

# Теория резонанса Фано в спектрах примесного возбуждения $p$ -GaAs

© В.Я. Алёшкин, Д.И. Бурдейный, М.С. Жолудев

Институт физики микроструктур РАН,  
Нижний Новгород, Россия

E-mail: burdeiny@ipm.sci-nnov.ru

(Поступила в Редакцию 11 октября 2010 г.)

Проведено теоретическое описание особенностей в спектрах примесной фотопроводимости арсенида галлия, легированного мелкими акцепторами. Особенности обусловлены взаимодействием дырок с полярными оптическими фононами. Рассмотрены резонансы Фано, связанные как с основным, так и с возбужденными состояниями акцептора. Рассчитанные значения ширин резонансов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 10-02-00311).

## 1. Введение

В 1958 г. в спектрах примесного возбуждения кремния, легированного бором, был обнаружен асимметричный провал при энергии фотона  $519 \text{ cm}^{-1}$ , которая совпадает с энергией оптического фонона [1]. Отметим, что бор — единственный мелкий акцептор в кремнии, у которого энергия ионизации меньше энергии оптического фонона. Природа этого провала оставалась неясной до работы Воткинса и Фаулера [2]. Авторы связали появление провалов в спектрах поглощения кремния, легированного бором, с резонансами Брейта–Вигнера–Фано (далее используется термин „резонанс Фано“), которые появляются благодаря взаимодействию дырок с оптическими фононами. Воткинс и Фаулер отметили, что энергия системы, когда дырка находится в основном состоянии акцептора и имеется один оптический фонон (состояние дискретного спектра), соответствует энергии дырки в непрерывном спектре при отсутствии фонона (состояние непрерывного спектра). Ситуация, когда дискретный уровень взаимодействует с континуумом состояний, анализировалась в работе Фано [3]. В этой работе был найден спектр вероятности дипольных переходов для случая, когда состояния дискретного спектра попадают в континуум. Однако справедливость непосредственного применения известной формулы Фано [3] для описания спектров в полупроводниках, легированных акцепторами и имеющих сложную валентную зону, до сих пор оставалась неясной.

Следует отметить, что в работе [2] были обнаружены дополнительные провалы в спектре примесного поглощения в  $\text{Si:B}$  ( $764 \text{ cm}^{-1}$ ),  $\text{Si:Al}$  ( $962 \text{ cm}^{-1}$ ) и  $\text{Si:Ga}$  ( $989 \text{ cm}^{-1}$ ). Положение этих провалов в спектре соответствует сумме энергии оптического фонона и энергии перехода  $1S_{3/2} - 2P_{3/2}$ . В этом случае роль резонансного состояния играет состояние дырки на возбужденном уровне акцептора  $2P_{3/2} +$  оптический фонон.

Впоследствии резонансы Фано, соответствующие возбужденным состояниям акцепторов в кремнии, исследовались в спектрах фотопроводимости в работе [4].

Интересно отметить, что особенности в спектрах фотопроводимости имеют место даже в том случае, когда возбужденное состояние дырки является состоянием  $S$ -типа [5,6], прямые переходы из основного состояния акцептора в которое запрещены.

Резонансы Фано были обнаружены в спектрах примесной фотопроводимости и примесного поглощения в кремнии, легированном мелкими и глубокими донорами,  $n$ -GaAs и  $n$ -InP, а также в структурах с квантовыми ямами, легированными мелкими донорами. Ссылки на соответствующие работы можно найти в обзоре [7].

Недавно в работе [8] были обнаружены провалы в спектрах примесной фотопроводимости GaAs и квантовых ям, легированных мелкими акцепторами. Настоящая работа посвящена теоретическому описанию наблюдаемых особенностей в объемном GaAs, легированном мелкими акцепторами. Для описания акцепторных состояний используется изотропная модель Балдереша и Липари [9]. Полученные теоретические результаты позволили рассчитать ширины наблюдаемых резонансов и объяснить, почему резонансы проявляются как провалы в спектрах примесной фотопроводимости  $p$ -GaAs (в  $n$ -GaAs они проявляются как пики).

Работа построена следующим образом. Раздел 2 содержит результаты обобщения теории Фано на случай произвольного числа континуумов, взаимодействующих с произвольным числом дискретных уровней. В разделе 3 изложен метод нахождения волновых функций дырок в присутствии акцептора. В разделе 4 приводятся результаты вычисления матричных элементов оператора полярного взаимодействия с оптическими фононами (РФ-взаимодействия) и оператора дипольного момента. В разделе 5 проводится сравнение теоретических и экспериментальных результатов для  $p$ -GaAs.

## 2. Результаты обобщения теории Фано для акцепторов

В своей знаменитой работе [3] Фано нашел точные волновые функции для случаев взаимодействия одного

дискретного состояния с одним континуумом, взаимодействия одного дискретного состояния с произвольным числом континуумов и взаимодействия произвольного числа дискретных состояний с одним континуумом. Более общий случай взаимодействия произвольного числа резонансных состояний с любым числом континуумов был рассмотрен позднее в работах [10,11]. Именно этот случай необходим для описания резонанса Фано в спектре примесной фотопроводимости *p*-GaAs. Далее приведены результаты вычисления точных волновых функций и матричных элементов дипольных переходов.

В изотропной модели Латтинджера интегралами движения электрона в присутствии кулоновского центра являются полный момент и его проекция на ось *z*. При фиксированных значениях энергии, полного момента и его проекции состояния в непрерывном спектре двукратно вырождены, поскольку имеются легкие и тяжелые дырки. Исключением являются состояния  $P_{1/2}$ , которые не вырождены. Рассмотрим дискретные состояния, в которых дырка находится на основном уровне акцептора и в системе имеется оптический фонон с волновым вектором  $\mathbf{q}$ . Основное состояние акцептора имеет полный момент, равный  $3/2\hbar$ , и четырехкратно вырождено по проекции момента импульса на ось *z*. Следуя обозначениям Фано, обозначим волновую функцию дискретного состояния через  $|\phi_p\rangle$ . Индекс *p* содержит не только квантовые числа фонона (волновой вектор  $\mathbf{q}$ ), но и квантовые числа основного состояния дырки (проекция момента на ось *z*). Обозначим через  $\psi_i(E)$  набор волновых функций непрерывного спектра, соответствующих энергии *E*. Матричные элементы гамильтониана имеют вид

$$\langle\phi_p|\hat{H}|\phi_{p'}\rangle = E_\phi\delta_{pp'}, \quad (1)$$

$$\langle\psi_i(E)|\hat{H}|\phi_p\rangle = V_{ip}(E), \quad (2)$$

$$\langle\psi_i(E)|\hat{H}|\psi_j(E')\rangle = E\delta_{ij}\delta(E - E'). \quad (3)$$

Точные волновые функции непрерывного спектра при фиксированных моменте и его проекции, соответствующие энергии *E*, можно искать в виде

$$\Psi^\alpha(E) = \sum_p a_p^\alpha(E) |\phi_p\rangle + \sum_j \int b_j^\alpha(E, E') \psi_j(E') dE'. \quad (4)$$

Верхний индекс  $\alpha = 1, 2$  используется для нумерации решений, имеющих одинаковые моменты импульса, его проекцию на ось *z* и энергию. Нижний индекс *u* волновых функций непрерывного спектра  $\psi_i(E)$  может принимать два значения (за исключением состояний  $P_{1/2}$ ).

Оказывается, что можно найти коэффициенты  $a_p^\alpha(E)$  и  $b_j^\alpha(E, E')$ , входящие в разложение (4), пользуясь методами, изложенными в работах [3] и [10]. (Мы не будем приводить здесь подробных вычислений, потому что они длинные и громоздки.) Для нас главной задачей является вычисление матричного элемента  $\langle\Psi(E)|\hat{T}|i\rangle$  оператора перехода  $\hat{T}$  из какого-либо начального состояния  $|i\rangle$  в состояние непрерывного спектра с волновой функцией (4).

Указанный матричный элемент имеет следующий вид (в окрестности  $E \approx E_\phi$ ):

$$\begin{aligned} \langle\Psi(E)|\hat{T}|i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi^2\lambda^2(E_\phi) + (E - E_\phi)^2}} \\ &\times \sum_j n_j^*(E) \sum_p V_{jp}(E_\phi) \left( \langle\phi_p|\hat{T}|i\rangle + \sum_m P \int \frac{dE'}{E_\phi - E'} \right. \\ &\times \left. \langle\psi_m(E')|\hat{T}|i\rangle V_{mp}^*(E') \right) + \frac{E - E_\phi}{\sqrt{\pi^2\lambda^2(E_\phi) + (E - E_\phi)^2}} \\ &\times \sum_j n_j^*(E_\phi) \langle\psi_j(E_\phi)|\hat{T}|i\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

(мы опустили верхние индексы, нумерующие волновые функции; символ  $P \int$  означает интеграл в смысле главного значения). В формуле (5)  $\mathbf{n}(E)$  — двумерный собственный вектор задачи

$$(E - E_\phi)n_m^\alpha(E) = z^\alpha(E) \sum_j W_{mj}(E) n_j^\alpha(E) \quad (6)$$

( $z^\alpha(E)$  — собственное значение),  $W_{mj}(E) = \sum_p V_{mp}(E) \times V_{jp}^*(E)$  — эрмитова матрица  $2 \times 2$  ( $\lambda(E)$  — собственные значения этой матрицы). Векторы  $\mathbf{n}(E)$  нормированы на единицу условием  $\sum_j |n_j|^2 = 1$ .

Если ввести безразмерную энергию  $\varepsilon = (E - E_\phi)/\pi\lambda(E_\phi)$ , то квадрату матричного элемента (5) можно придать вид формулы Фано

$$|\langle\Psi(E)|\hat{T}|i\rangle|^2 = \frac{(\varepsilon + Q)^2}{1 + \varepsilon^2} \left| \sum_j n_j(E_\phi) \langle\psi_j(E_\phi)|\hat{T}|i\rangle \right|^2, \quad (7)$$

где

$$Q = \frac{\sum_{j,p} V_{jp}(E_\phi) \left( \langle\phi_p|\hat{T}|i\rangle + \sum_m P \int \frac{dE'}{E_\phi - E'} \langle\psi_m(E')|\hat{T}|i\rangle V_{mp}^*(E') \right)}{\pi\lambda(E_\phi) \sum_j n_j^*(E_\phi) \langle\psi_j(E_\phi)|\hat{T}|i\rangle}. \quad (8)$$

Характерная ширина резонанса для перехода в данный тип состояний, соответствующий определенному значению  $\lambda(E_\phi)$ , определяется величиной  $\Gamma = 2\pi\lambda(E_\phi)$ . Полная вероятность перехода будет определяться суммой из *N* слагаемых, каждое из которых описывается выражением (5) с соответствующими  $\lambda$  и  $\mathbf{n}$ .

Заметим, что матричный элемент оператора дипольного перехода  $\langle\phi_p|\hat{T}|i\rangle$  для случая, когда резонансное состояние появляется благодаря взаимодействию с оптическим фононом, равен нулю, поскольку волновая функция  $|\phi_p\rangle$  описывает состояние с фононом, а в начальном состоянии  $|i\rangle$  фонон отсутствует (оператор дипольных переходов не изменяет числа заполнения фононов).

### 3. Вычисление волновых функций акцепторных состояний

В этой части приведен алгоритм вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектра. Для вычисления волновых функций электронов в валентной зоне в присутствии акцептора в этой работе используется изотропная модель Латтинджера, которая была разработана Балдереси и Липари [9] и довольно хорошо описывает состояния мелких акцепторов в GaAs. Для примесной фотопроводности достаточно рассмотреть четыре группы состояний:  $S_{3/2}$ ,  $P_{1/2}$ ,  $P_{3/2}$ ,  $P_{5/2}$ . Волновые функции этих состояний можно представить в виде [9]

$$|S_{3/2}, F_z\rangle = f_0(r)|L=0, J=3/2, F=3/2, F_z\rangle + g_0(r)|L=2, J=3/2, F=3/2, F_z\rangle, \quad (9a)$$

$$|P_{1/2}, F_z\rangle = f_1(r)|L=1, J=3/2, F=1/2, F_z\rangle, \quad (9b)$$

$$|P_{j/2}, F_z\rangle = f_{(j+1)/2}(r)|L=1, J=3/2, F=j/2, F_z\rangle + g_{(j+1)/2}(r)|L=2, J=3/2, F=j/2, F_z\rangle, \quad j=3, 5. \quad (9c)$$

Функция  $|L, J, F, F_z\rangle$  обладает полным моментом, равным  $F$ , проекцией полного момента  $F_z$  и получается в результате сложения спинового момента  $J$  и орбитального  $L$ . Она может быть представлена в виде следующего столбца:

$$|L, J=3/2, F, F_z\rangle = \begin{pmatrix} C_{L, F_z-3/2; 3/2, +3/2}^{F, F_z} Y_{L, F_z-3/2} \\ C_{L, F_z-1/2; 3/2, +1/2}^{F, F_z} Y_{L, F_z-1/2} \\ C_{L, F_z+1/2; 3/2, -1/2}^{F, F_z} Y_{L, F_z+1/2} \\ C_{L, F_z+3/2; 3/2, -3/2}^{F, F_z} Y_{L, F_z+3/2} \end{pmatrix},$$

где  $C_{L, F_z; j_2, m_2}^{F, F_z}$  — коэффициенты Клебша–Гордана,  $Y_{lm}$  — сферические функции.

Если ввести эффективные ридберг  $R_0$  и борковский радиус  $a_0$

$$R_0 = \frac{e^4 m_0}{2\hbar^2 \epsilon_0^2 \gamma_1}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2 \epsilon_0 \gamma_1}{e^2 m_0},$$

где  $e, m_0$  — заряд и масса свободного электрона,  $\epsilon_0$  — низкочастотная диэлектрическая проницаемость, то в безразмерных переменных уравнения для функций  $f_i(r), g_i(r)$  принимают следующий вид [9]:

$$\begin{bmatrix} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2}{r} - E & -\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{5}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) \\ -\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) & \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{6}{r^2} + \frac{2}{r} - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_0(r) \\ g_0(r) \end{bmatrix} = 0, \quad (10a)$$

$$\left[ (1+\mu) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \right] f_1(r) = 0, \quad (10b)$$

$$\begin{bmatrix} \left( 1 - \frac{4}{5}\mu \right) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{3}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{3}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & \left( 1 + \frac{4}{5}\mu \right) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} f_2(r) \\ g_2(r) \end{bmatrix} = 0, \quad (10c)$$

$$\begin{bmatrix} \left( 1 + \frac{1}{5}\mu \right) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E & -\frac{2\sqrt{6}}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r} \frac{d}{dr} + \frac{8}{r^2} \right) \\ -\frac{2\sqrt{6}}{5}\mu \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r} \frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2} \right) & \left( 1 - \frac{1}{5}\mu \right) \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2} \right) + \frac{2}{r} - E \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} f_3(r) \\ g_3(r) \end{bmatrix} = 0, \quad (10d)$$

где  $\mu = (6\gamma_3 + 4\gamma_2)/5\gamma_1$ ,  $\gamma_{1,2,3}$  — параметры Латтинджера. Для GaAs  $\mu \approx 0.74$ .

Уравнение (10b) эквивалентно уравнению Шредингера для атома водорода, спектр и волновые функции которого известны (спектр локализованных состояний дается формулой  $E(n) = (1+\mu)^{-1}n^{-2}$ ,  $n=1, 2, \dots$ ). По этой причине далее будет обсуждаться решение соответствующих уравнений только для состояний  $S_{3/2}$ ,  $P_{3/2}$ ,  $P_{5/2}$ . Нетрудно найти аналитические решения уравнений (10) без кулоновского потенциала для состояний с положительной и отрицательной энергиями. Вид этих решений приведен в Приложении. Для состояний в области положительных энергий, что соответствует дискретному спектру, существует пара решений, убывающих на бесконечности. В непрерывном спектре (область отрицательных энергий) при фиксированной энергии имеется четыре решения для волновых функций.

Для нахождения волновых функций и энергий в дискретном спектре использовалась „обрезка“ кулоновского потенциала на расстоянии  $R_{\max}$  от акцептора (обычно  $R_{\max} \approx 10$ ), т.е. мы использовали вместо кулоновского такой потенциал, который совпадает с кулоновским при  $r < R_{\max}$  и равен нулю при  $r > R_{\max}$ . Для решения дифференциальных уравнений (10) на расстоянии  $r = R_{\max}$  задавались функции и их производные, соответствующие решению без кулоновского потенциала. Таких типов граничных условий два. Затем численно решалась система уравнений (10) для каждого типа граничных условий до  $r = R_{\min}$ . Обычно выбиралось  $R_{\min} \approx 0.001$ , поскольку точка  $r = 0$  является особой точкой для коэффициентов уравнений (10) и продолжение решения по Коши до точки  $r = 0$  невозможно. Далее мы полагали, что решения при  $r = 0$  и  $r = R_{\min}$  слабо различаются, и требовали выполнения граничных условий для  $r = 0$  при  $r = R_{\min}$ . Например, для состояний  $S_{3/2}$  эти граничные условия имеют вид  $f_0(r \rightarrow 0) \rightarrow \text{const} \neq 0$  и  $g_0(r \rightarrow 0) \rightarrow 0$ , где  $f_0$  и  $g_0$  — суммы двух численных решений с двумя неизвестными коэффициентами. Граничное условие при  $r = R_{\min}$  сводится к системе двух линейных однородных уравнений для этих коэффициентов, из условия существования ненулевого решения которой получается одно уравнение для определения

энергии

$$\frac{df_0^{(1)}(R_{\min})}{dr} \frac{dg_0^{(2)}(R_{\min})}{dr} - \frac{df_0^{(2)}(R_{\min})}{dr} \frac{dg_0^{(1)}(R_{\min})}{dr} = 0,$$

где  $f_0^{(i)}, g_0^{(i)}$  соответствуют  $i$ -му решению при  $r > R_{\min}$ . Вычисленные таким образом энергии состояний при  $\mu = 0.75$  с точностью 0.1% совпадали с найденными в работе [9]. После нахождения энергии определялись коэффициенты с использованием условия нормировки. Заметим, что граничное условие при  $r = 0$  для состояний  $P$ -типа сводилось к требованию  $f_j(0) = 0$  и  $g_j(0) = 0$ .

Поскольку переход под воздействием света из основного состояния акцептора идет только в состояния  $P$ -типа, в непрерывном спектре рассматривались только они. Нормированные волновые функции непрерывного спектра находились следующим образом. Так же, как и для дискретного спектра, использовалась „обрезка“ кулоновского потенциала при  $r > R_{\max}$ . Однако в этом случае для увеличения точности использовалась зависящая от энергии величина  $R_{\max}(E) = 30\sqrt{(1+\mu)/|E|}$ . Поскольку имеется четыре линейно независимых решения для свободной дырки, есть четыре типа граничных условий при  $r = R_{\max}$ . В качестве примера рассмотрим состояния  $P_{3/2}$ . После численного решения системы (10с) получаем значения четырех пар функций  $f_2^{(i)}(R_{\min}) = F_i$ ,  $g_2^{(i)}(R_{\min}) = G_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ). Решение (10с) ищем в виде линейной комбинации этих четырех решений, поэтому имеется четыре неизвестных коэффициента. Волновая функция  $P$ -состояний должна обращаться в нуль при  $r = 0$ . Это требование, использованное при  $r = R_{\min}$ , приводит к линейной однородной системе двух уравнений для коэффициентов

$$\begin{cases} c_1F_1 + c_2F_2 + c_3F_3 + c_4F_4 = 0, \\ c_1G_1 + c_2G_2 + c_3G_3 + c_4G_4 = 0. \end{cases} \quad (11)$$

Из этих уравнений пара коэффициентов может быть выражена через оставшуюся пару. Таким образом, решение определяется парой коэффициентов точно так же, как вектор на плоскости. Условие нормировки  $\sum_i c_i^2 = 1$  накладывает еще одно условие, которое эквивалентно заданию длины вектора на плоскости. Очевидно, что на плоскости можно выбрать два линейно независимых вектора с заданной длиной. Так и в непрерывном спектре можно выбрать два ортогональных решения при заданной энергии. Ясно, что выбор этот неоднозначен, но он не влияет на полную вероятность фотоионизации акцептора. Это вырождение связано с существованием зон легких и тяжелых дырок. Действительно, в отсутствие кулоновского потенциала для данных квантовых чисел существует два решения, одно из которых соответствует легким дыркам, а другое — тяжелым (см. Приложение). Мы выбирали решения так, чтобы для одного из них выполнялось условие  $c_2 = 0$ .

#### 4. Вычисление матричных элементов операторов взаимодействия с фононами и с излучением

Оператор взаимодействия электрона, находящегося в валентной зоне, с полярными оптическими фононами имеет вид [12]

$$V_{LO} = I \sum_q V(q) \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}}^+ + V^*(q) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}},$$

$$V(q) = \frac{ie}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_0}{L^3\epsilon}}, \quad (12)$$

где  $I$  — единичная матрица  $4 \times 4$ ,  $b_{\mathbf{q}}^+, b_{\mathbf{q}}$  — операторы рождения и уничтожения продольного оптического фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $\omega_0$ ,  $L^3$  — объем кристалла,  $1/\epsilon = 1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_0$ ,  $\epsilon_{\infty}$  — высокочастотная диэлектрическая проницаемость кристалла. Поскольку именно это взаимодействие связывает состояния  $\phi_p$  и  $\psi_i(E)$ , имеем

$$\begin{aligned} \langle \psi_i(E) | H | \phi_p \rangle &= V_{ip}(E) \\ &= V^*(q) \langle \psi_i(E) | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | S_{3/2}, m \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

где  $|S_{3/2}, m\rangle$  — основное состояние акцептора, проекция момента импульса которого на ось  $z$  равна  $m\hbar$  ( $m = \pm 1/2, \pm 3/2$ ).

Взаимодействие с оптическими фононами не нарушает сферическую симметрию задачи, и поэтому волновую функцию  $\Psi(E)$  можно характеризовать полным моментом и его проекцией на ось  $z$ . В этом случае волновые функции  $\psi(E)$ ,  $\phi_p$  в равенстве (4) обладают тем же моментом и его проекцией, что и  $\Psi(E)$ . Для удобства вместо обозначения  $\psi_i(E)$  будем использовать обозначение  $|P_{j/2}, n, i\rangle$  ( $n$  соответствует проекции момента на ось  $z$ ). У состояний  $P_{3/2}$  и  $P_{5/2}$  индекс  $i$  принимает два значения в силу двукратного вырождения, у состояний  $P_{1/2}$  его можно опустить из-за отсутствия вырождения. Для вычисления матричного элемента  $V^*(q) \langle P_{j/2}, n, i | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | S_{3/2}, m \rangle$  воспользуемся разложением [13]

$$\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-i)^l j_l(qr) Y_{lm}^*(\mathbf{q}/q) Y_{lm}(\mathbf{r}/r), \quad (14)$$

где  $j_l(qr)$  — сферические функции Бесселя [14]. Используя правило сложения моментов и учитывая четность функций, можно показать, что вклад в рассматриваемые матричные элементы дадут слагаемые в сумме (14) только с  $l = 1, 3$ . Другими словами, взаимодействие состояния  $S_{3/2}$  с состояниями  $P_{j/2}$  может осуществляться только с помощью фононов с моментами, равными  $1\hbar$  или  $3\hbar$ . Для удобства введем следующие операторы:

$$V_{1k} = -4i\pi j_1(qr) Y_{1k}(\mathbf{r}/r), \quad V_{3k} = 4i\pi j_3(qr) Y_{3k}(\mathbf{r}/r). \quad (15)$$

Используя теорему Вигнера–Экарта [15], можно получить выражения для матричных элементов операторов  $V_{1,3}$ , приведенные в табл. 1.

**Таблица 1.** Выражения для матричных элементов оператора РО-взаимодействия с фононами на состояниях акцептора  $S_{3/2}$  и  $P_{j/2}$

$\langle P_{1/2}, n   V_{1,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = -i2\sqrt{\pi} C_{3/2,m,1,n-m}^{1/2,m} I^{1/2}(q),$ $I^{1/2}(q) = \int_0^\infty r^2 j_1(qr) f_1(r) [f_0(r) - g_0(r)] dr$
$\langle P_{3/2}, n, i   V_{1,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = i2\sqrt{\pi} C_{3/2,m,1,n-m}^{3/2,m} I_i^{3/2}(q),$ $I_i^{3/2}(q) = \int_0^\infty r^2 j_1(qr) [f_0(r) f_2^{(i)}(r) + \frac{3}{5} g_0(r) g_2^{(i)}(r) + \frac{4}{5} g_0(r) f_2^{(i)}(r)] dr$
$\langle P_{5/2}, n, i   V_{1,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = -i2\sqrt{\pi} C_{3/2,m,1,n-m}^{5/2,m} I_i^{5/2}(q),$ $I_i^{5/2}(q) = \int_0^\infty r^2 j_1(qr) [f_0(r) f_3^{(i)}(r) + \frac{2\sqrt{6}}{5} g_0(r) g_3^{(i)}(r) - \frac{1}{5} g_0(r) f_3^{(i)}(r)] dr$
$\langle P_{1/2}, n   V_{3,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = 0$
$\langle P_{3/2}, n, i   V_{1,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = i2\sqrt{\pi} C_{3/2,m,3,n-m}^{3/2,m} J_i^{3/2}(q),$ $J_i^{3/2}(q) = \int_0^\infty r^2 j_3(qr) [-f_0(r) g_2^{(i)}(r) + \frac{4}{5} g_0(r) g_2^{(i)}(r) - \frac{3}{5} g_0(r) f_2^{(i)}(r)] dr$
$\langle P_{5/2}, n, i   V_{3,n-m}   S_{3/2}, m \rangle = i2\sqrt{\pi} C_{3/2,m,3,n-m}^{5/2,m} J_i^{5/2}(q),$ $J_i^{5/2}(q) = \int_0^\infty r^2 j_3(qr) [f_0(r) g_3^{(i)}(r) + \frac{1}{5} g_0(r) g_3^{(i)}(r) + \frac{2\sqrt{6}}{5} g_0(r) f_3^{(i)}(r)] dr$

Вычислим теперь компоненты эрмитовой матрицы  $W_{ij}(E)$ , введенной в формуле (6),

$$W_{ij}(E) = \sum_p V_{ip}(E) V_{pj}(E) = \frac{2\pi\hbar\omega_0 e^2}{L^3 \bar{\epsilon}} \times \sum_{\mathbf{q}, m} \frac{1}{q^2} \langle \psi_i(E) | \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) | S_{3/2}, m \rangle \langle S_{3/2}, m | \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) | \psi_j(E) \rangle. \quad (16)$$

Для определенности рассмотрим состояние  $P_{3/2}$ . Используя свойство коэффициентов Клебша–Гордана [15]

$$\sum_m |C_{j_1, m; j_2, n-m}^{j, n}|^2 = 1 \quad (17)$$

и формулы из табл. 1, находим

$$W_{ij}(E) = \frac{2\hbar\omega_0 \epsilon_0}{\pi \bar{\epsilon}} \int_0^\infty [I_i^{3/2}(q) I_j^{3/2}(q) + J_i^{3/2}(q) J_j^{3/2}(q)] dq. \quad (18)$$

Выражения для  $I_i^{3/2}(q)$ ,  $J_i^{3/2}(q)$  приведены в табл. 1. Аналогичное выражение получается и для состояний  $P_{5/2}$  с заменой верхнего индекса  $3/2$  у функций под интегралом на индекс  $5/2$ . Для состояний  $P_{1/2}$  континуум не вырожден, поэтому  $W(E)$  не матрица, а скалярная

функция

$$W(E) = \frac{2\hbar\omega_0 \epsilon_0}{\pi \bar{\epsilon}} \int_0^\infty I^{1/2}(q) I^{1/2}(q) dq. \quad (19)$$

Отметим, что в (18) и (19) величина волнового вектора  $q$  выражена в обратных боровских радиусах.

Найдем теперь матричные элементы оператора взаимодействия с электромагнитным излучением. В дипольном приближении оператор взаимодействия электрона в валентной зоне с циркулярно поляризованным излучением имеет вид

$$V_{\text{ph}} = e\mathcal{E} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{11}(\mathbf{r}/r), \quad (20)$$

где  $\mathcal{E}$  — электрическое поле электромагнитной волны. Используя теорему Вигнера–Экарта и явный вид соответствующих коэффициентов Клебша–Гордана, можно найти следующие выражения для матричных элементов оператора  $V_{\text{ph}}$ :

$$\langle P_{1/2}, m+1 | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle = e\mathcal{E} C_{3/2,m;1,1}^{1/2,m+1} F_{1/2}, \quad (21a)$$

$$F_{1/2} = 2 \int_0^\infty r^3 [f_0(r) - g_0(r)] f_1(r) dr,$$

$$\langle P_{3/2}, m+1, i | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle = e\mathcal{E} C_{3/2,m;1,1}^{3/2,m+1} F_{3/2}^{(i)}, \quad (21b)$$

$$F_{3/2}^{(i)} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r^3 [0.6g_0(r)g_2^{(i)}(r) + 0.8g_0(r)f_2^{(i)}(r) + f_0(r)f_2^{(i)}(r)] dr,$$

$$\langle P_{5/2}, m+1, i | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle = e\mathcal{E} C_{3/2,m;1,1}^{5/2,m+1} F_{5/2}^{(i)}, \quad (21c)$$

$$F_{5/2}^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty r^3 [f_0(r)f_3^{(i)}(r) + 0.4\sqrt{6}g_0(r)g_3^{(i)}(r) - 0.2g_0(r)f_3^{(i)}(r)] dr.$$

Отметим, что  $F_{1/2}$ ,  $F_{3/2}^{(i)}$ ,  $F_{5/2}^{(i)}$  являются функциями энергии состояния непрерывного спектра.

## 5. Вычисление вероятности фотоионизации; сопоставление теории и эксперимента

Найдем теперь спектральную зависимость вероятности фотоионизации основного состояния акцептора в случае, когда энергия фотона  $\hbar\omega$  близка к энергии продольного оптического фонона. Для простоты пренебрежем рассеянием дырок в валентной зоне на акустических фононах. В этом случае время жизни в

**Таблица 2.** Параметры, характеризующие резонансные кривые, для резонанса Фано на основном состоянии акцептора

Конечное состояние	$B^2$ , rel.units	$\Gamma$ , meV	$Q$
$P_{1/2}$	0.0903	0.6737	0.3234
$P_{5/2}$	0.0435	1.9599	-1.6520
$P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_7)$	0.2130	5.3504	-1.135
$P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_8)$	0.0257	2.0110	-2.152

валентной зоне считается бесконечным и для вычисления вероятности фотоионизации можно воспользоваться золотым правилом Ферми. Основное состояние акцептора четырехкратно вырождено по значению проекции момента на ось  $z$ . Нахождение дырки в каждом из этих состояний равновероятно. Поэтому выражение для вероятности перехода имеет вид

$$\mathcal{W}(\omega) = \frac{1}{4} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \left[ \mathcal{W}_{P_{1/2},m}(\omega) + \sum_{i=1}^2 \left\{ \mathcal{W}_{P_{3/2},m,i}(\omega) + \mathcal{W}_{P_{5/2},m,i}(\omega) \right\} \right], \quad (22)$$

где  $\mathcal{W}_{P_{j/2},m,i}$  — вероятность перехода из основного состояния акцептора  $|S_{3/2}, m\rangle$  в состояние  $|\Psi_{P_{j/2},m+1,i}\rangle$ , которое получается при учете взаимодействия состояния  $|P_{j/2}, m+1, i\rangle$  и резонансного состояния. Нахождение волновой функции  $|\Psi_{P_{j/2},m+1,i}\rangle$  обсуждалось в разделе 2. Рассмотрим сумму

$$\begin{aligned} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{W}_{P_{3/2},m,i} &= \frac{2\pi}{\hbar} \int d\varepsilon \delta(\hbar\omega - \varepsilon_i - \varepsilon) \\ &\times \sum_{m=-3/2}^{3/2} |\langle \Psi_{P_{j/2},m+1,i}(\varepsilon) | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m=-3/2}^{3/2} |\langle \Psi_{P_{j/2},m+1,i}(\hbar\omega - \varepsilon_i) | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle|^2, \quad (23) \end{aligned}$$

где  $\varepsilon_i$  — энергия ионизации акцептора. Квадрат матричного элемента под знаком суммы в (23) можно найти, используя (5). Представим его в виде

$$\begin{aligned} |\langle \Psi_{P_{j/2},m+1,i}(\hbar\omega - \varepsilon_i) | V_{\text{ph}} | S_{3/2}, m \rangle|^2 &= e^2 \mathcal{E}^2 |C_{3/2,m,1,1}^{3/2,m+1}|^2 \\ &\times \frac{(\hbar\omega - \hbar\omega_0 + \Gamma_{3/2,i} Q_{3/2,i}/2)^2}{\Gamma_{3/2,i}^2/4 + (\hbar\omega - \hbar\omega_0)^2} \\ &\times |n_1^{(i)} F_{3/2}^{(1)}(\hbar\omega_0 - \varepsilon_i) + n_2^{(i)} F_{3/2}^{(2)}(\hbar\omega_0 - \varepsilon_i)|^2, \quad (24) \end{aligned}$$

где  $\Gamma_{3/2,i} = 2\pi\lambda_{3/2,i}(\hbar\omega_0 - \varepsilon_i)$ ,  $\lambda_{3/2,i}(\hbar\omega_0 - \varepsilon_i)$  —  $i$ -е собственное значение матрицы (16) для энергии  $(\hbar\omega_0 - \varepsilon_i)$ .

Выражение для  $Q_{3/2,i}$  имеет вид

$$Q_{3/2,i} = \frac{2 \sum_{j,l} n_j^{(i)*} P \int \frac{dE'}{E-E'} F_{3/2}^{(l)}(E') \int_0^\infty dq (I_j^{3/2}(q, E_\phi) \times I_l^{3/2}(q, E') + J_j^{3/2}(q, E_\phi) J_l^{3/2}(q, E'))}{\Gamma_{3/2,i} \sum_j n_j^{(i)*} F_{3/2}^{(j)}}.$$

Перепишем выражение (22) для полной вероятности фотоионизации в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(\omega) &= \mathcal{W}_{P_{1/2}}(\omega) + \mathcal{W}_{P_{3/2},1}(\omega) + \mathcal{W}_{P_{3/2},2}(\omega) \\ &+ \mathcal{W}_{P_{5/2},1}(\omega) + \mathcal{W}_{P_{5/2},2}(\omega), \quad (25) \end{aligned}$$

где введены величины  $\mathcal{W}_{P_{1/2},i}(\omega) = 0.25 \sum_{m=-3/2}^{+3/2} \mathcal{W}_{P_{j/2},m,i}(\omega)$ .

Из (25) видно, что полная вероятность фотоионизации дается суммой пяти слагаемых, каждое из которых соответствует переходу в один из возможных континуумов  $P$ -типа. Из формулы (24) следует, что каждое из пяти слагаемых в (25) может быть записано в виде формулы Фано (7)

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_{P_{j/2},i}(\omega) &= B_{P_{j/2},i}^2 \frac{(G_{j/2,i}(\omega) + Q_{j/2,i})^2}{1 + G_{j/2,i}(\omega)^2}, \\ G_{j/2,i}(\omega) &\equiv \frac{\hbar\omega - \hbar\omega_0}{\Gamma_{j/2,i}/2}. \quad (26) \end{aligned}$$

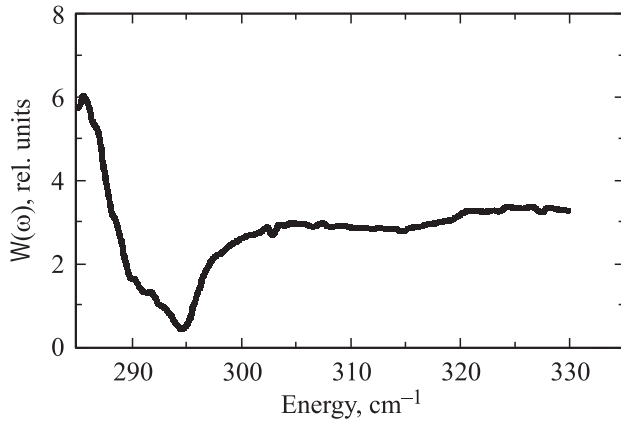
В формуле (26) множители  $B_{P_{j/2},i}^2$  играют роль квадратов амплитуд для соответствующих „парциальных“ резонансных кривых. Наши численные расчеты показали, что среди пяти величин  $B_{P_{j/2},i}^2$  существенными являются только одна или две, а остальные много меньше по величине. (Детальная информация о вычисленных параметрах приведена в табл. 2.) Таким образом, можно пренебречь в сумме в (25) малыми слагаемыми по сравнению с большими.

В экспериментах, описанных в [8], наблюдались резонансы, соответствующие основному состоянию акцептора  $1S_{3/2}$  и возбужденным состояниям  $2S_{3/2}$ ,  $2P_{3/2}$ . Результаты численного расчета величин  $B_{P_{j/2},i}^2$ ,  $\Gamma_{j/2,i}$ ,  $Q_{j/2,i}$  приведены в табл. 2. Вычисления показали, что основной вклад в вероятность ионизации вблизи резонанса  $1S_{3/2}$  вносят переходы в состояние  $P_{1/2}$  и в одно из двух состояний  $P_{5/2}$ , причем величина  $B_{P_{1/2}}^2$  более чем вдвое превосходит величину  $B_{P_{5/2},1}^2$ . Для переходов в другие состояния величина  $B_{P_{j/2},i}^2$  существенно меньше, поэтому переходами в них можно пренебречь, и соответствующие данные для них в таблице опущены. Отметим, что величина  $Q_{1/2}$  меньше единицы, что соответствует превалированию минимума над максимумом в форме резонансной кривой, что и наблюдается в эксперименте (рис. 1). Причина появления минимума состоит в том, что благодаря взаимодействию с резонансным состоянием в волновую функцию вблизи резонансного

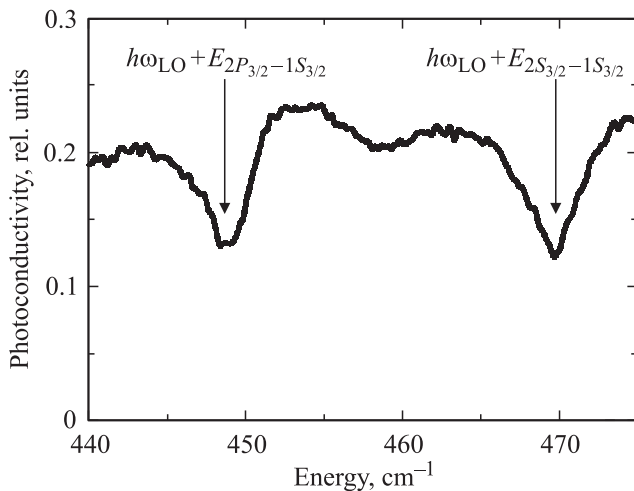
состояния примешиваются ее компоненты, вероятность перехода в которые меньше, чем в волновую функцию, не возмущенную таким взаимодействием.

Полная ширина на половине глубины провала на рис. 1 приблизительно равна 0.829 meV. Таким образом, можно считать, что ширина минимума согласуется с результатами расчетов. Но форма линии, определяемая параметрами  $Q$ , не соответствует вычисленным значениям. Поэтому мы попытались учесть кубические поправки к гамильтониану в сферической модели.

Известно [16], что кубические поправки к изотропно-му гамильтониану акцептора приводят к расщеплению состояний  $P_{5/2}$  (имевших симметрию  $\Gamma_8$ ) на два различных состояния с разными типами симметрии:  $P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_7)$  и  $P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_8)$ . Состояния других типов не расщепляются, их энергии только сдвигаются под действием кубических поправок в первом порядке теории возмущений. Поэто-



**Рис. 1.** Спектр вероятности примесных дипольных переходов в  $p$ -GaAs, легированном цинком. Экспериментальные результаты взяты из работы [8].



**Рис. 2.** Спектр фотопроводимости  $p$ -GaAs, легированного цинком, в области резонансов, соответствующих возбужденным состояниям акцептора [8].

**Таблица 3.** Параметры, характеризующие резонансные кривые, для резонанса Фано на возбужденных состояниях акцептора

Переход	$B^2$ , rel.units	$\Gamma$ , meV	$Q$	$\hbar/\tau$ , meV
$2S_{3/2}-P_{1/2}$	0.0495	0.3115	-0.7669	0.37
$2P_{3/2}-P_{1/2}$	0.0542	0.1084	-0.7642	0.16

му мы ограничились нахождением состояний  $P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_7)$  и  $P_{5/2}^{(\text{cub})}(\Gamma_8)$ . Затем мы вычислили новые значения параметров Фано с использованием этих состояний. Полученные величины тоже приведены в табл. 2. Однако оказалось, что никакого улучшения согласия между теоретическими и экспериментальными данными не произошло. Это может быть связано с несколькими причинами: недостаточностью порядка теории возмущений по кубическим поправкам, неточностью экспериментальных данных в спектральной области  $E < 300 \text{ cm}^{-1}$  и др.

В табл. 3 приведены значения вычисленных величин  $B_{P_{j/2,i}}^2$ ,  $\Gamma_{j/2,i}$ ,  $Q_{j/2,i}$  для резонансных состояний, связанных с возбужденными состояниями акцептора  $2S_{3/2}$  и  $2P_{3/2}$ . Оказывается, что основной вклад в вероятность ионизации вблизи этих резонансов вносят переходы в состояние  $P_{1/2}$ . Вкладом от остальных континуумов можно пренебречь.

Величины  $\Gamma_{1/2}$  и  $Q_{1/2}$ , приведенные в табл. 3, неудовлетворительно описывают наблюдаемые резонансы (рис. 2). Из экспериментальных данных можно получить приблизительные значения ширин минимумов: 0.470 meV для резонанса на состоянии  $2S_{3/2}$  и 0.467 meV для резонанса на состоянии  $2P_{3/2}$ . Таким образом, наблюдаемая величина  $\Gamma$  примерно вдвое больше рассчитанной для резонанса  $2S_{3/2}$  и примерно вчетверо больше для резонанса  $2P_{3/2}$ . Из рис. 2 видно, что ширина провалов для резонансов  $2S_{3/2}$  и  $2P_{3/2}$  примерно одинакова и их глубина меньше половины от величины фототока около резонансных областей. Эти особенности могут быть объяснены, если предположить, что рассеяние дырок в валентной зоне на акустических фонах приводит к несправедливости золотого правила квантовой механики для вычисления вероятности переходов. Отметим, что если бы это правило работало, то, согласно выражению (26), провал в спектре фотопроводимости в окрестности резонанса был бы до значения, близкого к нулю, что не соответствует результату эксперимента. Предполагая, что время жизни  $\tau$  слабо зависит от энергии вблизи резонанса, можно найти его величину из глубины провалов. В этом случае вероятность дипольного перехода имеет вид

$$\mathcal{W}_\tau(E) = 2\tau \int dE' \frac{|\langle \Psi(E') | \hat{T} | i \rangle|^2}{(E - E')^2 + \hbar^2 \tau^{-2}}. \quad (27)$$

С учетом рассеяния в непрерывном спектре ширина резонанса примерно равна сумме  $(\Gamma + \hbar/\tau)$ , и эта величина согласуется с результатами эксперимента.

Необходимо отметить, что в полярных полупроводниках (таких как *p*-GaAs) наряду с РО-взаимодействием с продольным оптическим фононом осуществляется также и деформационное оптическое (ДО) взаимодействие [12]. (Поперечные оптические фононы в полярных материалах имеют другую энергию, чем продольные, и в нашем рассмотрении не участвуют.) Вид оператора ДО-взаимодействия приведен в [17]. Константу ДО-взаимодействия можно найти в [12], она приблизительно равна  $d_0 = 48$  eV для *p*-GaAs.

Можно показать, что размерный множитель, которому пропорциональны величины (16), равен

$$F_{\text{PO}} = \frac{\hbar\omega_0}{2\pi^2} \left( \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} - 1 \right) \approx 0.334 \text{ meV}. \quad (28)$$

Эта величина характеризует силу РО-взаимодействия. А аналогичный множитель для случая ДО-взаимодействия оказывается равным

$$F_{\text{DO}} = \frac{d_0^2}{(2\pi)^3 3\hbar\omega_0} \frac{1}{\gamma_1} \frac{a}{a_0} \frac{m_0}{\bar{M}} \approx 0.0226 \text{ meV}. \quad (29)$$

Здесь  $a_0$  — эффективный боровский радиус,  $m_0$  — масса свободного электрона,  $a$  — постоянная решетки,  $\bar{M}$  — приведенная масса иона решетки ( $\bar{M}^{-1} \equiv M_{\text{Ga}}^{-1} + M_{\text{As}}^{-1}$ ).

Таким образом, сила РО-взаимодействия в нашем случае почти в 15 раз превышает силу ДО-взаимодействия. Поэтому последнее в нашей задаче несущественно. ДО-взаимодействие практически не влияет на параметры резонансных кривых в спектре фотопроводимости.

## 6. Заключение

В настоящей работе теоретически описаны особенности в спектрах примесной фотопроводимости GaAs, легированного мелкими акцепторами. Резонансные особенности обусловлены взаимодействием дырок с полярными оптическими фононами. Кратко представлены результаты обобщения теории Фано на случай произвольного числа континуумов, взаимодействующих с произвольным числом дискретных уровней.

Рассмотрены резонансы Фано, связанные с основным и с возбужденными состояниями акцептора в *p*-GaAs. Полученные численные результаты для ширин резонансов согласуются с измеренными величинами. Однако используемая модель не дает корректного описания формы как для резонанса на основном состоянии акцептора, так и для резонансов на возбужденных состояниях. Для последнего случая высказана гипотеза о возможном уширении линии в эксперименте из-за рассеяния дырок в валентной зоне на акустических фононах (при котором нарушается золотое правило Ферми для вычисления вероятности переходов).

## Приложение

Имеется четыре решения системы (10с) для радиальных функций  $P_{3/2}$  при отсутствии кулоновского потенциала в случае непрерывного спектра (энергия меньше нуля, поскольку рассматривается валентная зона)

$$f_2(r) = +1/\sqrt{10} j_1(k_1 r), \quad g_2(r) = +3/\sqrt{10} j_3(k_1 r),$$

$$k_1^2 = -E/(1 + \mu),$$

$$f_2(r) = +1/\sqrt{10} y_1(k_1 r), \quad g_2(r) = +3/\sqrt{10} y_3(k_1 r),$$

$$f_2(r) = -3/\sqrt{10} j_1(k_2 r), \quad g_2(r) = +1/\sqrt{10} j_3(k_2 r),$$

$$k_2^2 = -E/(1 - \mu),$$

$$f_2(r) = -3/\sqrt{10} y_1(k_2 r), \quad g_2(r) = +1/\sqrt{10} y_3(k_2 r),$$

где  $j_i(x)$ ,  $y_i(x)$  — сферические функции Бесселя первого и второго рода [15]

$$j_1(x) = \frac{\sin(x)}{x^2} - \frac{\cos(x)}{x},$$

$$j_3(x) = \left( \frac{15}{x^4} - \frac{6}{x^2} \right) \sin(x) + \left( \frac{1}{x} - \frac{15}{x^3} \right) \cos(x),$$

$$y_1(x) = -\frac{\sin(x)}{x} - \frac{\cos(x)}{x^2},$$

$$y_3(x) = \left( \frac{1}{x} - \frac{15}{x^3} \right) \sin(x) + \left( \frac{6}{x^2} - \frac{15}{x^4} \right) \cos(x).$$

При отсутствии кулоновского потенциала и положительной энергии (локализованные состояния) имеется два решения (10с), спадающих на бесконечности:

$$f_2(r) = +1/\sqrt{10} K_1(\kappa_1 r), \quad g_2(r) = -3/\sqrt{10} K_3(\kappa_1 r),$$

$$\kappa_1^2 = E/(1 + \mu),$$

$$f_2(r) = +3/\sqrt{10} K_1(\kappa_2 r), \quad g_2(r) = +1/\sqrt{10} K_3(\kappa_2 r),$$

$$\kappa_2^2 = E/(1 - \mu),$$

где функции  $K_1(x)$ ,  $K_3(x)$  могут быть найдены с помощью модифицированных сферических функций Бесселя [14]

$$K_1(x) = \frac{\pi \exp(-x)}{2x} \left( 1 + \frac{1}{x} \right),$$

$$K_3(x) = \frac{\pi \exp(-x)}{2x} \left( 1 + \frac{6}{x} + \frac{15}{x^2} + \frac{15}{x^3} \right).$$

Соответствующие решения для состояний  $P_{5/2}$  в непрерывном спектре имеют вид

$$f_3(r) = +\sqrt{3/5} j_1(k_1 r), \quad g_3(r) = +\sqrt{2/5} j_3(k_1 r),$$

$$f_3(r) = +\sqrt{3/5} y_1(k_1 r), \quad g_3(r) = +\sqrt{2/5} y_3(k_1 r),$$

$$f_3(r) = -\sqrt{2/5} j_1(k_2 r), \quad g_3(r) = +\sqrt{3/5} j_3(k_2 r),$$

$$f_3(r) = -\sqrt{2/5} y_1(k_2 r), \quad g_3(r) = +\sqrt{3/5} y_3(k_2 r).$$



В дискретном спектре имеется два убывающих на бесконечности решения

$$f_3(r) = +\sqrt{3/5} K_1(\kappa_1 r), \quad g_3(r) = -\sqrt{2/5} K_3(\kappa_1 r),$$

$$f_3(r) = +\sqrt{2/5} K_1(\kappa_2 r), \quad g_3(r) = +\sqrt{3/5} K_3(\kappa_2 r).$$

Приведем решения для состояний  $S_{3/2}$  в отсутствие кулоновского потенциала, которые соответствуют дискретному спектру и убывают на бесконечности,

$$f_0(r) = +\sqrt{6/7} K_0(\kappa_1 r), \quad g_0(r) = -\sqrt{1/7} K_2(\kappa_1 r),$$

$$f_0(r) = +\sqrt{1/7} K_0(\kappa_2 r), \quad g_0(r) = +\sqrt{6/7} K_2(\kappa_2 r).$$

где

$$K_0(x) = \frac{\pi \exp(-x)}{2x}, \quad K_2(x) = \frac{\pi \exp(-x)}{2x} \left( 1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2} \right).$$

## Список литературы

- [1] H.J. Hrostowski, R.H. Kaiser. *J. Phys. Chem. Solids* **4**, 148 (1958).
- [2] G.D. Watkins, W.B. Fowler. *Phys. Rev. B* **16**, 4524 (1977).
- [3] U. Fano. *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
- [4] R. Baron, M.H. Young. *Solid State Commun.* **47**, 167 (1983).
- [5] Б.А. Андреев. Автореф. докт. дис. Ин-т физики микроструктур, Н. Новгород (2004). 32 с.
- [6] В.А. Андреев, А.В. Антонов, В.Я. Алёшкин, Д.В. Козлов. 28th Int. Conf. on the physics of semiconductors. Vienna, Austria (2006). P. 302.
- [7] В.Я. Алёшкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич. *ФТП* **42**, 899 (2008).
- [8] В.Я. Алёшкин, А.В. Антонов, В.И. Гавриленко, Л.В. Гавриленко, Б.Н. Звонков. *ЖЭТФ* **136**, 543 (2009).
- [9] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973).
- [10] F.H. Mies. *Phys. Rev.* **175**, 164 (1968).
- [11] A.F. Starace. *Phys. Rev. B* **5**, 1773 (1972).
- [12] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Наука, М. (1984). 351 с.
- [13] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Наука, М. (1989). 768 с.
- [14] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. Наука, М. (1979). 832 с.
- [15] Д.А. Варшавович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. Наука, Л. (1975). 439 с.
- [16] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B* **9**, 1525 (1974).
- [17] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972). 584 с.