

К теории анизотропии магнитного момента мелких акцепторных центров в алмазоподобных полупроводниках

© А.В. Малышев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 3 июня 1999 г.)

Для алмазоподобных полупроводников с большой величиной спин-орбитального взаимодействия, таких как Ge и GaAs, рассчитано расщепление спинового квартета подуровней основного состояния мелких акцепторных центров в магнитном поле. Показано, что величина анизотропии этого расщепления сильно зависит от энергии связи и очень чувствительна к малым изменениям зонных параметров Латтинжера. Эти сильные зависимости позволяют использовать расчеты величин g -факторов основного состояния для определения магнитных зонных констант Латтинжера κ и q . В работе предложен новый метод определения этих параметров и рассчитаны их величины для Ge и GaAs.

Изучению электронных состояний мелких акцепторных центров в кубических полупроводниках посвящено большое количество экспериментальных и теоретических работ. В экспериментах по инфракрасному поглощению [1–7], фотопроводимости [8–10] и прочим методам [11–14] были получены спектры с высоким разрешением. Эти результаты были интерпретированы качественно на основе применения теории групп [15] и количественно на основе вариационных [16] и численных [17–19] расчетов состояний акцепторных центров в магнитном поле. В рамках этих методов было получено хорошее согласие теоретически рассчитанных g -факторов с экспериментальными данными для возбужденных состояний. Для основного состояния акцептора как экспериментальные, так и теоретические результаты, полученные различными методами, заметно отличаются, что делает вопрос о g -факторе основного состояния акцепторного центра актуальным. В этой работе приводятся результаты теоретического расчета магнитного момента основного состояния мелких акцепторов для алмазоподобных полупроводников с большой величиной спин-орбитального взаимодействия, анализируется анизотропия магнитного расщепления спинового квартета уровней основного состояния, обсуждается возможность использования расчетов g -фактора основного состояния для определения зонных параметров материала и предлагается новый метод определения магнитных параметров Латтинжера κ и q .

Как хорошо известно, во внешнем магнитном поле локализованные состояния носителей заряда, вырожденные по проекции углового момента, расщепляются (эффект Зеемана). В кубических полупроводниках с большой величиной спин-орбитального взаимодействия (таких, например, как Ge и GaAs) основное состояние дырки, локализованной на мелком акцепторном центре, четырехкратно вырождено по проекции полного углового момента ($F_z = \pm 3/2, \pm 1/2$) [20]. Как было показано [21,22], для квартета уровней с симметрией Γ_8 спиновый гамильтониан, описывающий линейный эффект

Зеемана, в общем случае имеет следующий вид:

$$\hat{H}' = -\mu_B [g_1(F_x H_x + F_y H_y + F_z H_z) + g_2(F_x^3 H_x + F_y^3 H_y + F_z^3 H_z)]. \quad (1)$$

Здесь $\mu_B = e\hbar/(2mc)$ — магнетон Бора, а $F_\alpha (\alpha = x, y, z)$ — проекции полного углового момента локализованной дырки на кристаллографические оси¹

В отличие от простейшего случая спинового дублета, в котором эффект Зеемана изотропен и описывается одним параметром (g -фактором), магнитное расщепление квартета уровней в общем случае зависит от направления магнитного поля и определяется двумя параметрами (g_1 и g_2).

Для расчета этих параметров, описывающих взаимодействие локализованной на акцепторе дырки с магнитным полем, необходимо знать волновую функцию дырки. Вплоть до недавнего времени расчеты волновых функций дырки на акцепторе выполнялись либо на основе вариационных процедур [16,23–25], в рамках которых вид волновой функции угадывается и оценка точности затруднена, либо численными методами (см., например, [19]). В перечисленных работах использовались упрощенные модели, не учитывающие либо гофрировки валентной зоны, либо поправок центральной ячейки к потенциалу акцептора. Как будет показано в данной работе, эти факторы существенно влияют на величину и анизотропию магнитного момента примесного центра (параметры g_1 и g_2).

В работе [26] был предложен новый метод расчета волновой функции основного состояния сферического кулоновского акцептора, основанный на решении системы интегральных уравнений в импульсном представлении. Впоследствии этот метод был обобщен для случая, в котором учтена кубическая симметрия кристаллической решетки [27], а также отличие потенциала притяжения дырки от кулоновского (химический сдвиг) [28,29], что

¹ В литературе часто используют электронные обозначения для нумерации подуровней дырки, при этом знак минус в правой части равенства (1) не пишется.

позволило описать акцепторы с разной энергией связи с высокой степенью точности. В рамках этого метода зависимость волновой функции $\Psi(\mathbf{k})$ от направления волнового вектора \mathbf{k} получается аналитически (с точностью 2%), и волновая функция записывается в компактном и удобном для дальнейших применений виде. Найденные таким образом волновые функции будут использованы в настоящей работе для расчета магнитного расщепления основного состояния акцептора (величин g_1 и g_2). Расчет будет проведен по теории возмущений в первом порядке по магнитному полю.

1. Оператор магнитного момента акцептора

Состояние свободной дырки в четырехкратно вырожденной валентной зоне Γ_8 в присутствии внешнего постоянного магнитного поля описывается гамильтонианом Латтинжера [30]

$$\begin{aligned} \hat{H}_L(\mathbf{H}) = & \frac{1}{m} \left\{ \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \frac{\hat{p}^2}{2} - \gamma_2 (\hat{p}_x^2 \hat{f}_x^2 + \hat{p}_y^2 \hat{f}_y^2 + \hat{p}_z^2 \hat{f}_z^2) \right. \\ & - 2\gamma_3 (\{\hat{p}_x, \hat{p}_y\} \{\hat{f}_x \hat{f}_y\} + \{\hat{p}_y, \hat{p}_z\} \{\hat{f}_y \hat{f}_z\} \\ & + \{\hat{p}_z, \hat{p}_x\} \{\hat{f}_z \hat{f}_x\}) - \kappa \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{JH} \\ & \left. - q \frac{|e|\hbar}{c} (\hat{f}_x^3 H_x + \hat{f}_y^3 H_y + \hat{f}_z^3 H_z) \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}} = \hbar \mathbf{k} - (|e|\hbar/c) \mathbf{A}$ — кинетический импульс дырки, $\mathbf{A} = (1/2)[\mathbf{H} \times \mathbf{r}]$ — векторный потенциал магнитного поля \mathbf{H} , \hat{f}_α ($\alpha = x, y, z$) — матричные операторы проекции спина свободной дырки в валентной зоне, а $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \kappa$ и q — зонные параметры Латтинжера.

Гамильтониан дырки, связанной на акцепторе, кроме оператора кинетической энергии (2) содержит оператор потенциальной энергии, который не зависит от магнитного поля. Потенциал притяжения акцепторного центра может быть представлен в виде суперпозиции дальнего действующего кулоновского потенциала и короткодействующего потенциала центральной ячейки, учет которого позволяет рассматривать акцепторы с различной энергией связи [28,29].

Таким образом, взаимодействие локализованной на акцепторе дырки с магнитным полем описывается оператором (2) и в общем случае зависит от типа примеси (энергия связи акцептора). Выделяя в выражении (2) линейное по магнитному полю возмущение, можно получить оператор "собственного" магнитного момента акцепторного центра, которым он обладает в отсутствие поля. В случае, когда магнитное поле направлено вдоль

оси z , оператор возмущения имеет следующий вид:

$$\hat{H}' = -\hat{M}_z H_z, \quad (3)$$

где \hat{M}_z — оператор z -проекции "собственного" магнитного момента акцепторного центра

$$\begin{aligned} \hat{M}_z = & \mu_B \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \hat{L}_z - 2\gamma_2 \hat{N}_{2z} \right. \\ & \left. - 2\gamma_3 \hat{N}_{3z} + 2\kappa \hat{f}_z + 2q \hat{f}_z^3 \right], \\ \hat{L}_z = & [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{k}}]_z = \hat{x} \hat{k}_y - \hat{y} \hat{k}_x, \quad \hat{N}_{2z} = \hat{x} \hat{k}_y \hat{f}_y^2 - \hat{y} \hat{k}_x \hat{f}_x^2, \\ \hat{N}_{3z} = & (\{\hat{x}, \hat{k}_x\} - \{\hat{y}, \hat{k}_y\}) \{\hat{f}_x, \hat{f}_y\} \\ & + \{\hat{x}, \hat{k}_z\} \{\hat{f}_y, \hat{f}_z\} - \{\hat{y}, \hat{k}_z\} \{\hat{f}_z, \hat{f}_x\}, \end{aligned} \quad (4)$$

где \hat{x}, \hat{y} и $\hat{k}_\alpha = -i\nabla_\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) — компоненты операторов радиус-вектора и волнового вектора дырки.

2. Методы расчета

Сравнивая выражения матричных элементов операторов (1) и (3) для состояний акцептора с z -проекциями полного углового момента $F_z = \pm 3/2$ и $F_z = \pm 1/2$, получим систему двух линейных уравнений для параметров g_1 и g_2

$$\begin{aligned} & \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left\langle \frac{3}{2} \left| \hat{L}_z \right| \frac{3}{2} \right\rangle - 2\gamma_2 \left\langle \frac{3}{2} \left| \hat{N}_{2z} \right| \frac{3}{2} \right\rangle \\ & - 2\gamma_3 \left\langle \frac{3}{2} \left| \hat{N}_{3z} \right| \frac{3}{2} \right\rangle + 2\kappa \left\langle \frac{3}{2} \left| \hat{f}_z \right| \frac{3}{2} \right\rangle \\ & + 2q \left\langle \frac{3}{2} \left| \hat{f}_z^3 \right| \frac{3}{2} \right\rangle = g_1 \frac{3}{2} + g_2 \left(\frac{3}{2} \right)^3, \\ & \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) \left\langle \frac{1}{2} \left| \hat{L}_z \right| \frac{1}{2} \right\rangle - 2\gamma_2 \left\langle \frac{1}{2} \left| \hat{N}_{2z} \right| \frac{1}{2} \right\rangle \\ & - 2\gamma_3 \left\langle \frac{1}{2} \left| \hat{N}_{3z} \right| \frac{1}{2} \right\rangle + 2\kappa \left\langle \frac{1}{2} \left| \hat{f}_z \right| \frac{1}{2} \right\rangle \\ & + 2q \left\langle \frac{1}{2} \left| \hat{f}_z^3 \right| \frac{1}{2} \right\rangle = g_1 \frac{1}{2} + g_2 \left(\frac{1}{2} \right)^3. \end{aligned} \quad (5)$$

Угловыми скобками здесь обозначено интегрирование по всему \mathbf{k} -пространству. Зная волновые функции $\Psi_{F_z}(\mathbf{k})$, можно рассчитать матричные элементы в левой части равенств, тогда при известных параметрах Латтинжера система (5) является неоднородной системой двух линейных уравнений относительно g_1 и g_2 . Угловая зависимость используемых для расчетов волновых функций $\Psi_{F_z}(\mathbf{k})$, была найдена в работах [28,29] в очень компактном аналитическом виде. Это позволило произвести интегрирование матричных элементов по углам аналитически и свести исходные трехмерные интегралы

к одномерным, что существенно упростило дальнейшие расчеты и выражения для параметров g_1 и g_2

$$g_1 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \bar{L}_1 - 2\gamma_3 \bar{N}_1 + 2\kappa \bar{J}_1 + 2q \bar{J}_1^3,$$

$$g_2 = \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \bar{L}_2 - 2\gamma_3 \bar{N}_2 + 2\kappa \bar{J}_2 + 2q \bar{J}_2^3. \quad (6)$$

Здесь

$$\bar{L}_1 = \left\langle \frac{(13 - 7\Delta)\Delta g_{20}(k)^2}{30} + \frac{\Delta(13 + 28\Delta)g_{20}(k)g_{24}(k)}{30\sqrt{21}} + \frac{(1976 - 749\Delta)\Delta g_{24}(k)^2}{4290} \right\rangle,$$

$$\bar{N}_1 = \left\langle \frac{(37 + 17\Delta)g_{20}(k)^2}{120} + \frac{(1781 - 1169\Delta)g_{14}(k)g_{24}(k)}{2860} + \frac{(59 + 64\Delta)g_{20}(k)g_{24}(k)}{40\sqrt{21}} + \frac{(6884 + 4159\Delta)g_{24}(k)^2}{17160} - \frac{(13 + 28\Delta)(7g_{14}(k)g_{20}(k) - 3g_{10}(k)g_{24}(k))}{120\sqrt{21}} + \frac{(-13 + 7\Delta)(-3g_{10}(k)g_{20}(k) + kg_{20}(k)g'_{10}(k) - kg_{10}(k)g'_{20}(k))}{60} - \frac{k(13 + 28\Delta)(g_{20}(k)g'_{14}(k) - g_{14}(k)g'_{20}(k))}{120\sqrt{21}} - \frac{k(13 + 28\Delta)(g_{24}(k)g'_{10}(k) - g_{10}(k)g'_{24}(k))}{120\sqrt{21}} + \frac{k(-1976 + 749\Delta)(g_{24}(k)g'_{14}(k) - g_{14}(k)g'_{24}(k))}{8580} \right\rangle,$$

$$\bar{J}_1 = \left\langle \frac{g_{10}(k)^2 + g_{14}(k)^2}{4} + \frac{(-7 + 10\Delta^2)g_{20}(k)^2}{60} - \frac{(21 + 20\Delta^2)g_{20}(k)g_{24}(k)}{30\sqrt{21}} + \frac{(-1379 + 1070\Delta^2)g_{24}(k)^2}{8580} \right\rangle,$$

$$\bar{J}_1^3 = \left\langle \frac{91(-1 + \Delta^2)g_{20}(k)^2}{240} - \frac{13\sqrt{\frac{7}{3}}(3 + 2\Delta^2)g_{20}(k)g_{24}(k)}{120} + \frac{7(-197 + 107\Delta^2)g_{24}(k)^2}{2640} \right\rangle,$$

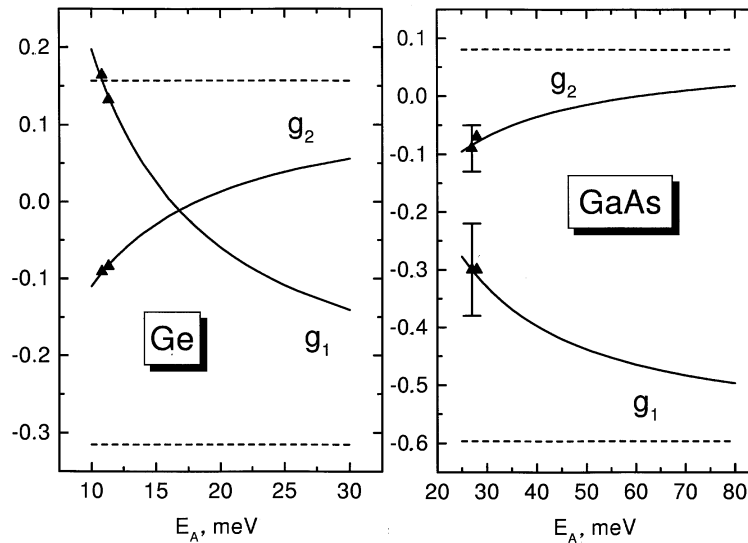
$$\bar{L}_2 = \left\langle \frac{2(-1 + \Delta)\Delta g_{20}(k)^2}{15} - \frac{2\Delta(1 + 4\Delta)g_{20}(k)g_{24}(k)}{15\sqrt{21}} + \frac{2\Delta(-152 + 107\Delta)g_{24}(k)^2}{2145} \right\rangle,$$

$$\bar{N}_2 = \left\langle \frac{(\Delta - 1)(6g_{10}(k)g_{20}(k) + g_{20}(k)^2)}{30} + \frac{(-137 + 167\Delta)g_{14}(k)g_{24}(k)}{715} - \frac{(7 + 8\Delta)g_{20}(k)g_{24}(k)}{10\sqrt{21}} - \frac{(332 + 73\Delta)g_{24}(k)^2}{4290} - \frac{(1 + 4\Delta)(-7g_{14}(k)g_{20}(k) + 3g_{10}(k)g_{24}(k))}{30\sqrt{21}} - \frac{k(-1 + \Delta)(g_{20}(k)g'_{10}(k) - g_{10}(k)g'_{20}(k))}{15} - \frac{k(1 + 4\Delta)(g_{10}(k)g'_{24}(k) - g_{24}(k)g'_{10}(k))}{30\sqrt{21}} - \frac{k(1 + 4\Delta)(g_{14}(k)g'_{20}(k) - g_{20}(k)g'_{14}(k))}{30\sqrt{21}} - \frac{k(-152 + 107\Delta)(g_{24}(k)g'_{14}(k) - g_{14}(k)g'_{24}(k))}{2145} \right\rangle,$$

$$\bar{J}_2^3 = \left\langle \frac{g_{10}(k)^2 + g_{14}(k)^2}{4} - \frac{(-13 + 10\Delta^2)g_{20}(k)^2}{60} + \frac{(39 + 20\Delta^2)g_{20}(k)g_{24}(k)}{30\sqrt{21}} - \frac{(-2561 + 1070\Delta^2)g_{24}(k)^2}{8580} \right\rangle,$$

$$\bar{J}_2 = \left\langle \frac{(1 - \Delta^2)g_{20}(k)^2}{15} + \frac{2(3 + 2\Delta^2)g_{20}(k)g_{24}(k)}{15\sqrt{21}} - \frac{(-197 + 107\Delta^2)g_{24}(k)^2}{2145} \right\rangle, \quad (7)$$

где $\Delta = \gamma_3 / \gamma_2$, а угловыми скобками обозначено интегрирование по модулю волнового вектора: $\langle f(k) \rangle = f_0^\infty f(k)k^2 dk$. Функции $g_{10}(k)$, $g_{14}(k)$, $g_{20}(k)$ и $g_{24}(k)$ определяют зависимость волновой функции основного состояния акцептора $\Psi_{F_2}(\mathbf{k})$ от модуля волнового вектора. В общем случае эти функции рассчитываются численно методом, описанным в работах [28,29]. Штрихом у функций $g_{ij}(k)$ обозначено дифференцирование по модулю волнового вектора.



Зависимость величин g -факторов основного состояния акцептора (g_1 и g_2) от энергии связи для Ge и GaAs.

В случае, когда известны экспериментальные значения величин g_1 и g_2 для одного или нескольких разных акцепторных центров (отличающихся энергией связи основного состояния), выражения (6) превращаются в уравнения на зонные параметры, что позволяет решать обратную задачу, т.е. определить зонные параметры по известным величинам g -факторов. Для каждого типа примеси (энергии связи) можно рассчитать волновые функции и матричные элементы (7), входящие в систему (6), которая является при этом системой двух линейных уравнений на магнитные параметры κ и q . Таким образом, знание величин g_1 и g_2 для одного акцептора позволяет рассчитать магнитные зонные константы.

Если известны g -факторы для нескольких разных центров, то магнитные параметры Латтинжера можно получить, минимизируя среднеквадратичное отклонение теоретических величин от экспериментальных как функцию зонных параметров. Такой подход был использован, например, в работе [19] для получения полного набора параметров Латтинжера для GaAs на основе сравнения расчетов расщепления магнитных подуровней основного и первых возбужденных состояний акцептора с экспериментальными данными из работы [3] в широком диапазоне магнитных полей. Однако в [19] не были учтены поправки центральной ячейки к примесному потенциалу и вклад кубического по спине дырки оператора $2\mu_B q \hat{J}_\alpha^3$ в магнитный момент акцептора, а магнитная константа κ не считалась независимым параметром и вычислялась по приближенной формуле. Как будет показано далее, это могло привести к изменению величины g -факторов основного состояния в несколько раз.

В настоящей работе для расчетов будут использованы экспериментальные значения γ -параметров, которые определяют эффективные массы дырок в валентных подзонах. Эти параметры известны из экспериментов по циклотронному резонансу с высокой степенью точности (см., например, [31]). Для магнитных констант κ и q

существует несколько разных наборов [19,32], которые заметно отличаются друг от друга. Как будет показано далее, небольшие изменения этих параметров могут привести к изменению величин g_1 и g_2 в несколько раз. Поэтому магнитные константы κ и q будут определены в данной работе из сравнения рассчитанных величин g -факторов с экспериментальными.

3. Результаты расчетов

Найденные в работах [28,29] волновые функции основного состояния различных акцепторных центров были использованы для получения зависимости величин g_1 и g_2 от энергии связи акцептора для разных полупроводников. Результаты таких расчетов для Ge и GaAs приведены на рисунке сплошными линиями. Треугольниками даны экспериментальные значения величин g -факторов: для Ge:B [5], Ge:Ga [5] и GaAs:C [3], GaAs:Be [4]. Штриховыми линиями показаны результаты расчетов, полученные в модели потенциала нулевого радиуса, в рамках которой волновые функции можно получить в аналитическом виде [33]. При расчетах использовались следующие наборы зонных параметров: $\gamma_1 = 13.38$, $\gamma_2 = 4.24$, $\gamma_3 = 5.69$ [31,32], $\kappa = 3.134$ и $q = 0.0861$ для Ge и $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9$ [32,34], $\kappa = 1.30$ и $q = 0.017$ [35] для GaAs. Значения параметра κ для Ge и GaAs и параметра q для Ge были определены из сравнения с экспериментальными данными работ [4,5] по методу, описанному в разд. 2.

Из рисунка видна сильная зависимость величин g_1 и g_2 от энергии связи, т.е. от типа примеси (химического сдвига). Расчеты показывают, что зависимость параметра g_1 от энергии связи E_A определяется в основном матричным элементом \bar{N}_1 , величина которого отрицательна и монотонно уменьшается с увеличением E_A . Для Ge параметр g_1 положителен в области малых энергий

Таблица 1. Сравнение величин g_1 и g_2 , рассчитанных в данной работе, с существующими экспериментальными данными *

Акцепторный центр	E_A (meV)	γ_1	γ_2	γ_3	κ	q	g_1	g_2
GaAs:Be	28	6.85	2.1	2.9	1.30	0.017	-0.31	-0.08
GaAs:Be	28	6.65	1.95	2.63	1.1	0.017	-0.22	-0.085
GaAs:Be [4]	28						-0.30	-0.07
GaAs:C [3]	27						-0.30(8)	-0.09(5)
Ge:B	10.82	13.38	4.24	5.69	3.134(4)	0.086(3)	0.158	-0.093
Ge:B [5]	10.82						0.164(1)	-0.091(1)
Ge:Ga	11.32	13.38	4.24	5.69	3.134(4)	0.086(3)	0.137	-0.083
Ge:Ga [5]	11.32						0.132(2)	-0.084(2)
Ge:Ga [11]	11.32						-0.16(8)	0.08(4)
Ge:Zn ⁽⁻⁾	87	13.38	4.24	5.69	3.134(4)	0.086(3)	-0.079	0.023
Ge:Zn ⁽⁻⁾ [6]	87						-0.53(1)	-0.002(7)

* Знаки параметров g_1 и g_2 из работ [3–6] изменены на обратные, что соответствует переходу от используемых в этих работах электронных обозначений для подуровней акцептора к дырочным.

Магнитные зонные параметры κ и q рассчитаны по методу, описанному в разд. 2.

$E_A \leq 0.9E_B$ (здесь и далее E_B — боровская энергия тяжелой дырки; для GaAs $E_B = 51.3$ meV, а для Ge $E_B = 18.25$ meV) и также монотонно уменьшается с ростом энергии связи. При $E_A \approx 0.9E_B$ величина g_1 обращается в нуль. В случае GaAs качественное поведение параметра g_1 такое же, однако в отличие от Ge смена знака происходит в области очень маленьких энергий связи, где нет реальных примесных центров. Энергия связи при этом заметно меньше кулоновской, что соответствует отталкивающему потенциалу центральной ячейки (отрицательной величине химического сдвига).

Поведение параметра g_2 при меняющейся энергии связи в основном определяется матричным элементом \bar{L}_2 , который положителен и монотонно растет с E_A . Как для Ge, так и для GaAs величина g_2 отрицательна в области малых энергий связи $E_A \leq E_B$ и монотонно возрастает с увеличением энергии. При $E_A \approx E_B$ параметр g_2 проходит через нуль и меняет знак. Таким образом, анизотропия магнитного расщепления основного состояния акцептора, определяемая параметром g_2 , качественно изменяется с ростом энергии связи: при $E_A \approx E_B$ величина g_2 обращается в нуль, магнитный момент основного состояния акцептора становится изотропным и расщепление не зависит от направления магнитного поля.

В общем случае ($g_1 \neq 0$, $g_2 \neq 0$) расщепления магнитных подуровней акцепторного центра при направлении магнитного поля \mathbf{H} по оси [001] даются выражениями

$$\Delta E_{\pm 3/2}^{[001]} = \mp \mu_B \frac{3}{2} H \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right),$$

$$\Delta E_{\pm 1/2}^{[001]} = \mp \mu_B \frac{1}{2} H \left(g_1 + \frac{1}{4} g_2 \right),$$

а при направлении поля \mathbf{H} по оси [111]

$$\Delta E_{\pm 3/2}^{[111]} = \mp \mu_B \frac{3}{2} H \sqrt{\frac{2}{3} \left(g_1 + \frac{9}{4} g_2 \right)^2 + \frac{1}{3} \left(g_1 + \frac{5}{4} g_2 \right)^2},$$

$$\Delta E_{\pm 1/2}^{[111]} = \mp \mu_B \frac{1}{2} H \left(g_1 + \frac{13}{4} g_2 \right). \quad (9)$$

В случае когда параметр g_1 обращается в нуль (при $E_A \approx 0.9E_B$ для Ge), расщепление целиком определяется параметром g_2 . При этом для направления [001] расщепление состояний с $F_z = \pm 3/2$ в 27 раз превосходит расщепление состояний с $F_z = \pm 1/2$, анизотропия магнитного момента состояний с $F_z = \pm 3/2$ мала ($\Delta E_{111}^{(3/2)}/\Delta E_{001}^{(3/2)} = \sqrt{187/243} \approx 0.88$), а магнитный момент состояний с $F_z = \pm 1/2$ резко анизотропен ($\Delta E_{111}^{(1/2)}/\Delta E_{001}^{(1/2)} = 13$).

Для глубоких примесных центров, энергия связи которых превосходит боровскую энергию тяжелой дырки ($E_A > E_B$), величины g_1 и g_2 имеют разные знаки и анизотропия расщепления магнитных подуровней $F_z = \pm 3/2$ больше, чем для состояний с $F_z = \pm 1/2$.

Некоторые описанные выше качественные особенности поведения магнитного момента акцепторных центров наблюдаются в экспериментах. Так, например, смена знака параметра g_1 при увеличении энергии связи наблюдалась для акцепторов в Ge. В табл. 1 приведены экспериментальные и теоретические значения g -факторов различных акцепторных центров в Ge. Из таблицы видно, что для мелких примесных центров (B и Ga [5]) параметр g_1 положителен, в то время как для более глубокого акцептора Zn⁽⁻⁾ [6] этот параметр отрицателен. Табл. 1 демонстрирует хорошее количественное согласие теоретических результатов с экспериментальными данными для мелких примесных центров.

Изотропное магнитное расщепление основного состояния экспериментально наблюдалось в Ge, легированном Zn, который является двухзарядным акцептором в этом

Таблица 2. Сравнение величин g_1 и g_2 , рассчитанных в данной работе для разных наборов зонных параметров Латтинжера, с теоретическими данными работы [19] *

Акцепторный центр	E_A (meV)	γ_1	γ_2	γ_3	κ	q	g_1	g_2
GaAs:C	27	6.65	1.95	2.63	1.1	0.017	-0.214	-0.089
GaAs:A _{Coul}	25.70	6.65	1.95	2.63	1.1	0.017	-0.202	-0.095
GaAs:A _{Coul}	25.70	6.65	1.95	2.63	1.1	0	-0.210	-0.118
GaAs:A _{Coul} [19]	25.59	6.65	1.95	2.63	1.1	0	-0.208	-0.115
Ge:Ga	11.32	13.35	4.24	5.69	3.41	0.07	0.595	-0.131
Ge:A _{Coul}	10.35	13.35	4.24	5.69	3.41	0.07	0.639	-0.151
Ge:A _{Coul}	10.35	13.35	4.24	5.69	3.41	0	0.595	-0.236
Ge:A _{Coul} [19]		13.35	4.24	5.69	3.41	0	0.590	-0.226

* Знаки параметров g_1 и g_2 из работы [19] изменены на обратные, что соответствует переходу от используемых в этой работе электронных обозначений для подуровней акцептора к дырочным.

материале. В работе [6] для основного состояния однозарядного центра $Zn^{(-)}$ экспериментально была получена очень маленькая величина g_2 (см. табл. 1). Теоретические результаты, представленные в табл. 1 для Ge:Zn⁽⁻⁾, согласуются с экспериментальными лишь качественно: как и в эксперименте, абсолютное значение величины g_2 мало, а величина g_1 для глубокого центра $Zn^{(-)}$ имеет обратный знак по сравнению со случаем мелких центров. Плохое количественное согласие с данными эксперимента, возможно, обусловлено тем, что $Zn^{(-)}$ является достаточно глубоким акцептором в Ge: энергия связи его основного состояния ($E_A = 87$ meV [32]) более чем в 4 раза превосходит боровскую энергию тяжелой дырки E_B . При такой большой энергии связи вклад спин-отщепленной валентной зоны в волновую функцию центра и магнитный момент не мал. Этот вклад необходимо учитывать для количественного описания экспериментальных результатов для глубоких акцепторов, что выходит за рамки рассматриваемой здесь модели.

В работах [36–38] был рассчитан g -фактор акцепторного центра в сферическом приближении. Результаты этих работ получаются из представленных здесь результатов в соответствующем пределе ($\gamma_3 = \gamma_2 = \gamma$). В работе [37,38] было показано, что в сферическом приближении g -фактор основного состояния слабо зависит от энергии связи и хорошо описывается как в модели потенциала нулевого радиуса, так и в другой широко используемой предельной модели кулоновского центра, в рамках которой поправками центральной ячейки полностью пренебрегают. Из рисунка видно, что в отличие от случая сферического акцептора [37,38] предельная модель потенциала нулевого радиуса (штриховые линии) плохо согласуется с экспериментальными данными и результатами более точных расчетов (сплошные линии). Эта модель дает лишь асимптотические значения величин g_1 и g_2 при большой энергии связи ($E_A \gg E_B$). В рамках сферического приближения модель потенциала нулевого радиуса [36,37] хорошо описывает расщепление подуровней $F_z = \pm 3/2$ в магнитном поле, направленном вдоль оси [001] ($g_F \approx g_{3/2}^{[001]} = g_1 + 9/4g_2$).

Следует обратить внимание на одно важное обстоятельство, связанное с расчетами магнитного момента акцептора с учетом кубической симметрии кристаллической решетки. При теоретических расчетах величин g_1 и g_2 вкладом оператора $2\mu_B q \hat{J}_\alpha^3$ в магнитный момент акцепторного центра (4), как правило, пренебрегают [16,19], т.е. полагают $q = 0$. Это связано с тем, что константа q имеет релятивистскую природу и должна быть мала [20,30]: для Ge и GaAs характерная величина q примерно на 2 порядка меньше величин параметров γ_i и κ . Такой подход является оправданным при рассмотрении высоковозбужденных состояний акцептора, для которых абсолютные значения g -факторов большие и вклад оператора \hat{J}_α^3 действительно незначителен. Для основного состояния величины g_1 и g_2 , как правило, малы, так что вклад оператора $2q\hat{J}_\alpha^3/F_z$ может быть сравним с этими величинами. Например, как видно из табл. 2, пренебрежение параметром q приводит к изменению значения параметра g_2 в 1.5 раза при той же энергии связи невозмущенного акцептора в Ge (параметры κ и q не влияют на энергию связи в нулевом приближении). Таким образом, для состояний акцептора с небольшими (сравнимыми с вкладом оператора $2\mu_B q \hat{J}_\alpha^3$) значениями магнитного момента пренебрежение константой q может привести к изменению ответа в несколько раз. К таким состояниям относятся, как правило, основное ($1S_{3/2}$), а возможно, и первое возбужденное ($2P_{3/2}$) состояния акцепторного центра.

В работе [19] были численно рассчитаны величины расщеплений магнитных подуровней основного и первых возбужденных состояний акцептора в Ge и GaAs в широком диапазоне магнитных полей с учетом кубической симметрии. В результате подгонки к экспериментальным данным [3] был получен новый набор зонных параметров γ_1 , γ_2 , γ_3 и κ для GaAs и продемонстрировано хорошее согласие теоретических расчетов величин g_1 и g_2 с экспериментальными данными для возбужденных состояний. Для основного состояния акцептора в GaAs рассчитанная величина g_1 более чем на 30% отличалась от экспериментальной, что до сих пор оставалось необъясненным.

В табл. 2 приведены результаты расчетов величин g_1 и g_2 для GaAs и Ge из работы [19] (строки 4 и 8), а также результаты собственного расчета, выполненного для зонных параметров, полученных в работе [19], и при упрощающих предположениях, использованных в этой работе, т.е. для кулоновского акцептора и $q = 0$ (строки 3 и 7). Результаты этих двух независимых расчетов очень хорошо согласуются друг с другом. Однако, как видно из таблицы, при учете поправок центральной ячейки и конечности величины параметра q значения параметров g_1 и g_2 сильно меняются: при $q = 0.017$ [35] для GaAs и $q = 0.07$ [32] для Ge величина g_2 изменяется примерно в 1.5 раза (строки 6 и 2), а учет некулоновской природы потенциала (строки 1 и 5) меняет ответ для g_1 и g_2 на 10–20% (при изменении энергии связи на 5–10%). Кроме этого, в работе [19] при подгонке зонных параметров для GaAs константа κ не варьировалась. Предполагалось, что она удовлетворяет соотношению $\gamma_1 - 2\gamma_2 - 3\gamma_3 + 3\kappa + 2 = 0$ [39], которое выполняется лишь приближенно. Однако, как будет показано, малые изменения параметра κ могут привести к большим изменениям величины и анизотропии расщепления магнитных подуровней. Таким образом, использование модели кулоновского акцептора, приближенного соотношения для κ и пренебрежение вкладом оператора $2\mu_B q \hat{J}_\alpha^3$ в магнитный момент и привело к существенным ошибкам в расчетах g -факторов основного состояния акцептора, представленных в работе [19].

Другим важным результатом расчетов является сильная зависимость величин g_1 и g_2 от зонных параметров Латтинжера. Так, например, уменьшение магнитной константы κ для Ge на 10% (с 3.41 до 3.1) приводит к смене знака величины g_1 (при той же невозмущенной энергии связи акцептора). Абсолютное значение g_1 меняется при этом примерно в три раза.

Сильная зависимость величин g_1 и g_2 от магнитных зонных параметров позволяет определить эти константы с хорошей точностью. В табл. 1 приведены экспериментальные данные для величин g_1 и g_2 для GaAs [3,4] и Ge [5,6,11], а также результаты расчетов этих величин и зонных параметров κ и q . При определении константы κ для GaAs использовались экспериментальные данные работы [4], поскольку в этой работе было достигнуто лучшее спектральное разрешение. По той же причине использовались данные работы [5] в случае Ge. Константы κ и q были получены в результате решения системы уравнений (6). Как видно из таблицы, теоретически рассчитанные величины g_1 и g_2 очень хорошо согласуются с экспериментальными для мелких акцепторов.

Хорошее согласие результатов расчетов, выполненных в данной работе, с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными свидетельствует о том, что предложенная модель магнитного момента основного состояния акцептора применима для точного количественного описания эффекта Зеемана на мелких акцепторных центрах. Это в большой степени обусловлено тем, что

использованная при расчетах детальная модель основного состояния акцептора, построенная в работах [28,29], позволяет получить волновую функцию центра с высокой степенью точности. Это обстоятельство, а также сильные зависимости величин g_1 и g_2 от магнитных констант κ и q позволяют надеяться, что в рамках предложенного в данной работе метода расчета этих констант они определяются с хорошей точностью.

Таким образом, основные результаты работы сводятся к следующему.

1) Получены выражения для величин g_1 и g_2 для основного состояния мелкого акцепторного центра в кубических полупроводниках с сильным спин-орбитальным взаимодействием.

2) Показано, что параметры g_1 и g_2 , описывающие расщепление квартета подуровней акцептора в магнитном поле, сильно зависят от энергии связи основного состояния. Такие зависимости были рассчитаны для GaAs и Ge, и получено хорошее количественное согласие с экспериментальными данными.

3) Показано также, что оператор $2\mu_B q \hat{J}_\alpha^3$, которым часто пренебрегают при расчетах, вносит существенный вклад в магнитный момент основного, а возможно, и первого возбужденного состояния акцептора.

4) В работе приведены причины заметного расхождения результатов предыдущих теоретических расчетов g -факторов с экспериментальными данными для основного состояния акцептора.

5) Продемонстрировано, что величины g_1 и g_2 очень чувствительны к малым изменениям магнитных зонных констант Латтинжера κ и q .

6) Предложен новый метод определения магнитных параметров κ и q , основанный на использовании сильных зависимостей величин g_1 и g_2 от этих параметров и энергии связи акцептора. На основе этого метода рассчитаны величины магнитных констант для Ge и GaAs.

В заключение следует обратить внимание на то, что предложенная в данной работе модель справедлива для достаточно мелких акцепторных центров, энергия связи которых мала по сравнению с величиной спин-орбитального расщепления валентной зоны.

Автор признателен И.А. Меркулову и А.В. Родиной за полезные обсуждения и Б.П. Захарчене за интерес к проведенным исследованиям.

Выполнение этой работы поддержано грантом РФФИ (№ 96-15-96392).

Список литературы

- [1] H.P. Soepangkat, P. Fisher. Phys. Rev. **B8**, 870 (1973).
- [2] J. Schubert, M. Dahl, E. Bangert. Zeeman effect of the carbon acceptor in GaAs. High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II by G. Landwehr. Springer, Berlin, (1989).
- [3] R. Atzmüller et al. J. Phys.: Condens. Matter. **3**, 6775 (1991).
- [4] R.A. Lewis, M. Henini. Phys. Stat. Sol. (b) **210**, 821 (1998).
- [5] P. Fisher et al. Phys. Rev. **B47**, 12 999 (1993).

- [6] P. Fisher, C.A. Freeth, R.E.M. Vickers. *Phys. Stat. Sol. (b)* **210**, 827 (1998).
- [7] R.E.M. Vickers, P. Fisher, C.A. Freeth. *Sol. (b)* **210**, 839 (1998).
- [8] R.F. Kirkman, R.A. Stradling, P. Lin-Chung. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 419 (1978).
- [9] J. Broeckx et al. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12**, 4061 (1979).
- [10] Y. Kamiura et al. *Solid State Commun.* **38**, 883 (1981).
- [11] H. Tokumoto, T. Ishido. *Phys. Rev.* **B15**, 2099 (1977).
- [12] Р.И. Джиоев, Б.П. Захарченя, В.Г. Флейшер. *Письма в ЖЭТФ* **17**, 5, 224 (1973).
- [13] D. Bimberg, K. Cho, W. Kottler. In: *Proc. Int. Colloque on Physics in High Magnetic Fields (Grenoble, 1974); Colloques Internationaux CNRS (Paris)* **242** (1975).
- [14] D. Bimberg. *Phys. Rev.* **B18** 1794 (1978).
- [15] A.K. Bhattacharjee, S. Rodriguez. *Phys. Rev.* **B6**, 3836 (1972).
- [16] P. Lin-Chung, R.F. Wallis. *J. Phys. Chem. Solids* **30** 1453 (1969).
- [17] N.O. Lipari, M. Altarelli. *Solid State Commun.* **33**, 47 (1980).
- [18] J. Broeckx, P. Claus. *Solid State Commun.* **28**, 355 (1978).
- [19] Schmitt et al. *J. Phys.: Condens. Matter.* **3**, 6789 (1991).
- [20] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. Наука, М. (1972). С. 539.
- [21] V. Bleaney. *Proc. Phys. Soc.* **73**, 937 (1959).
- [22] V. Bleaney. *Proc. Phys. Soc.* **73**, 939 (1959).
- [23] W. Kohn, D. Schechter. *Phys. Rev.* **99**, 1903 (1955).
- [24] K.S. Mendelson, H.M. James. *J. Phys. Chem. Solids* **25**, 729 (1964).
- [25] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev.* **B8**, 2697 (1973).
- [26] Б.Л. Гельмонт, А.В. Родина. *ФТП* **25**, 2189 (1991).
- [27] И.А. Меркулов, А.В. Родина. *ФТП* **28**, 321 (1994).
- [28] А.В. Малышев, И.А. Меркулов, А.В. Родина. *ФТП* **30**, 159 (1996).
- [29] A.V. Malyshev, I.A. Merkulov, A.V. Rodina. *Phys. Rev.* **B55**, 4388 (1997).
- [30] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.* **102**, 1030 (1956).
- [31] J.C. Hensel, K. Suzuki. *Phys. Rev.* **B9**, 4219 (1974).
- [32] Landolt-Borstein. *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*. Vol. 17. Subvol. a. Springer-Verlag (1982).
- [33] В.И. Перель, И.Н. Ясневич. *ЖЭТФ* **82**, 237 (1982).
- [34] K. Hess et al. *Proc. 13th Int. Conf. on the Physics of Semiconductors (Rome)*/ Ed. by F.G. Fumi. North-Holland Amsterdam (1976). P. 142.
- [35] X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Paillard, P. Renucci, L.E. Golub, V.D. Dymnikov, E.L. Ivchenko. *Phys. Rev. B*, в печати.
- [36] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. *ФТП* **7**, 2013 (1973).
- [37] А.В. Малышев, И.А. Меркулов. *ФТП* **39**, 58 (1997).
- [38] A.V. Malyshev, I.A. Merkulov, A.V. Rodina. *Phys. Stat. Sol. (b)* **210**, 865 (1998).
- [39] H.-R. Trebin, U. Rössler, R. Ranvaud. *Phys. Rev.* **B20**, 686 (1979).