

УДК 621.315.529

©1994

## СПИНОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НА ДВУХ ГЛУБОКИХ ЦЕНТРАХ В КУБИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

*Н.С.Аверкиев, С.Ю.Ильинский*

Рассчитаны энергетические структуры систем из одного и двух носителей в поле двух центров как донорного, так и акцепторного типа в полупроводниках с простой и сложной валентной зонами типа Ge и GaAs в рамках метода потенциала нулевого радиуса. Показано, что во всех этих случаях основное состояние отвечает либо нулевому значению проекции суммарного момента дырок на ось, соединяющую центры, либо нулевому значению полного спина для электронов. Вычислена зависимость от расстояния между центрами разницы между энергией основного и первого возбужденного состояния в каждом из случаев.

Вопросы о спиновом упорядочении и величине обменного взаимодействия носителей заряда, локализованных на двух различных центрах, возникают в различных областях физики твердого тела. В первую очередь это относится к исследованию степени циркулярной поляризации многоэкситонных комплексов в кремнии [1,2] и изучению эффекта гигантского отрицательного магнетосопротивления в InSb, легированного магнитными примесями акцепторного типа [3,4].

Для случая двух мелких водородоподобных доноров в прямозонном кубическом полупроводнике данный вопрос может быть решен в приближении эффективной массы. В этом случае задача сводится к уже решенной [5,6] об обменном взаимодействии двух атомов водорода, находящихся на расстоянии  $R$ , много большем, чем их борковский радиус  $a_B$ . В [5,6] показано, что суммарный спин двух электронов в основном состоянии равен нулю, и приведена зависимость величины обменного расщепления от  $R$  при  $R/a_B \gg 1$ . Для двух мелких кулоновских акцепторов в полупроводниках с так называемой сложной валентной зоной типа Ge или GaAs ситуация много сложнее, поскольку полный момент каждого локализованного носителя равен  $3/2$  и существует взаимосвязь между магнитным и орбитальным моментами. Подобная трудность будет иметь место для двух акцепторов, дающих глубокие уровни, которые можно описать методом потенциалов нулевого радиуса. В ряде случаев, когда физические явления определяются видом волновой функции носителя на расстояниях, много больших, чем эффективный борковский радиус, модель потенциала нулевого радиуса адекватно описывает не только глубокие уровни, но и основное состояние кулоновского центра [7]. Вопрос о спиновом упорядочении дырок, локализованных на таких центрах, теоретически не изучался.

Целью данной работы будет вычисление величины и знака обменного взаимодействия двух носителей заряда, локализованных на двух глубоких донорах и акцепторах, описываемых методом потенциалов нулевого радиуса. Будет продемонстрировано, что в случае двух доноров суммарный спин электронов равен нулю в основном состоянии для произвольного расстояния  $R$  между центрами. Для дефектов акцепторного типа в рамках сферического приближения для гамильтониана Латтинжера показано, что проекция полного момента двух дырок на ось, соединяющую центры, также равна нулю (в основном состоянии). Такой антиферромагнитный характер обменного взаимодействия подтверждается экспериментальными данными [1,2].

Теоретически вопрос о величине полного момента двух дырок  $F$ , локализованных на одном дефекте в кубическом кристалле со сложной структурой валентной зоны типа  $\Gamma_8$ , был рассмотрен для глубокого акцептора в [8], а для мелкого водородоподобного акцептора — в [9]. В этих работах было показано, что для основного состояния  $F = 2$ . В связи с этим представляет интерес проследить, как изменится обменное взаимодействие, если носители будут локализованы на разных дефектах. В данной работе мы используем метод потенциалов нулевого радиуса [10] и будем пренебрегать зарядом центра. Эта модель хорошо описывает некоторые реальные глубокие акцепторы [7,8] при выполнении условий  $a_B^* \gg \alpha^{-1} \gg a_0$ , где  $a_B^*$  — эффективный боровский радиус носителя;  $a_0$  — постоянная решетки;  $\alpha^{-1}$  — характерный размер, определяющий убывание волновой функции с расстоянием от центра. Величина  $\alpha^{-1}$  связана с энергией ионизации центра  $E_0$ , которая в рамках метода потенциалов нулевого радиуса не вычисляется, а рассматривается как параметр. Условие  $a_B^* \gg \alpha^{-1}$ , другими словами, означает, что  $E_0 \gg E_B^*$ , где  $E_B^*$  — эффективная боровская энергия, определяющая энергию ионизации кулоновского центра. Можно показать [8], что в рамках метода потенциалов нулевого радиуса энергия кулоновского расталкивания носителей вблизи одного центра  $\sim \sqrt{E_B^* E_0}$  и является малой по сравнению с  $E_0$ .

## 1. Система двух доноров, описываемых методом потенциала нулевого радиуса

Рассмотрим сначала энергетическую структуру одного электрона, который находится в поле двух доноров (каждый из которых дает глубокий уровень с энергией  $E_0$ ), расположенных на расстоянии  $R$ . В методе потенциалов нулевого радиуса [10] уравнение Шредингера для такой частицы имеет вид

$$H_0(r) = E\Psi(r), \quad (1)$$

где  $H_0 = \hat{p}^2/2m^*$  — гамильтониан свободного электрона,  $\hat{p}$  — оператор импульса,  $m^*$  — эффективная масса,  $E$  — энергия ( $E < 0$ ) связи.

Граничные условия к уравнению (1) можно записать в виде

$$\frac{1}{r\Psi} \frac{\partial}{\partial r} (r\Psi) \Big|_{r \rightarrow R_i} = -\alpha; \quad i = 1, 2, \quad \alpha = \sqrt{2m^* E_0 / \hbar}, \quad (2)$$

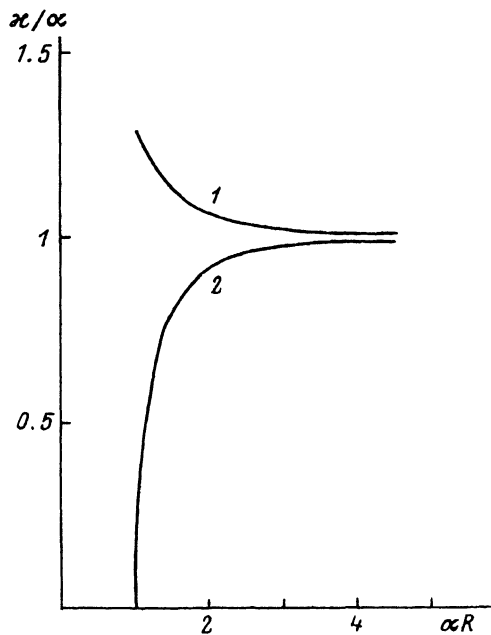


Рис. 1. Зависимость величины  $x/\alpha = \sqrt{2m^*|E|}/\hbar\alpha$  для одного электрона, находящегося в поле двух глубоких доноров, от расстояния между этими центрами.

Кривая 1 отвечает связанному основному состоянию с волновой функцией  $\Psi_S$ , кривая 2 — возбужденному состоянию.

где  $R_i$  — координаты первого и второго центров;  $\alpha$  — параметр, описывающий убывание с расстоянием волновой функции носителя, локализованного на одном центре.

Тогда  $\Psi(r)$  представима в виде

$$\Psi(r) = C_1 \Phi(r - \mathbf{R}_1) + C_2 \Phi(r - \mathbf{R}_2), \quad (3)$$

где

$$\Phi(r) = \frac{e^{-\alpha_n r}}{r}, \quad \alpha_n = \frac{\sqrt{2m^*|E|}}{\hbar}$$

— параметр, который определяется из граничного условия.

Из соображений симметрии можно заключить, что волновая функция будет либо симметричной по перестановке координат центров  $\Psi_S$ , либо антисимметричной  $\Psi_A$  и соответственно  $n = S$  или  $A$ .

Подстановка (3) в (2) дает систему уравнений, из условия разрешимости которой следует

$$\alpha_{S,A} = \alpha \pm \frac{e^{-\alpha_{S,A} R}}{R}, \quad |E_{S,A}| = \frac{\hbar^2 \alpha_{S,A}^2}{2m^*}, \quad (4)$$

а решая эту систему, имеем

$$\begin{aligned} C_1^S &= C_2^S = (\alpha_S/4\pi(1 + \exp(-\alpha_S R)))^{1/2}, \\ C_1^A &= C_2^A = (\alpha_A/4\pi(1 - \exp(-\alpha_A R)))^{1/2}. \end{aligned} \quad (5)$$

Численное решение уравнения (4) приведено на рис. 1. Из этого рисунка видно, что связанное состояние, отвечающее  $\Psi_A$ , появляется только начиная с некоторых расстояний  $R$ .

Рассмотрим теперь случай, когда имеются два электрона. Тогда если расстояние между центрами такое, что  $|E_S| \sim |E_A| \sim E_0$ , то суммарный спин электронов в модели двух электронов на двух центрах будет равен нулю, поскольку, согласно принципу Паули, они займут одночастичный уровень  $E_S$ . Однако на расстояниях  $\alpha R \gg 1$  ситуация может измениться, так как величина расщепления

$$\Delta E = |E_S - E_A| = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{4\alpha}{R} e^{-\alpha R}, \quad \alpha R \gg 1$$

окажется много меньше  $\epsilon^2 \alpha / \kappa$  — энергии электростатического расталкивания электронов на одном центре ( $\epsilon$  — заряд электрона,  $\kappa$  — диэлектрическая проницаемость).

Для выяснения энергетической структуры в этом предельном случае больших расстояний удобно выбрать следующие волновые функции:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}_{S,A}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_S(\mathbf{r}_1) \Psi_A(\mathbf{r}_2) \pm \Psi_A(\mathbf{r}_1) \Psi_S(\mathbf{r}_2) \right\}, \\ \tilde{\Psi}_S^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Psi_S(\mathbf{r}_1) \Psi_S(\mathbf{r}_2) \pm \Psi_A(\mathbf{r}_1) \Psi_A(\mathbf{r}_2) \right\}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь функции  $\tilde{\Psi}_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ,  $\tilde{\Psi}_S^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  при замене  $\mathbf{r}_1$  на  $\mathbf{r}_2$  не меняют знака, и в этих состояниях полный спин электронов равен нулю. В состоянии, описываемом функцией  $\tilde{\Psi}_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , суммарный спин двух электронов  $S$  равен единице. Гамильтониан для двух электронов, локализованных на двух центрах нулевого радиуса, получается добавлением к (1) оператора кулоновского взаимодействия  $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^2 / \kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  с теми же граничными условиями

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = H_0(\mathbf{r}_1) + H_0(\mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (7)$$

Поскольку кулоновское взаимодействие рассматривается как возмущение, для определения уровней энергии достаточно найти собственные значения матрицы  $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , вычисленной на функциях (6). Тогда ненулевыми элементами  $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  будут

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi}_A | V | \tilde{\Psi}_A \rangle &= E_{S=1} = \langle \tilde{\Psi}_A | V | \tilde{\Psi}_A \rangle + \Delta, \\ \langle \tilde{\Psi}_S | V | \tilde{\Psi}_S \rangle &= E_{S=1}^3 = \langle \tilde{\Psi}_S | V | \tilde{\Psi}_S \rangle + \Delta, \\ \langle \tilde{\Psi}_S^\pm | H | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle &= \Delta + \langle \tilde{\Psi}_S | V | \tilde{\Psi}_S \rangle, \\ \langle \tilde{\Psi}_S^\pm | H | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle &= \delta + \langle \tilde{\Psi}_S^\pm | V | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\Delta = E_S + E_A, \quad \delta = E_S - E_A.$$

Волновая функция  $\tilde{\Psi}_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , в которой  $S = 0$ , не смешивается с другими состояниями  $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  в силу того, что она антисимметрична по отношению к замене координат центров  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ , а  $\tilde{\Psi}_S^\pm(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  не меняют знака при такой замене.

Как указывалось выше, на расстояниях между центрами, таких, что  $\langle \tilde{\Psi}_S^\pm | V | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle$ ,  $\langle \tilde{\Psi}_S^\pm | V | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle \ll |\delta|$ , основному уровню энергии отвечает функция  $\Phi_0 = \Psi_S(\mathbf{r}_1)\Psi_S(\mathbf{r}_2)$ , однако при обратном соотношении между  $\langle \tilde{\Psi}_S^\pm | V | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle$ ,  $\langle \tilde{\Psi}_S^\pm | V | \tilde{\Psi}_S^\pm \rangle$  и  $\delta$  состояние типа  $\Phi_0$  не может отвечать основному уровню, поскольку  $\Phi_0$  описывает такое распределение электронной плотности, при котором обе заряженные частицы могут находиться на одном центре. Согласно вычислениям [8], это дает поправку к энергии  $\approx e^2\alpha/\kappa$ , которая будет превосходить выигрыш в энергии за счет притяжения частиц к центру  $\delta$ . (Как следует из (4), при  $\alpha R \geq 1$   $\delta \approx -(2\hbar^2\alpha^2/m^*)(e^{-\alpha R}/\alpha R)$ ). Ниже мы приведем результаты вычислений в случае  $\alpha R \gg 1$ , когда энергия электростатического расталкивания электронов на одном центре превосходит энергию  $|\delta|$ . Расчеты дают

$$E_{S=1} = \Delta + e^2 \left\{ \frac{1}{R} + 4(2 \ln 2 - 1) \frac{e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{\alpha R^2} - 3 \frac{e^{-2\alpha R}}{R} \right\} - J_{ex},$$

$$E_{S=0}^3 = \Delta + e^2 \left\{ 8\alpha \ln 2 + 4(2 \ln 2 - 1) \frac{e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{\alpha R^2} + 24\alpha \ln 2 e^{-2\alpha R} \right\} - J_{ex},$$

$$E_{S=0}^1 = \Delta + e^2 \left\{ 8\alpha \ln 2 + 4(2 \ln 2 - 1) \frac{e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{\alpha R^2} + 40\alpha \ln 2 e^{-2\alpha R} + 3 \frac{e^{-2\alpha R}}{R} \right\} - 2\delta e^{-\alpha R} + J_{ex},$$

$$E_{S=0}^2 = \Delta + e^2 \left\{ \frac{1}{R} + 4(2 \ln 2 - 1) \frac{e^{-\alpha R}}{R} + \frac{e^{-\alpha R}}{\alpha R^2} + 2 \frac{e^{-2\alpha R}}{R} \right\} + 2\delta e^{-\alpha R} + J_{ex}, \quad (9)$$

$E_{S=0}^1$  и  $E_{S=0}^2$  — собственные значения матрицы  $2 \times 2$  (8), вычисленные с точностью до  $e^{-2\alpha R}/R$ .

Таким образом, разница между уровнями с минимальной энергией равна

$$\Delta E = E_{S=0}^2 - E_{S=1} = 2\delta e^{-\alpha R} + 2J_{ex} + 5 \frac{e^{-2\alpha R}}{R} \frac{e^2}{\kappa},$$

где

$$J_{ex} = \frac{\alpha^2}{4\pi^2} \int \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R})\Phi(\mathbf{r}_1)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\Phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R})\Phi(\mathbf{r}_2)d^3\mathbf{r}_1d^3\mathbf{r}_2,$$

$$\delta = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{4\alpha}{R} e^{-\alpha R}, \quad \alpha R \gg 1,$$

$J_{ex}$  представляет собой обменный интеграл. Вычисления с указанной точностью дают выражение для  $J_{ex}$

$$J_{ex} = \frac{e^2}{\kappa} \frac{50}{3} \frac{e^{-2\alpha R}}{R}, \quad (10)$$

и, следовательно, второе и третье слагаемые в (10) много меньше первого  $\delta\epsilon^{-\alpha R}$  в силу применимости модели потенциалов нулевого радиуса к реальным полупроводникам. Таким образом, для системы двух глубоких доноров, описываемых моделью потенциалов нулевого радиуса, суммарный спин электронов равен нулю в основном состоянии.

Рассмотрим теперь случай акцепторов в кубическом полупроводнике со сложной структурой валентной зоны.

## 2. Энергетическая структура одной дырки, локализованной вблизи двух нейтральных глубоких акцепторов в полупроводнике со структурой алмаза

Гамильтониан Латтинжера [11], описывающий движение дырки в поле одного центра, в пренебрежении гофрированностью изоэнергетической поверхности валентной зоны при бесконечно большой величине спин-орбитального расщепления имеет вид

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_0} \left( \left( \gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) \hat{\mathbf{p}}^2 - 2\gamma(\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{J}})^2 \right), \quad (11)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона;  $\hat{\mathbf{p}}$  — оператор импульса;  $J_x, J_y, J_z$  — числовые матрицы  $4 \times 4$  проекций момента  $x, y, z$ , соответствующие значению  $J = 3/2$ ;  $\gamma = (3\gamma_3 + 2\gamma_2)/5$ ,  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  — параметры зон, введенные Латтинжером;  $m_l = m_0(\gamma_1 + 2\gamma)^{-1}$  — масса легкой дырки,  $m_h = m_0(\gamma_1 - 2\gamma)^{-1}$  — масса тяжелой дырки.

Волновая функция, удовлетворяющая свойствам симметрии гамильтониана (11) и сферически-симметричного потенциала, взятая при значении полного момента  $3/2$  (основное состояние), имеет вид

$$\Psi_M^{3/2}(r, \theta, \varphi) = 2 \sum_{l=0,2} (-1)^{l-3/2+M} R_l(r) \sum_{m_\mu} \begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -M \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) X_\mu, \quad (12)$$

$$M = \pm 1/2, \pm 3/2,$$

где  $Y_{lm}$  — сферические функции,  $X_\mu$  — собственный вектор матрицы  $J_z$ :  $\hat{J}_z X_\mu = \mu X_\mu$ ;  $\mu$  принимает значения  $\pm 3/2, \pm 1/2$ ,

$$\begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -M \end{pmatrix} — 3j\text{-символ Вигнера.}$$

В методе потенциала нулевого радиуса при определении вида функций  $R_0(r)$  и  $R_2(r)$  для дырки на одном центре используются следующие граничные условия:

$$\frac{1}{r\langle\Psi_M\rangle} \frac{\partial}{\partial r} (r\langle\Psi_M\rangle) \Big|_{r=0} = -\alpha, \quad \langle\Psi_M\rangle = \int \Psi_M^{3/2} Y_{00} d^2\Omega, \quad (13)$$

$$\Psi_M^{3/2} \rightarrow 0, \quad r \rightarrow \infty, \quad M = \pm 1/2, \pm 3/2,$$

$\alpha$  — параметр, определяющий энергию ионизации центра  $E_0$ . Тогда с учетом нормировки для  $\Psi_M^{3/2}$  функции  $R_0$  и  $B_2$  имеют вид

$$R_0(r, \sqrt{\varepsilon}) = C_0 \frac{1}{r} F_0(r, \sqrt{\varepsilon}),$$

$$R_2(r, \sqrt{\varepsilon}) = C_0 \frac{1}{r} F_2(r, \sqrt{\varepsilon}) \quad (14)$$

$$F_0(r, \sqrt{\varepsilon}) = \left\{ \beta e^{-qr\sqrt{\beta}} + e^{-qr} \right\},$$

$$F_2(r, \sqrt{\varepsilon}) = \left\{ \beta e^{-qr\sqrt{\beta}} \left( 1 + \frac{3}{qr\sqrt{\beta}} + \frac{3}{q^2 r^2 \beta} \right) - e^{-qr} \left( 1 + \frac{3}{qr} + \frac{3}{q^2 r^2} \right) \right\}, \quad (15)$$

где

$$C_0 = \sqrt{\frac{q}{\beta\sqrt{\beta} + 1}}, \quad \beta = \frac{m_l}{m_h}, \quad q = \sqrt{\frac{2m_h E_0}{\hbar^2}}.$$

Зависимость уровня энергии от параметра  $\alpha$  дается выражением

$$E = -E_0 = -\frac{2\alpha^2 \hbar^2}{2m_h} \left( \frac{\beta + 1}{\beta\sqrt{\beta} + 1} \right)^2, \quad q = \alpha \frac{\beta + 1}{1 + \beta^{3/2}}.$$

Для определения же волновой функции дырки, связанной на двух центрах, необходимо считать, что условие (13) должно выполняться вблизи каждого центра, а волновые функции в этом случае представляют собой сумму типа (12) на каждом центре, но с одинаковым значением  $M$

$$\Psi_M = C_{1M} \Psi_M^{3/2}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) + C_{2M} \Psi_M^{3/2}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2), \quad (16)$$

где  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  — координаты центров.

Такой вид волновой функции обусловлен тем, что имеется единственная ось симметрии (линия, соединяющая центры), и поэтому проекция полного момента дырки на эту ось является квантовым числом. Тогда для дырки, двигающейся в поле двух центров, могут существовать четыре двукратно вырожденных уровня, отвечающих проекции момента  $M = \pm 3/2, \pm 1/2$  с волновыми функциями, симметричными и антисимметричными по перестановке координат центров  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ . Используя граничные условия, можно получить уравнения, определяющие энергию каждого подуровня как функцию  $\alpha$  и  $|\mathbf{R}| = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|$

$$q_{M;S,A} = \frac{1}{\beta\sqrt{\beta} + 1} \left\{ \alpha(\beta + 1) \pm \frac{1}{R} [F_0(Rq_{M;S,A}) + F_2(Rq_{M;S,A})] \right\}, \quad M = \pm 1/2,$$

$$q_{M;S,A} = \frac{1}{\beta\sqrt{\beta} + 1} \left\{ \alpha(\beta + 1) \pm \frac{1}{R} [F_0(Rq_{M;S,A}) - F_2(Rq_{M;S,A})] \right\}, \quad M = \pm 3/2,$$

$$q_{M;S,A} = \sqrt{\frac{2m_h}{\hbar^2} |E_{M;S,A}|}. \quad (17)$$

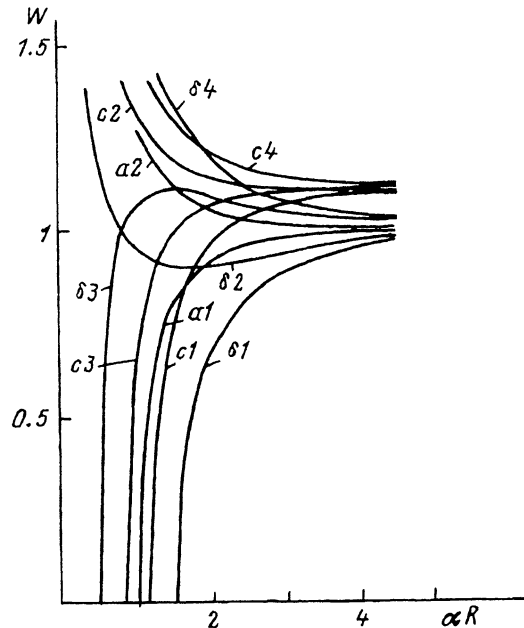


Рис. 2. Зависимость величины  $W = \sqrt{2m_h|E|}/\hbar\alpha$  для одной дырки, локализованной на двух глубоких акцепторных центрах в полупроводнике со структурой алмаза, от расстояния между этими центрами при  $\beta = 1(a)$ ,  $0(\delta)$ ,  $0.5(c)$ .

Кривые  $\delta 1, \delta 4, c 1, c 4$  отвечают значению проекции полного момента на ось, соединяющую центры, равному  $\pm 1/2$ ; кривые  $\delta 2, \delta 3, c 2, c 3$  — значению  $\pm 3/2$ ; кривые  $\delta 1, \delta 2, c 1, c 2, a 1$  соответствуют волновой функции, антисимметричной при замене координат центров; остальные кривые соответствуют симметричной волновой функции. Основным состояниям отвечают кривые  $a 2, \delta 4, c 4$ .

Численное решение уравнений (17) представлено на рис. 2 для различных величин  $\beta$ . Из этого рисунка следует, что основным уровнем дырки в поле двух глубоких акцепторов является состояние с проекцией полного момента на  $\mathbf{R}$ , равной  $\pm 1/2$ , и с волновой функцией, не меняющей знака при замене ( $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ ).

Ниже будет использовано приближение  $\beta = 0$ . В этом случае нормировочные коэффициенты и волновые функции имеют вид

$$\Psi_{M;S,A} = C_{M;S,A} \left\{ \Psi_M^{3/2}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) \pm \Psi_M^{3/2}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2) \right\}, \quad M = \pm 1/2, \pm 3/2,$$

где  $q$  заменено на соответствующие  $q_{M;S,A}$ , а

$$C_{M;S,A}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 \pm \frac{6}{\xi_{M;S,A}^3} \pm e^{-\xi_{M;S,A}} \left( \frac{3}{\xi_{M;S,A}} + \frac{6}{\xi_{M;S,A}^2} + \frac{6}{\xi_{M;S,A}^3} \right) \right], \quad M = \pm 1/2,$$

$$C_{\pm 3/2;S,A}^2 = C_{\pm 1/2;A,S}^2 + \xi_{\pm 3/2;S,A} e^{-\xi_{\pm 3/2;S,A}},$$

$$\xi_{M;S,A} = Rq_{M;S,A}. \quad (18)$$

Отметим, что зависимость уровней энергии от  $R$  для состояний с антисимметричной к замене  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$  волновой функцией описывает расщепление уровней глубокого акцептора, находящегося на расстоянии  $R$  от непроницаемого потенциального барьера (поверхности). В этом случае основной уровень отвечает проекции полного момента дырки на направление нормали к поверхности, равной  $\pm 3/2$  [12].



### 3. Система двух дырок, локализованных на двух акцепторах

Как и для системы двух электронов, кулоновское взаимодействие двух дырок, локализованных даже на одном центре  $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \approx e^2\alpha/\kappa$ , много меньше исходной энергии связи носителя. Поэтому двухчастичные волновые функции могут быть составлены из (16) с учетом принципа Паули. Тогда возникает 28 волновых функций, отвечающих различной величине проекции суммарного момента ( $F_z$ ) дырок на ось  $\mathbf{R}$  и различающихся по симметрии к замене  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ . В силу этого матрица оператора возмущения  $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ , вычисленная на двухчастичных функциях, разобьется на блоки: два блока  $4 \times 4$ , соответствующие нулевому значению  $F_z$ ; две матрицы  $2 \times 2$  и число для состояний с  $F_z = -1$  и  $F_z = +1$ ; два блока  $2 \times 2$  для  $F_z = \pm 2$  и число для  $F_z = 3$  и  $F_z = -3$ . Если расстояние между центрами сравнительно невелико и  $e^2\alpha/\kappa \ll \delta_h$ , где  $\delta_h$  определяет расщепление одночастичных уровней дырки (разница между кривыми  $\delta_1$  и  $\delta_4$  на рис. 2), то основным уравнением будет состояние со значением  $F_z = 0$ , поскольку обе дырки заполняют основное двукратно вырожденное одночастичное состояние. Такой характер спинового упорядочения соответствует экспериментам по поляризации излучения Si:P в магнитном поле [1,2]. С увеличением расстояния  $R$  расталкивание дырок на одном центре начнет превосходить их притяжение к чужому центру, что может привести к другой структуре основного уровня. Ниже для простоты мы опять рассмотрим большие расстояния  $R$  и приближение  $\beta = 0$ . (Последнее, как известно, неплохо описывает реальные кубические полупроводники типа GaAs, Ge). Наличие малого параметра ( $\beta \rightarrow 0$ ) позволяет проанализировать роль  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  в различных диапазонах  $R$ .

В рамках такого приближения существуют два масштаба убывания функции  $R_2$ : один — экспоненциальный  $\sim e^{-\alpha R}$ , другой — степенной  $\sim 1/R^3$  ((15)–(18)). Соответственно зависимость расщепления одночастичных уровней от  $R$  также будет иметь два масштаба (рис. 2), (17). При

$$e^{-\alpha R} \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\alpha^2}{(\alpha R)} \ll \alpha e^2/\kappa \ll \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\alpha^2}{(\alpha R)^3}, \quad \alpha R \gg 1 \quad (19)$$

основное состояние будет формироваться за счет смешивания состояний, произошедших из одночастичных  $\Psi(S, \pm 1/2)$  и  $\Psi(A, \pm 3/2)$ . Если же

$$e^2\alpha/\kappa \gg \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\alpha^2}{(\alpha R)^3} \gg e^{-\alpha R} \frac{\hbar^2}{m^*} \frac{\alpha^2}{(\alpha R)}, \quad (20)$$

то основное состояние будет представлять собой такую суперпозицию возможных двухчастичных состояний, в которых отсутствует локализация двух частиц на одном центре. В области (20) при расчете надо пренебречь всеми экспоненциальными ( $\sim e^{-\alpha R}$ ) слагаемыми. Анализ показывает, что в обеих областях (19) и (20) энергия основного уровня двух дырок определяется матрицей  $4 \times 4$ , описывающей состояние дырок с  $F_z = 0$ , и волновой функцией, не меняющей знака при замене  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ . Первое возбужденное состояние характеризуется проекцией  $F_z = \pm 1, \pm 2$ , а волновые функции меняют знак при замене  $\mathbf{R}_1 \leftrightarrow \mathbf{R}_2$ .

Однако зависимость от  $R$  энергетического расщепления между основным и первым возбужденным уровнями в областях (19), (20) различная. Расчет показывает, что в области (19) величина энергетического зазора между основным и первым возбужденным термами  $\Delta_h$  выражается через функции  $R_0$  и  $R_2$ , относящиеся к одному центру

$$\Delta_h = \frac{e^2}{5\pi\kappa}(\alpha)^2 \left\{ -2I_1 + \sqrt{(2I_1)^2 + \frac{1}{49}I_2^2} \right\}, \quad (21)$$

где

$$I_1 = \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \frac{r_2^4}{r_1} R_0(r_1) R_2(r_1) R_0(r_2) R_2(r_2) \alpha,$$

$$I_2 = \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \frac{r_2^4}{r_1} (R_2(r_1) R_0(r_2) + R_0(r_1) R_2(r_2)) R_2(r_1) R_2(r_2) \alpha$$

или

$$I_1 = \frac{1}{16\alpha} (176 \ln 2 - 135 \ln 3 + 27),$$

$$I_2 = \frac{1}{32\alpha} (81 \ln 2 - 160 \ln 3 + 24).$$

Численный расчет  $I_1$  и  $I_2$  дает  $\Delta_h = \alpha e^2 / \kappa \cdot 3.23 \cdot 10^{-5}$ . Отметим, что сдвиг основного уровня энергии за счет кулоновского расталкивания равен  $\alpha e^2 / \kappa \cdot 0.24$ .

В области значений  $R$  (20), где можно пренебречь экспоненциально малыми вкладами в энергии, без учета электростатического расталкивания частиц имеются три уровня

$$-\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m_h} \pm \delta_h, \quad -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{m_h}, \quad \delta_h = -\frac{\hbar^2}{m_h} \frac{6}{\alpha R^3},$$

причем основной и самый верхний уровни вырождены шестикратно, а первый возбужденный уровень — шестнадцатикратно. (Здесь  $\hbar^2 \alpha^2 / m_h$  представляет собой просто энергию двух невзаимодействующих дырок). Кулоновское расталкивание приводит к изменению волновой функции основного состояния, и она формируется из волновых функций, соответствующих нахождению каждой дырки на «своем» центре. Расчеты показывают, что поправка к энергии для основного уровня  $+e^2/R\kappa$ , а расщепление  $\Delta_h \sim 1/R^6$ . Однако имеется несколько вкладов в  $\Delta_h$ , убывающих как  $R^{-6}$ : вклад, обусловленный расталкиванием дырок  $\sim e^2 \alpha / \kappa (\alpha R)^6$ , и вклад из-за притяжения «своей» дырки к «чужому» центру  $\sim \delta_h^2 \kappa / e^2 \alpha$ . В рамках метода потенциалов нулевого радиуса «притяжение» много больше, чем «расталкивание»  $\hbar^2 \alpha^2 / m_h \gg e^2 \alpha / \kappa$ . Вычисления приводят к величине  $\Delta_h$ :

$$\Delta_h = \frac{1}{2} \delta_h^2 \left\{ \frac{a+b}{ab-c^2} - \frac{1}{d} \right\}, \quad (22)$$

где

$$a = \frac{e^2 \alpha}{2\kappa} \left\{ I_3 + \frac{4}{25} \left( I_1 + \frac{4}{49} I_4 - \frac{4}{7} I_5 \right) \right\},$$

$$b = \frac{e^2 \alpha}{2\kappa} \left\{ I_3 + \frac{4}{25} \left( I_1 + \frac{4}{49} I_4 + \frac{4}{7} I_5 \right) \right\},$$

$$c = -\frac{e^2 \alpha}{25\kappa} I_1,$$

$$d = \frac{e^2 \alpha}{2\kappa} \left\{ I_3 + \frac{4}{25} \left( \frac{4}{49} I_4 - I_1 \right) \right\},$$

$$I_3 = \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 r_1 r_2^2 (R_0^2(r_1) R_0^2(r_2) + R_2^2(r_1) R_2^2(r_2) + 2R_0^2(r_1) R_2^2(r_2)) \alpha,$$

$$I_4 = \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \frac{r_2^4}{r_1} R_2^2(r_1) R_2^2(r_2) \alpha,$$

$$I_5 = \int_0^\infty dr_1 \int_0^{r_1} dr_2 \frac{r_2^4}{r_1} R_0(r_1) R_2(r_1) R_2^2(r_2) \alpha.$$

Численные значения интегралов равны

$$I_3 = \frac{1}{10} \left\{ \frac{1}{28} (4996 \ln 2 - 1431 \ln 3) - \frac{288}{5} \right\},$$

$$I_4 = \frac{1}{28} \left\{ \frac{1}{8} (837 \ln 2 - 1248 \ln 3) - 6 \right\},$$

$$I_5 = \frac{1}{160} \left\{ (544 \ln 2 - 459 \ln 3) + 132 \right\},$$

а величина

$$\Delta_h \approx 54 \frac{\alpha^3 \hbar^4 \kappa}{e^2 m_h (\alpha R)^6}.$$

Таким образом, в настоящей работе показано, что в случае двух глубоких центров донорного типа суммарный спин двух электронов равен нулю при любых расстояниях между примесями  $R$ . Для двух акцепторов в кубических полупроводниках, описываемых в приближении потенциала нулевого радиуса, проекция полного момента двух дырок на ось, соединяющую примеси, также равна нулю в случаях, когда расстояние  $R \gg 1/\alpha$  или  $R \ll 1/\alpha$ . Такой антиферромагнитный порядок для дырок на акцепторе В (бора) в кристаллах Si (кремния) наблюдается экспериментально [1,2].

Для дырки, связанной на акцепторе вблизи поверхности (бесконечно высокий потенциальный барьер), основное состояние носителя двукратно вырождено и отвечает проекции момента на нормаль к поверхности, равной  $\pm 3/2$ . Это означает, что возможно наблюдать сигнал ЭПР от таких центров в магнитном поле, перпендикулярном поверхности (магнитный дипольный переход  $3/2 \rightarrow -3/2$  запрещен в сферическом приближении, однако он разрешается с учетом кубической симметрии кристалла).

Антиферромагнитный спиновый порядок дырок может быть качественно понят, если считать, что наличие двух дефектов эквивалентно некоторому эффективному электрическому полю или одноосной деформации. В обоих случаях можно написать эффективный гамильтониан, описывающий взаимодействие дырок с этим полем в виде

$$H_{\text{эфф}} = \Delta [(J_{n_z}^2(1) - 5/4) + (J_{n_z}^2(2) - 5/4)],$$

где  $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ , индексы 1 и 2 относятся к разным дыркам.

Тогда, вычисляя матричные элементы оператора  $H_{\text{эфф}}$  на двухчастичных волновых функциях, описывающих величины  $F = 2$  и  $F = 0$  (дырки, локализованы на одном центре), можно увидеть [13,14], что основной уровень представляет собой синглет (при любом знаке  $\Delta$ ), отвечающий проекции  $F$  на ось  $R$ , равной нулю.

#### Список литературы

- [1] Алтухов П.Д., Ельцов К.Н., Рогачев А.А. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. № 1. С. 30-34.
- [2] Алтухов П.Д., Ельцов К.Н., Рогачев А.А. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 2. С. 552-564.
- [3] Обухов С.А. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 1. С. 59-61.
- [4] Аверкиев Н.С., Гай В., Обухов С.А., Рогачев А.А. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 2. С. 45-47.
- [5] Горьков Л.П., Питаевский Л.П. // ДАН СССР. 1963. Т. 151. № 4. С. 822-825.
- [6] Herring C., Flicker M. // Phys. Rev. 1964. V. 134A. P. 362-369.
- [7] Перель В.И., Яссиевич И.Н. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 1. С. 237-245.
- [8] Аверкиев Н.С., Ребане Ю.Т., Яссиевич И.Н. // ФТП. 1985. Т. 19. № 1. С. 96-101.
- [9] Аверкиев Н.С., Родина А.В. // ФТТ. 1993. Т. 35. № 4. С. 1051-1065.
- [10] Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциала нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975. 340 с.
- [11] Luttinger J.M. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1030-1042.
- [12] Меркулов И.А., Иванов М.Г., Эфрос Ал.Л. // ФТП. 1988. Т. 22. № 4. С. 628-632.
- [13] Бир Г.Л., Пикус Г.Е. // ФТТ. 1975. Т. 17. № 5. С. 1284-1294.
- [14] Аверкиев Н.С., Ветров В.А., Гуткин А.А., Меркулов И.А., Никитин Л.П., Решина И.И., Романов Н.Г. // ФТП. 1986. Т. 20. № 9. С. 1617-1622.

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН  
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию  
8 октября 1993 г.