

СПИНОВОЕ УПОРЯДОЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НА ГЛУБОКИХ ДОНОРАХ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

© Н.С.Аверкиев, С.Ю.Ильинский

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 3 июля 1995 г. Принята к печати 10 июля 1995 г.)

Рассчитаны энергетическая структура, характер спинового упорядочения и величина обменного взаимодействия носителей заряда, локализованных на одном или двух донорных центрах в полупроводниках с многодолинной зонной структурой типа Ge или Si в рамках метода потенциалов нулевого радиуса. Показано, что в этих случаях полный спин электронов в основном состоянии равен нулю. Вычислена зависимость энергии уровней от ориентации оси, соединяющей центры, по отношению к главному направлению тензора эффективной массы, а также зависимости расщепления энергетических уровней от расстояния между дефектами.

1. Введение

При исследовании сложных дефектов в полупроводниках, состоящих из нескольких атомов примеси, возникает вопрос не только об их энергетической структуре, но и о характере спинового упорядочения и величине обменного взаимодействия носителей заряда, локализованных на них.

Ранее, в модели потенциала нулевого радиуса, были изучены системы из двух доноров и локализованных на них двух электронов в полупроводниках с простой зоной [1]. Там же исследованы системы из одного и двух глубоких акцепторов с локализованными на них носителями заряда в полупроводниках с так называемой сложной зонной структурой типа валентной зоны Ge или GaAs. В работе [1] вычислены величина и знак обменного взаимодействия двух носителей заряда, локализованных на центре, и показано, что в основном состоянии для двух доноров суммарный спин электронов равен нулю, а для дефектов акцепторного типа проекция полного момента двух дырок на ось, соединяющую центры, также равна нулю.

В работе [2] рассматривалась энергетическая структура системы, состоящей из электрона, локализованного на одном доноре в многодолинном полупроводнике типа Si или Ge. Было учтено влияние короткодействующей части примесного потенциала $V_0(\mathbf{r})$, обусловленной разницей химической природы примесного центра и атома решетки. Масштаб действия $V_0(\mathbf{r})$ порядка постоянной решетки, что намного меньше

эффективного боровского радиуса. Это дало возможность применить метод потенциалов нулевого радиуса [3] и учесть $V_0(\mathbf{r})$ в граничном условии.

В данной работе мы рассмотрим случай двух доноров и локализованных на них одного или двух электронов в многодолинных полупроводниках типа кремния. Применяя метод потенциалов нулевого радиуса в приближении эффективной массы, следует пренебречь зарядом центров, а кулоновское взаимодействие между электронами рассматривать как возмущение. Это справедливо, если выполнено условие $a_B^* \gg \kappa^{-1} \gg a_0$, где a_0 — постоянная решетки, a_B^* — эффективный боровский радиус носителей заряда, κ^{-1} — характерный масштаб убывания волновой функции с расстоянием от центра. Величина κ связана с энергией ионизации центра E_0 соотношением $\kappa = \sqrt{2m|E_0|}/\hbar$. В методе потенциалов нулевого радиуса E_0 рассматривается как параметр. Заметим, однако, что учет заряда неподвижного центра приведет только к перенормировке E_0 , но не к расщеплению уровня. В дополнение к [1] мы учтем влияние «химического» потенциала примеси $V_0(\mathbf{r})$ и покажем, что это приводит к иному закону изменения энергетического расщепления подуровней с расстоянием R между донорными центрами. Будет рассмотрена эллипсоидальная изоэнергетическая поверхность при различном наклоне продольной оси эллипсоида эффективных масс к прямой, соединяющей примесные центры. Рассчитаны энергетические уровни, величина и знак обменного взаимодействия носителей заряда при больших расстояниях R между примесными центрами и показано, что в основном состоянии спины электронов противоположно направлены (полный спин равен 0).

2. Дефект, состоящий из двух глубоких доноров

Рассмотрим энергетическую структуру уровней системы, состоящей из двух примесных центров донорного типа и одного электрона, локализованного на них в многодолинном полупроводнике типа кремния.

Как известно, в кремнии n -типа имеется шесть эквивалентных минимумов энергии (шесть долин), расположенных на осях симметрии 4-го порядка $\langle 100 \rangle$, и энергетический спектр в долинах анизотропен. Основное состояние электрона, локализованного на доноре, вырождено по числу долин. Учет короткодействующего химического потенциала примеси $V_0(\mathbf{r})$ частично снимает это вырождение.

Приведем известные результаты решения задачи об одном донорном центре и локализованном на нем электроном в многодолинном полупроводнике [2]. Выберем систему координат (x', y', z') для каждой долины так, чтобы главная (продольная) ось эллипсоидальной изоэнергетической поверхности z была в плоскости $(x'z')$ под углом ξ к оси z' . Тогда оператор кинетической энергии такой системы будет иметь вид

$$K_i(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \left\{ \left(\nu \cos^2 \xi + \sin^2 \xi \right) \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \left(\nu \sin^2 \xi + \cos^2 \xi \right) \frac{\partial^2}{\partial z'^2} + (1 - \nu) \sin 2\xi \frac{\partial}{\partial x'} \frac{\partial}{\partial z'} + \nu \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right\}, \quad (1)$$

где $\nu = m_{\parallel}/m_{\perp}$; m_{\parallel}, m_{\perp} — компоненты тензора эффективной массы, $l = \pm x, \pm y, \pm z$, а волновая функция, удовлетворяющая граничному условию в рамках метода потенциалов нулевого радиуса

$$\frac{1}{r_{\nu}} \psi \frac{\partial}{\partial r_{\nu}} (r_{\nu} \psi) \Big|_{r_{\nu} \rightarrow 0} = -\kappa, \quad (2)$$

равна

$$\psi(\mathbf{r}') = C_0 \frac{1}{r_{\nu}} \exp(-\kappa r_{\nu}). \quad (3)$$

Полная волновая функция имеет вид

$$\varphi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}') U_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}'}, \quad (4)$$

где

$$r_{\nu} \equiv r_{\nu}(x', y', z') = \left[(\nu \sin^2 \xi + \cos^2 \xi) x'^2 + (\nu \cos^2 \xi + \sin^2 \xi) z'^2 + (\nu - 1) x' z' \sin 2\xi + y'^2 \right]^{1/2},$$

$C_0 = \nu^{1/4} \sqrt{\kappa/\pi}$, $U_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}')$ и \mathbf{k}_0 — блоховская амплитуда и волновой вектор, соответствующие двум зонам; величина κ связана с энергетическим уровнем E_0 системы, отсчитываемым от дна зоны проводимости, соотношением

$$E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \kappa^2. \quad (5)$$

Далее эти данные мы используем для решения задачи об одном электроном, локализованном в системе из двух дефектов донорного типа. Пусть волновая функция такого электрона имеет вид (4), а главная ось эллипсоидальной долины z составляет угол ξ с прямой z' , соединяющей донорные центры. Введем координаты центров $z' = \pm a$ и обозначим расстояние между ними $R = 2a$. Гамильтониан такой системы примет вид

$$\hat{H}_{00} = \hat{H}_{01} + \hat{H}_{02}, \quad (6)$$

где \hat{H}_{01} имеет вид (1) для центра с координатами $(0, 0, a)$, а \hat{H}_{02} — аналогично для центра $(0, 0, -a)$.

Согласно методу потенциалов нулевого радиуса [3], притяжение между электроном и донорами учитывается через граничное условие (2) на каждом центре. Причем r_{ν} принимает значение $r_1 = r_{\nu}(x', y', z' - a)$ для одного центра и $r_2 = r_{\nu}(x', y', z' + a)$ для другого. Тогда, по аналогии с [1,3], волновые функции системы есть

$$\psi_{S,A}(\mathbf{r}') = C_{S,A} \left[\frac{\exp(-\kappa_{S,A} r_1)}{r_1} \pm \frac{\exp(-\kappa_{S,A} r_2)}{r_2} \right], \quad (7)$$

где

$$C_{S,A}^2 = \sqrt{\nu} \frac{\kappa_{S,A}}{4\pi [1 \pm \exp(-\kappa_{S,A} R)]}. \quad (8)$$

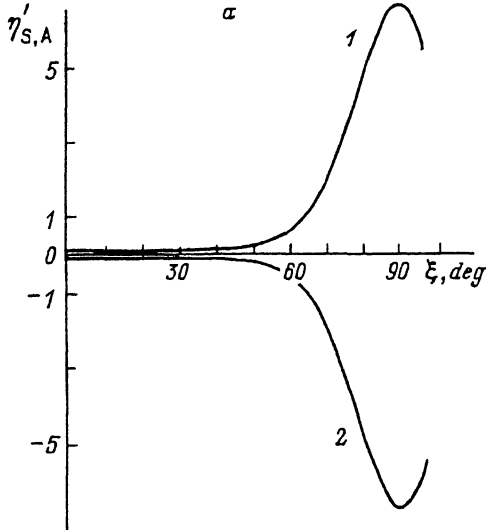


Рис. 1. Зависимость энергии уровней для электрона, локализованного на двух глубоких донорах, от угла ξ и расстояния между донорами R при $\kappa R = 5$.

1 — энергия η'_S , отвечающая состоянию, симметричному к перестановке центров, 2 — то же для состояния, волновая функция которого изменяет знак при перестановке частиц ($\eta'_{S,A}$), $\eta'_{S,A} = (\eta_{S,A} - 5) \cdot 10^3$.

Величины $\kappa_{S,A}$ определяются уравнением

$$\kappa_{S,A} = \kappa_{S,A}(\xi) = \kappa \pm \frac{\exp(-\kappa_{S,A} R \sqrt{\nu(\xi)})}{R \sqrt{\nu(\xi)}}, \quad \nu(\xi) = \nu \cos^2 \xi + \sin^2 \xi, \quad (9)$$

а уровни энергии —

$$E_{S,A} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \kappa_{S,A}^2.$$

Зависимость $E_{S,A} = E_{S,A}(\xi)$ изображена на рис. 1 при $\kappa R = 5$ и на рис. 2 при $\kappa R = 1$, где

$$\eta_{S,A} = R \sqrt{2m_{\perp} |E_{S,A}|} / \hbar.$$

В случае, если центры находятся далеко друг от друга, т.е. $\kappa_S R \gg 1$, $\kappa_S \simeq \kappa_A$, то разница между E_S и E_A составляет

$$\Delta E = E_S - E_A \simeq -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} 4\kappa \frac{\exp(-\kappa R \sqrt{\nu(\xi)})}{R \sqrt{\nu(\xi)}}. \quad (10)$$

Заметим, что основной уровень $E_S(\xi = 0)$ (когда продольная ось долины z совпадает с осью z' , соединяющей центры) глубже, чем $E_S(\xi = \pi/2)$, на величину $(\hbar^2 \kappa / m_{\perp} R) \exp(-\kappa R)$ при $\kappa R \gg 1$.

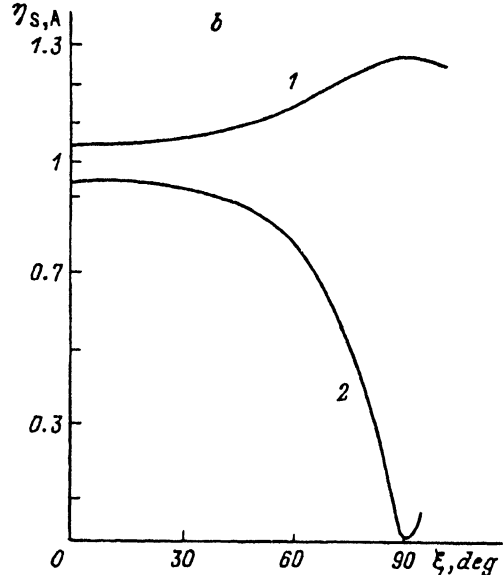


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, но для случая $\kappa R = 1$.

Теперь рассмотрим химический сдвиг $V_Q(\mathbf{r})$, который будем учитывать аналогично [2]. Тогда волновые функции электрона, локализованного на одном донорном центре в кремнии могут быть записаны в виде

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{l=\pm x, \pm y, \pm z} A_{i,l} \varphi_l(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \dots, 6, \quad (11)$$

где

$$A_{1,l} = 1/\sqrt{6}, \quad A_{2,\pm x} = A_{3,\pm y} = A_{4,\pm z} = \pm 1/\sqrt{2},$$

$$A_{5,\pm x} = -A_{5,\pm y} = 1/2, \quad A_{6,\pm x} = A_{6,\pm y} = 1/2\sqrt{3}, \quad A_{6,\pm z} = -1/\sqrt{3};$$

$\varphi_l(\mathbf{r})$ дается формулой (4) с волновыми векторами \mathbf{k}_{0l} , соответствующими двум l -й зонам, $l = \pm x, \pm y, \pm z$.

Энергетические уровни такой системы:

$$E_S = V_i + V_g + 4V_f \quad \text{— основной (синглетный),}$$

$$E_d = V_i + V_g - 2V_f \quad \text{— первый возбужденный (дуплетный),}$$

$$E_t = V_i - V_g \quad \text{— триплетный.} \quad (12)$$

Здесь

$$V_i = V_{ll}, \quad V_g = V_{l,-l} < 0, \quad V_f = V_{l,q}, \quad l \neq q,$$

$$V_{l,q} = \langle \varphi_l(\mathbf{r}) | \hat{V}_0(\mathbf{r}) | \varphi_q(\mathbf{r}) \rangle,$$

$\hat{V}(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r})$ — короткодействующая часть примесного потенциала, обусловленная разной химической природой примеси и атома решетки. В случае двух центров волновые функции локализованного электрона могут быть сконструированы из (11)

$$\psi_{S,A;i} = \sum_l A_{i,l} \varphi_{S,A;l}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, \dots, 6, \quad l = \pm x, \pm y, \pm z. \quad (13)$$

где

$$\varphi_{S,A;l}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_{0l}\mathbf{r}} U_{\mathbf{k}_{0l}}(\mathbf{r}) \psi_{S,A;l}(\mathbf{r}, E_{S,A;l}),$$

$$\psi_{S,A;l}(\mathbf{r}, E_{S,A;l}) = C_{S,A;l} \left\{ \frac{\exp[-\kappa_{S,A;l} r_l(z+a)]}{r_l(z+a)} \pm \frac{\exp[-\kappa_{S,A;l} r_l(z-a)]}{r_l(z-a)} \right\},$$

$r_l(z) = (r_{\perp l}^2 + \nu r_{\parallel l}^2)^{1/2}$, $r_{\perp l}$, $r_{\parallel l}$ — перпендикулярная и параллельная составляющие радиуса-вектора \mathbf{r} к продольной оси i -й долины.

$$\kappa_{S,A;l} = \begin{cases} \kappa_{S,A}(\xi = \pi/2), & l = \pm x, \pm y, \\ \kappa_{S,A}(\xi = 0), & l = \pm z, \end{cases}$$

$$C_{S,A;l}^2 = \sqrt{\nu} \frac{\kappa_{S,A;l}}{4\pi[1 \pm \exp(-\kappa_{S,A;l} R)]}, \quad E_{S,A;l} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \kappa_{S,A;l}^2.$$

Здесь $R = 2a$ — расстояние между примесными центрами, находящимися на оси z в точках $z = \pm a$.

Далее, вычисляя на функциях (13) матричные элементы гамильтониана системы

$$\hat{H}_{00}(\mathbf{r}) = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad \hat{H}_{1,2} = \hat{K}(x, y, z \pm a) + \hat{V}_0(\mathbf{r}), \quad (14)$$

где $\hat{K}(\mathbf{r})$ — матричный оператор (1) с ненулевыми диагональными элементами, равными $K_l(\mathbf{r})$, по правилу

$$\langle \psi_{S,A;l} | \hat{H}_{00} | \psi_{S,A;q} \rangle = E_{S,A;l} \delta_{lq} + a_0^3 \tilde{V}_{lq} \left[\lim_{r \rightarrow r_1} + \lim_{r \rightarrow r_2} \right] \psi_{S,A;l} \psi_{S,A;q}, \quad (15)$$

где

$$\tilde{V}_{lq} = \langle U_{\mathbf{k}_{0l}} | \tilde{V}_0(\mathbf{r}) | U_{\mathbf{k}_{0q}} \rangle,$$

$$\hat{V}_{ll} = \alpha/a_0, \quad \hat{V}_{l,-l} = \beta/a_0, \quad \hat{V}_l = \gamma/a_0, \quad l \neq \pm q,$$

$r_{1,2} = (a_0, a_0, \pm a)$, a_0 — постоянная решетки, $a = R/2$, получим матрицу 12×12 . Шесть ее собственных значений — это уровни энергии, соответствующие симметричным по перестановке центров функциям $\{\psi_{S,i}\}$, и шесть — антисимметричным $\{\psi_{A,i}\}$, $i = 1, \dots, 6$. Их энергии равны

$$E_{1,6}^{S,A} = (1/2) (E_{S,A} + E'_{S,A}) + (1/2) \left\{ (\alpha + \beta + 2\gamma) f_{S,A} + (\alpha + \beta) g_{S,A} \pm \left[[E_{S,A} - E'_{S,A} + (\alpha + \beta + 2\gamma) f_{S,A} - (\alpha + \beta) g_{S,A}]^2 + 32\gamma^2 f_{S,A} g_{S,A} \right]^{1/2} \right\}, \quad (16)$$

$$E_2^{S,A} = E_3^{S,A} = E_{S,A} + (\alpha - \beta) f_{S,A},$$

$$E_4^{S,A} = E'_{S,A} + (\alpha - \beta) g_{S,A}.$$

$$E_5^{S,A} = E_{S,A} + (\alpha + \beta - 2\gamma) f_{S,A},$$

где $f_{S,A} = [2/(\nu + 2)]C_{S,A;x}^2$, $g_{S,A} = [2/(\nu + 2)]C_{S,A;z}^2$, $E_{S,A} = E_{S,A;x}$, $E'_{S,A} = E_{S,A;z}$. Из них основным является E_1^S , а первым возбужденным E_1^A . Расчет разности энергий между ними показывает, что при $|E_S - E'_S|/\gamma = \eta \gg 1$ и $\nu \gg 1$

$$\Delta E = E_1^S - E_1^A \simeq 2(E_S - E'_S) - \frac{(\alpha + \beta + 2\gamma)\sqrt{\nu}}{\pi(\nu + 2)} \kappa e^{-\kappa R} + 0(\eta^{-1}) < 0, \quad (17)$$

поскольку обычно $\alpha, \beta, \gamma > 0$. При $\eta \ll 1$, $\nu \gg 1$

$$\Delta E = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\kappa\sqrt{2\nu}}{\pi(\nu + 2)} \right) (\alpha + \beta + 2\gamma)e^{-\kappa R} + 0(\eta) < 0, \quad (18)$$

где

$$E_S - E'_S \simeq -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{2\kappa}{R} e^{-\kappa R} < 0, \quad \kappa R \gg 1.$$

Волновая функция, отвечающая основному состоянию E_1^S , симметрична при перестановке координат центров

$$\psi_{E_1^S}(\mathbf{r}) = \theta_+ \psi_{S,1}(\mathbf{r}) + \theta_- \psi_{S,6}(\mathbf{r}), \quad (19)$$

где

$$\theta_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1+A} \pm \sqrt{1-A} \right),$$

$$A = \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{E_S - E'_S + (\alpha + \beta + 2\gamma)(f_S - g_S)}{\sqrt{[E_S - E'_S + (\alpha + \beta + 2\gamma)f_S - (\alpha + \beta)g_S]^2 + 32\gamma^2 f_S g_S}}.$$

Теперь рассмотрим частный случай данной задачи, когда состояния в разных долинах не смешиваются, т.е. $\beta = \gamma = 0$, $\alpha = 0$. Такая система будет иметь два уровня энергии — основной $\tilde{E}_S(\xi)$ и возбужденный $\tilde{E}_A(\xi)$, где ξ — угол между продольной осью эллипсоидальной изоэнергетической поверхности и осью, соединяющей центры. А влияние химического сдвига $\hat{V}_0(\mathbf{r})$ сведется к изменению зависимости $\Delta\tilde{E}(\xi) = \tilde{E}_S(\xi) - \tilde{E}_A(\xi)$ от расстояния R между центрами:

$$\Delta\tilde{E}(\xi) \simeq -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} 4\kappa \frac{e^{-\kappa R\sqrt{\nu(\xi)}}}{R\sqrt{\nu(\xi)}} - \frac{\alpha\kappa}{\pi} \frac{\sqrt{\nu} e^{-\kappa R\sqrt{\nu(\xi)}}}{[\nu + 2 + (\nu - 1)\sin 2\xi]} < 0, \quad \kappa R \gg 1. \quad (20)$$

При $\nu = 1$ пропадает зависимость от угла ξ :

$$\Delta\tilde{E}(\xi) \Big|_{\nu=1} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} 4\kappa e^{-\kappa R}/R - \frac{\alpha\kappa}{3\pi} e^{-\kappa R} < 0. \quad (21)$$

На больших расстояниях R между центрами основной вклад в (21) дает второе слагаемое, которое учитывает наличие короткодействующей части химического потенциала примеси $\hat{V}_0(\mathbf{r}) = V_0\delta(\mathbf{r})$ параметром $\alpha > 0$. Это дополняет результат работы [1].

3. Система двух электронов на двух донорных центрах

Опишем энергетическую структуру и спиновое упорядочение для двух электронов, локализованных на двух глубоких донорах в полупроводниках типа Si. Гамильтониан такой системы

$$\hat{H} = \hat{H}_{00}(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_{00}(\mathbf{r}_2) + \hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (22)$$

где $\hat{H}_{00}(\mathbf{r})$ дается формулой (14), $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — радиус-векторы, описывающие носители заряда.

Метод потенциалов нулевого радиуса применим здесь, если выполнено $e^2 \kappa \ll \hbar^2 \kappa^2 \varepsilon / m$. Кулоновское взаимодействие между электронами $\hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -(e^2 / \varepsilon) / |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ будем полагать малым возмущением [4], т.е. $e^2 \kappa \ll V_0 a_0 \kappa \varepsilon$. Тогда смешиваются только два первых уровня энергии каждого электрона. В таком приближении волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned} \psi'_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left\{ \psi_{S1}(\mathbf{r}_1) \psi_{S1}(\mathbf{r}_2) + \psi_{A1}(\mathbf{r}_1) \psi_{A1}(\mathbf{r}_2) \right\} / \sqrt{2}, \\ \psi''_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left\{ \psi_{S1}(\mathbf{r}_1) \psi_{S1}(\mathbf{r}_2) - \psi_{A1}(\mathbf{r}_1) \psi_{A1}(\mathbf{r}_2) \right\} / \sqrt{2}, \\ \psi^0_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left\{ \psi_{S1}(\mathbf{r}_1) \psi_{A1}(\mathbf{r}_2) + \psi_{A1}(\mathbf{r}_1) \psi_{S1}(\mathbf{r}_2) \right\} / \sqrt{2}, \\ \psi^0_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \left\{ \psi_{S1}(\mathbf{r}_1) \psi_{A1}(\mathbf{r}_2) - \psi_{A1}(\mathbf{r}_1) \psi_{S1}(\mathbf{r}_2) \right\} / \sqrt{2}. \end{aligned} \quad (23)$$

Вычисляя матричные элементы (22) на функциях (23), получим следующие энергетические уровни системы:

$$\begin{aligned} E_{S', S''} &= \Delta + (1/2)(I_2 + I_3) \pm \left[I_4^2 + \left(\delta + (I_2 - I_3)/2 \right)^2 \right]^{1/2}, \\ E_{A^0} &= \Delta + I_1 - I_4, \\ E_{S^0} &= \Delta + I_1 + I_4, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\Delta = H^S + H^A, \quad \delta = H^S - H^A, \quad H^{S,A} = \left\langle \psi_{S,A;1}(\mathbf{r}) | \hat{H}_{00}(\mathbf{r}) | \psi_{S,A;1}(\mathbf{r}) \right\rangle,$$

$$I_1 = J \left(|\psi_{S1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{A1}(\mathbf{r}_2)|^2 \right),$$

$$I_{2,3} = J \left(|\psi_{S,A;1}(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_{S,A;1}(\mathbf{r}_2)|^2 \right),$$

$$I_4 = J \left(\psi_{S1}(\mathbf{r}_1) \psi_{A1}^*(\mathbf{r}_1) \psi_{S1}(\mathbf{r}_2) \psi_{A1}^*(\mathbf{r}_2) \right),$$

$$J(F) = \iint d^3 r_1 d^3 r_2 V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) F.$$

Основной уровень $E_{S'}$ соответствует нулевому полному спину системы (спины электронов противоположны). Для величины разницы между

основным $E_{S'}$ и первым возбужденным E_{A^0} уровнями вычисления дают (при больших расстояниях между центрами $\kappa R \gg 1$)

$$\Delta E = E_{S'} - E_{A^0} = e^2 \kappa^2 \left\{ 2(J_{xx} + J_{xy} + 2J_{xz}) + J_{zz} \right\} / 9\varepsilon - 2|\delta| e^{-\kappa R}, \quad \kappa R \gg 1, \quad (25)$$

где

$$J_{lq} = \frac{\nu \kappa}{4\pi^2} \iint d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \varphi_l(r_1) \varphi_q(r_2) \sim e^{-2\kappa R} / \kappa R,$$

$$\varphi_l(\mathbf{r}) = \exp \left\{ -\kappa \left[r_l(z+a) + r_l(z-a) \right] \right\},$$

где $r_l(z)$ см. в (13). А величина δ

$$\delta \approx -\frac{\kappa \sqrt{\nu}}{3\pi(\nu+2)} \left[2(\alpha + \beta + 2\gamma) e^{-\kappa R} + (\alpha + \beta + 8\gamma) e^{-\kappa R \sqrt{\nu}} \right] -$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \frac{4\kappa}{3R} \left(2e^{-\kappa R} + \frac{1}{\sqrt{\nu}} e^{-\kappa R \sqrt{\nu}} \right),$$

$$\delta(\nu=1) \simeq -\frac{\alpha + \beta + 4\gamma}{3\pi} \kappa e^{-\kappa R} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{4\kappa}{R} e^{-\kappa R}. \quad (26)$$

Таким образом, поскольку второе слагаемое в (25) по порядку величины превосходит первое, в основном состоянии спины электронов противоположно направлены, а волновая функция основного состояния E'_S

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_+ \psi'_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V_- \psi''_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (27)$$

где

$$V_{\pm} = \left(\sqrt{1+D} \pm \sqrt{1-D} \right) / 2,$$

$$D = \frac{\left(\delta + (1/2)(I_2 - I_3) \right)}{\left([\delta + (1/2)(I_2 - I_3)]^2 + I_4^2 \right)^{1/2}}.$$

4. Система одного донорного центра

В заключение рассмотрим систему двух электронов, локализованных на одном донорном центре в многодолинном полупроводнике типа Si. Для сферической изоэнергетической зоны эта задача решена в методе потенциалов нулевого радиуса [4]. Мы выясним, как распределена электронная плотность по состояниям в долинах. С одной стороны, расталкивание одноименных частиц приводит в конечном счете к распределению частиц по разным долинам, а притяжение за счет короткодействующего химического потенциала примеси $\hat{V}_0(\mathbf{r})$, — наоборот. Этим данная задача качественно отличается от случая однодолинной зонной структуры.

Запишем гамильтониан системы в виде

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \hat{K}(\mathbf{r}_1) + \hat{K}(\mathbf{r}_2) + \hat{V}_0(\mathbf{r}_1) + \hat{V}_0(\mathbf{r}_2) + \hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (28)$$

где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — координаты 1-го и 2-го электронов.

Кулоновское взаимодействие $\hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ между электронами учтем, как и раньше, по теории возмущения. Тогда волновые функции системы составим из функций (11) задачи [2]:

$$\psi_{nn}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2), \quad n = 1, 2, \dots, 6,$$

$$\psi_{n,m;S,A}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[\psi_n(\mathbf{r}_1)\psi_m(\mathbf{r}_2) \pm \psi_m(\mathbf{r}_1)\psi_n(\mathbf{r}_2) \right] / \sqrt{2}, \quad n \neq m. \quad (29)$$

Рассчитывая на них матричные элементы (28), получим систему из 36 уравнений энергии. Основной уровень при любом соотношении параметров — невырожденный, с полным спином электронов равным нулю

$$E_{\text{гр}} = (A + B)/2 + 2V_i + V_g \left(4 + \sqrt{36 + 4\eta + \eta^2} \right), \quad (30)$$

где $V_i, V_g < 0$ определены в (12),

$$A = |\langle \varphi_x(\mathbf{r}_1)\varphi_x(\mathbf{r}_2) | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \varphi_x(\mathbf{r}_1)\varphi_x(\mathbf{r}_2) \rangle|,$$

$$B = |\langle \varphi_x(\mathbf{r}_1)\varphi_y(\mathbf{r}_2) | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \varphi_x(\mathbf{r}_1)\varphi_y(\mathbf{r}_2) \rangle|,$$

$\varphi_l(\mathbf{r})$ определены в (11), $\eta = (A - B)/2|V_g| > 0$.

Координатная часть волновой функции основного состояния симметрична при перестановке частиц

$$\psi_{\text{гр}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l,q} F_{lq} \varphi_l(\mathbf{r}_1)\varphi_q(\mathbf{r}_2), \quad l, q = \pm x, \pm y, \pm z, \quad (31)$$

где

$$F_{lq} = \begin{cases} [(1 - \sqrt{2})\sqrt{1 + D} + (1 + \sqrt{2})\sqrt{1 - D}] / 12, & q = \pm l, \\ \left[\left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \sqrt{1 + D} + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \sqrt{1 - D} \right] / 12, & q \neq \pm l, \end{cases}$$

$$D = \frac{4\sqrt{2}\eta}{3\sqrt{36 + 4\eta + \eta^2}}.$$

Поэтому, поскольку коэффициент $F_{ll'}$ в (31) при волновых функциях одноименных долин ($l = \pm q$) меньше, чем при разноименных ($l \neq l'$), то частицам выгоднее находиться в разных долинах, чем в одной. Разница между основным $E_{\text{гр}}$ и первым возбужденным дуплетным уровнем E_{dupl} , отвечающим полному спину, равному 2, составляет

$$\Delta E = E_{\text{гр}} - E_{\text{dupl}} = V_g \left(-\eta + \sqrt{\eta^4 + 4\eta + 36} \right) < 0. \quad (32)$$

Максимальное значение $\Delta E_{\text{max}} = 6V_g$ достигается при $\eta = 0$, а минимальное $\Delta E_{\text{min}} = 2V_g$ при $\eta \rightarrow \infty$.

Подведем коротко результаты данной работы. Для системы, состоящей из одного электрона, локализованного на двух глубоких донорах, в полупроводниках с простым параболическим законом дисперсии разница между основным уровнем, соответствующим состоянию, симметричному по перестановке частиц, и вторым энергетическим уровнем, соответствующим антисимметричному состоянию, имеет вид

$$\tilde{E}_S - \tilde{E}_A \approx -\frac{\hbar^2}{2m} 4\kappa \frac{e^{-\kappa R}}{R} - \frac{V_0 a_0 \kappa}{3\pi} e^{-\kappa R} < 0, \quad \kappa R \gg 1,$$

где a_0 — постоянная решетки, κ — параметр, связанный с энергией ионизации E_0 центра.

Если химический потенциал примеси $\tilde{V}_0(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r})$ имеет ненулевое значение, то он определит основной вклад (по порядку величины $\hbar^2/mRa_0V_0 \ll 1$) в это выражение (второе слагаемое) на больших расстояниях R между примесными центрами. Это даст иную зависимость от R , нежели в работе [1].

Для той же системы, но в многодолинном полупроводнике типа Si, возникают восемь синглетных и два дуплетных уровня энергии. Основной синглетный уровень E_1^S отвечает симметричной по перестановке центров координатной части волновой функции, а разница между ним и первым возбужденным синглетным антисимметричным уровнем E_1^A имеет вид

$$E_1^S - E_1^A \approx -\frac{\hbar^2}{2m} 4\kappa \frac{e^{-\kappa R}}{R} - \frac{(\alpha + 5\beta)}{3\pi} \kappa e^{-\kappa R} < 0, \quad \alpha > 0, \beta > 0, \kappa R \gg 1$$

(параметры α и β связаны с V_0).

Для системы из двух электронов на двух донорах в многодолинном полупроводнике типа Si, благодаря кулоновскому взаимодействию носителей и при условии $e^2\kappa \ll \varepsilon V_0 a_0 \kappa$, оказывается, что в основном состоянии полный спин равен 0, а величина энергетического расщепления между основным и первым возбужденным уровнем, в котором полный спин системы равен 1, составляет

$$\Delta E \approx e^2 \kappa J_{\text{ex}}/\varepsilon - 2|\delta|e^{-\kappa R}, \quad \kappa R \gg 1,$$

где $J_{\text{ex}} \sim e^{-2\kappa R}/\kappa R$ — обменный интеграл, учитывающий кулоновское расталкивание электронов,

$$\delta \simeq -\frac{(\alpha + 5\beta)}{3\pi} \kappa e^{-\kappa R} - \frac{\hbar^2}{2m} 4\kappa \frac{e^{-\kappa R}}{R}.$$

Здесь первое слагаемое (обменный интеграл), «стремящееся» направить спины электронов параллельно (полный спин равен 1), мало по порядку величин $e^2/\kappa R V_0 a_0 \ll 1$, $\kappa R \gg 1$ по сравнению со вторым, отвечающим полному спину, равному 0. Основной вклад в δ (26) может давать первое слагаемое, появляющееся при учете химического сдвига $\tilde{V}_0(\mathbf{r}) = V_0 \delta(\mathbf{r})$.

Для системы двух электронов на одном донорном центре в Si при учете химического потенциала $\hat{V}_0(\mathbf{r})$ мы получим 36 уровней энергии. В основном состоянии E_{gr} полный спин равен 0, а носители заряда стремятся расположиться преимущественно по разным долинам. В первом возбужденном состоянии E_{dupl} полный спин равен 1, и разница $E_{gr} - E_{dupl} = \Delta E$ имеет вид

$$\Delta E = V_g \left(-\eta + \sqrt{\eta^2 + 4\eta + 36} \right) < 0,$$

где

$$\eta = (A - B)/2|V_g| > 0, \quad V_g \sim V_0.$$

Матричные элементы A и B приведены в (30), они учитывают кулоновское расталкивание носителей, а параметр $V_g < 0$ (12) характеризует влияние химического сдвига $\hat{V}_0(\mathbf{r})$.

Список литературы

- [1] Н.С. Аверкиев, С.Ю. Ильинский. ФТТ, **36**, 503 (1994).
- [2] С.В. Гастев, Э.З. Иманов, Н.С. Соколов, И.Н. Яссиевич. ЖЭТФ, **90**, 1830 (1986).
- [3] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике (Л., Изд-во ЛГУ, 1975).
- [4] Н.С. Аверкиев, Ю.Т. Ребане, И.Н. Яссиевич. ФТП, **19**, 96 (1985).

Редактор Т.А. Полянская

Spin ordering of electrons localized at deep donors in multivalley semiconductors

N.S. Averkiev, S. Yu. Il'inski

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

In the framework of the zero-range potential model calculations of the energy structure, the character of spin ordering and the value of exchange interaction have been made for two electrons localized at one or two donors in Ge- and Si-type semiconductors with the multivalley band structure. It has been shown that the total electron spin is equal to zero in the ground state. Energy levels of these defects are defined as a function of mutual orientation between the axis joining the centers and the main axis of effective mass tensor as well as the dependence of energy levels splitting on center spacing is found.