резонансные состояния хорошо видны как максимумы плотности вероятности при определенных значениях энергии. Зависимость энергии резонансных состояний от параметра μ приведена на рис. 3.

4. Заключение

Таким образом, нами разработан устойчивый метод расчета волновых функций непрерывного спектра в бесщелевых полупроводниках с учетом потенциала примеси. Высокая эффективность и устойчивость данного метода делает его весьма перспективным для численного моделирования резонансных состояний примесей в узкозонных гетероструктурах на основе соединений $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$.

Финансирование работы

Разработка программного обеспечения для расчета волновых функций электрона в многозонных моделях выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 19–72–00128). Расчеты волновых функций в модели Латтинжера и определение энергий резонансных состояний выполнены при поддержке Министерства

образования и науки Российской Федерации (проект МК-1430.2020.2).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S. Morozov, V. Romyantsev, M. Fadeev, M. Zholudev, K. Kudryavtsev, A. Antonov, A. Kadykov, A. Dubinov, N. Mikhailov, S. Dvoretckii, V. Gavrilenko. *Appl. Phys. Lett.*, **111**, 192101 (2017).
- [2] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, В.С. Варавин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Ф. Теппе. *ФТП*, **50**, 1690 (2016).
- [3] V.V. Romyantsev, D.V. Kozlov, S.V. Morozov, M.A. Fadeev, A.M. Kadykov, F. Teppe, V.S. Varavin, M.V. Yakushev, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretckii, V.I. Gavrilenko. *Semicond. Sci. Technol.*, **32**, 095007 (2017).
- [4] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, Н.-W. Hubers, В.И. Гавриленко. *ФТП*, **52**, 1257 (2018).
- [5] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, Н.С. Куликов, В.В. Уточкин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Х.-В. Хюберс, Ф. Теппе, С.В. Морозов. *Письма ЖЭТФ*, **109**, 679 (2019).
- [6] М.С. Жолудев, Д.В. Козлов, Н.С. Куликов, А.А. Разова, В.И. Гавриленко, С. В. Морозов. *ФТП*, **54**, 695 (2020).
- [7] D. Yuk Kei Ko, J.C. Inkson. *Phys. Rev. B*, **38**, 9945 (1988).
- [8] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8**, 2697 (1973).
- [9] E.P. Pokatilov, V.A. Fonoberov, V.M. Fomin, J.T. Devreese. *Phys. Rev. B*, **64**, 245328 (2001).
- [10] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. *Квантовая теория углового момента* (Л., Наука, 1975).
- [11] M. Barkatou, T. Cluzeau, C. El Bacha. In: *Proc. of Mathematical Theory of Networks and Systems* (Budapest, Hungary, 2010) p. 1059.
- [12] M.S. De Bianchi, M.D. Ventra. *Eur. J. Phys.*, **16**, 260 (1995).
- [13] C. Ramirez, R. Leon. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 114002 (2017).
- [14] C. Ramirez, F.H. Gonzalez, C.G. Galvan. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **88**, 094002 (2019).
- [15] М. Абрамовиц, И. Стиган. *Справочник по специальным функциям* (М., Наука, 1979).

Редактор Л.В. Шаронова

Calculation of Coulomb acceptor resonant states in zero-gap semiconductors

M.S. Zholudev^{1,2}, V.V. Rumyantsev^{1,2}, S.V. Morozov^{1,2}

¹ Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

² Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract Wavefunctions of electron have been calculated for conduction band of zero-gap semiconductor with Coulomb acceptor. Spherically symmetric Luttinger model was used. The resonant state energies have been calculated as functions of electron and hole mass ratio.