

## СПЕКТРЫ ЭНЕРГИИ И ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕЛКИХ ПРИМЕСЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ

В. И. Галиев, А. Ф. Полупанов

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук, 103907, Москва, Россия  
(Получена 11 февраля 1993 г. Принята к печати 19 марта 1993 г.)

Вычислены зависимости энергий уровней и сил осцилляторов дипольных оптических переходов из основного в нечетные возбужденные состояния мелкого акцептора, расположенного в центре сферической GaAs-квантовой точки от ее радиуса. В сферическом приближении эти зависимости найдены как функции отношения эффективных масс тяжелой и легкой дырки материала точки, что позволило, в частности, проследить переход к случаю мелкого водородоподобного донора. При малых радиусах точки практически все поглощение донора ( $\sim 99\%$ ) приходится на переход  $1s-2p$ . В рамках используемых приближений задача решена точно с помощью развитого авторами ранее алгебраического метода.

1. Интенсивные исследования состояний мелких примесей в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами ведутся уже более 10 лет и им посвящено большое число работ (см., например, обзор [1]). Это связано, в частности, с созданием новых типов структур — например, таких как квантовые проволоки и квантовые точки и соответственно с необходимостью исследования состояния примесей в этих структурах, с попытками улучшить результаты расчетов, используя более точные приближения и более точные методы. Начиная с первого расчета [2], примесные уровни как для мелких доноров, так и для мелких акцепторов вычислялись многократно в различных приближениях как в случае примесей, расположенных в квазидвумерных квантовых ямах (см., например, [3–6]), так и в квазиодномерных квантовых проволоках [7, 8]. В случае же полупроводниковых квантовых точек или полупроводниковых микрокристаллов в диэлектрической матрице имеются фактически лишь расчет [9] энергий основного и первого возбужденного состояний мелкого водородоподобного донора, расположенного в центре сферической квантовой точки GaAs— $Ga_{1-x}Al_xAs$ , и многочисленные расчеты в различных приближениях уровней энергии экситона и «свободной» дырки в них [10–13] (отметим, что при малых радиусах сферической квантовой точки, когда экситон квантуется как целое, эти задачи эквивалентны, см. [12]). Следует отметить, что в подавляющем большинстве работ, посвященных расчету примесных состояний в полупроводниковых квантовых ямах, вычислялись лишь энергии основного и, в лучшем случае, нижних возбужденных состояний, интенсивности же оптических переходов, т. е. силы осцилляторов оптических переходов между связанными состояниями примеси в квантовой яме, вычислялись до настоящего времени только в работе [6] (см. также обзор [1]) для случая мелкого акцептора в квазидвумерной квантовой яме GaAs—GaAlAs. Между тем силы осцилляторов дипольных оптических переходов являются одной из важнейших спектральных характеристик, знание которой необходимо, в частности, для правильной и надежной идентификации оптических переходов [14], и в настоящее время измерения и расчеты сил осцилляторов как для примесей в объеме, так и в структурах с квантовыми ямами вызывают большой интерес [15–17]. Кроме того, важно заметить, что практически все расчеты состояний

примесей в квантовых ямах, в том числе и расчет [6] энергий уровней и сил осцилляторов переходов, выполнены с использованием вариационного метода (исключение составляет работа [9]), обладающего хорошо известными недостатками, наиболее существенным из которых является неопределенная точность получаемых вариационных волновых функций, необходимых, в частности, как раз для вычисления сил осцилляторов переходов. В настоящей работе используется недавно развитый точный (и, естественно, невариационный) подход к расчету состояний мелкого акцептора в объеме полупроводника [18], который основан на новом алгебраическом методе построения точных решений сингулярных многокомпонентных радиальных уравнений Шредингера [19, 20]. Мы исследуем зависимости энергий основного и ряда возбужденных уровней, а также сил осцилляторов дипольных оптических переходов мелкого акцептора от радиуса сферической GaAs-квантовой точки. Мы вычислим также в рамках сферического приближения зависимости энергий уровней и сил осцилляторов переходов в мелком акцепторе от радиуса квантовой точки для различных значений отношений эффективных масс тяжелой и легкой дырок, что позволяет, в частности, оценить эти величины для акцепторов в квантовых точках из различных материалов (поскольку в сферическом приближении при использовании безразмерных единиц это отношение является единственным параметром, характеризующим полупроводник) и проследить переход от случая мелкого акцептора к случаю мелкого водородоподобного донора в квантовой точке.

2. Рассмотрим для определенности акцепторный примесный атом, расположенный в центре сферической полупроводниковой квантовой точки радиуса  $R_0$ . Потенциальный барьер на границе квантовой точки будем считать бесконечно высоким. Так как симметрия системы сферическая, то в приближении большого спин-орбитального расщепления валентных зон, которое хорошо выполняется в случае акцептора в GaAs (как и для большинства других полупроводников с решеткой алмаза и цинковой обманки), гамильтониан Латтинджера акцептора можно представить в виде [21]

$$H = p^2 - \mu (P^{(2)} \cdot J^{(2)}) + \delta \{ [P^{(2)} \times J^{(2)}]_4^4 + \frac{\sqrt{70}}{5} [P^{(2)} \times J^{(2)}]_0^4 + [P^{(2)} \times J^{(2)}]_{-4}^4 + \frac{2Z}{r} \}. \quad (1)$$

Здесь  $P^{(2)}$  и  $J^{(2)}$  — неприводимые сферические тензорные операторы второго ранга, составленные как в [14] из компонент вектора  $p$  и вектора  $J$  момента количества движения с  $J = 3/2$ ,  $\mu = (4\gamma_2 + 6\gamma_3) / 5\gamma_1$ ,  $\delta = (\gamma_3 - \gamma_2) / \gamma_1$ , где  $\gamma_i$  — параметры Латтинджера валентной зоны; энергии и расстояния измеряются соответственно в единицах  $R_a = m_0 e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2 \gamma_1$  и  $a = \hbar^2 \kappa \gamma_1 / m_0 e^2$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона,  $\kappa$  — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла,  $Z$  — величина заряда.

Слагаемые в гамильтониане (1), описывающие гофрировку валентных зон (пропорциональные  $\delta$ ), будем учитывать в первом порядке по  $\delta$  [21], поскольку  $\delta \ll 1$  для GaAs и для большинства кубических полупроводников, и это приближение хорошо описывает состояния акцептора в них [14, 21].

Волновую функцию, соответствующую гамильтониану (1) и преобразующуюся по одному из представлений  $\Gamma = \Gamma_{\frac{7}{2}^+}$ ,  $\Gamma_{\frac{7}{2}^-}$  и  $\Gamma_{\frac{5}{2}^+}$  группы  $T_d \times C_i$  гамильтониана, будем искать в виде разложения по известным функциям  $L - J$ -связи

$$\Psi = r^{-1} \{ [\beta_h (1 + \beta_f^2)^{1/2} f_i - \beta_l (1 + \beta_h^2)^{1/2} f_n ] \Phi (LJ\Gamma n) + [f_h (1 + \beta_h^2)^{1/2} - f_l (1 + \beta_f^2)^{1/2}] \Phi (L + 2, J\Gamma n) \} (\beta_h - \beta_l)^{-1}, \quad (2)$$

$$\Phi(LJF\Gamma n) = \sum_{F_z} C_{nF_z}^{F\Gamma} |LJFF_z\rangle.$$

Здесь  $|LJFF_z\rangle$  — функции  $L - J$ -связи,  $F$  — квантовое число полного момента  $F = L + J$ ,  $L$  — квантовое число углового момента,  $n$  нумерует функции, принадлежащие данному представлению (ряд представления), константы  $C_{nF_z}^{F\Gamma}$  выбраны так, чтобы функции  $\Phi(LJF\Gamma n)$  преобразовывались по данному представлению  $\Gamma$  [22]. Константы  $\beta_{h,l}$  равны

$$\beta_{h,l} = \frac{u - y \pm [(u - v)^2 + 4w^2]^{1/2}}{2w},$$

$$u = 1 + \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu + \Delta(L, L), \quad v = 1 - \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu + \Delta(L + 2, L + 2),$$

$$w = \frac{2\beta\mu}{1 + \beta^2} - \Delta(L, L + 2),$$

$$\beta = 3^{L-F+1} \left[ \frac{F + 3/2}{F - 1/2} \right]^{1/2}.$$

$$\Delta(LL') = 3\sqrt{10} \delta\alpha^{(F\Gamma)} (2F + 1) \begin{Bmatrix} J & J & 2 \\ L & L & 2 \\ F & F & 4 \end{Bmatrix} \times \\ \times \left\{ \frac{L'(L + L' + 1)(L + 1)[2 + (L' - L)/2]}{(2L' - 1)(2L + 3)} \right\}^{1/2}.$$

Здесь  $\alpha^{(F\Gamma)}$  — константы, вычисленные в [22]; таблица в фигурных скобках —  $9j$ -символ;  $f_h(r)$  и  $f_l(r)$  в (2) — радиальные волновые функции. Здесь следует отметить, что эти функции по традиции отмечены индексами  $h$  и  $l$ , обозначающими соответственно «тяжело-» и «легко-дырочный» характер их асимптотического поведения, хотя на самом деле обе эти радиальные функции (в случае связанных состояний акцептора в объеме полупроводника) с экспоненциальной точностью имеют легко-дырочный характер, т. е. убывают на бесконечности с соответствующим показателем экспоненты [19]. Использование таких обозначений было связано с тем, что асимптотику этих функций находили ранее неправильно [23, 24], ограничиваясь лишь первым членом соответствующего асимптотического разложения, что и приводит к появлению соответственно тяжело- и легко-дырочной экспонент в асимптотике [19].

Уравнения для вектор-функций  $f = \begin{pmatrix} f_h \\ f_l \end{pmatrix}$  имеют вид

$$r^2 \frac{d^2 f}{dr^2} + rp_0 \frac{df}{dr} + [q_0 + rq_1 + r^2 Fq_2] f = 0, \quad (3)$$

где

$$(p_0)_{11} = 0, \quad (p_0)_{12} = \frac{(\beta_h - \beta_l)^{-1}}{(u - \beta_h w)} \left( \frac{1 + \beta_l^2}{1 + \beta_h^2} \right)^{1/2} [2\beta_h(u - v) + \\ + (2L + 1)\beta_h^2 w + (2L + 5)w],$$

$$(q_0)^{11} = \frac{(\beta_h - \beta_l)^{-1}}{(u - \beta_h w)} [L(L+1)\beta_l u - (2L^2 + 6L + 3)w -$$

$$- (L+2)(L+3)\beta_h v],$$

$$(q_0)_{12} = \frac{(\beta_h - \beta_l)^{-1}}{(u - \beta_h w)} \left( \frac{1 - \beta_l^2}{1 + \beta_h^2} \right)^{1/2} \{ \beta_h [L(L+1)u -$$

$$- (L+2)(L+3)v + 2(u-v)] + \beta_h^2 (L^2 + 4L + 1)w - (L^2 + 2L - 2)w \},$$

$$(q_1)_{11} = 2Z/(u - \beta_h w), \quad (q_1)_{12} = 0, \quad (q_2)_{11} = 1/(u - \beta_h w), \quad (q_2)_{12} = 0.$$

Остальные элементы матриц коэффициентов в уравнениях (3) получаются при одновременной взаимной замене индексов 1, 2 и  $h, l$ .

Наиболее важной особенностью рассматриваемой задачи [как и других задач, приводящих к решению уравнений типа (3)] является наличие особых точек у матричного радиального уравнения Шредингера (3). Действительно, перейдем от  $n$  уравнений второго порядка (3) к системе  $2n$  уравнений первого порядка с

помощью замены  $\varphi = \begin{pmatrix} f \\ r \cdot df/dr \end{pmatrix}$ :

$$r \frac{d\varphi}{dr} = (\alpha_0 + \alpha_1 r + \alpha_2 r^2), \quad (3a)$$

где матрицы  $\alpha_i, i=0, 1, 2$  очевидным образом получаются из матриц  $p_0$  и  $q_l$ . При такой записи очевидно, что точка  $r=0$  — это регулярная особая точка. Поскольку мы будем искать решения (3) на конечном интервале изменения  $r$ , в нашем случае имеется только эта особая точка. В [19, 20] развит алгебраический метод построения всех решений из фундаментальной системы уравнений (3a) [а значит, и (3)] при произвольной конечной размерности  $n$  и для случая как простой матрицы  $\alpha_0$ , так и наиболее общего случая жордановой формы этой матрицы. В рассматриваемом конкретном случае ( $\alpha_0$  — простая,  $n=2$ ), воспользовавшись результатами [19, 20], можно сразу записать все решения из фундаментальной системы решений уравнений (3). Тогда регулярные при  $r=0$  точные решения уравнений (3) можно представить в следующем виде:

$$f^{(1)} = r^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} f_k^{(1)} r^k, \quad f^{(2)} = r^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} f_k^{(2)} r^k + K f^{(1)} \ln r, \quad (4)$$

где  $\rho_1 = L+3, \rho_2 = L+1$ , а величины  $f_k^{(j)}$  и  $K$  определяются из соотношений

$$\begin{cases} \Gamma_0(\rho_1) f_0^{(1)} = 0 \\ \Gamma_k(\rho_1) f_k^{(1)} + q_1 f_{k-1}^{(1)} + q_2 f_{k-2}^{(1)} = 0, \quad k=1, 2, \dots (f_l = 0, l < 0), \end{cases} \quad (5a)$$

$$\begin{cases} \Gamma_0(\rho_2) f_0^{(2)} = 0 \\ \Gamma_1(\rho_2) f_1^{(2)} + q_1 f_0^{(2)} = 0 \\ \Gamma_k(\rho_2) f_k^{(2)} + q_1 f_{k-1}^{(2)} + q_2 f_{k-2}^{(2)} + K \{ 2(\rho_2 + k) + \rho_2 - 1 \} f_{k-\rho_1+\rho_2}^{(1)} = 0, \quad k=1, 2, \dots \end{cases} \quad (5b)$$

Здесь  $\Gamma_k(\rho)$  — это последовательность матриц:

$$\Gamma_k(\rho) = (k + \rho)(k + \rho - 1) + p_2(k + \rho) + q_0, \quad k=0, 1, \dots$$

Степенные ряды в (4) имеют бесконечный радиус сходимости [20] и, следовательно, выражения (2), (4) и (5) полностью определяют волновую функцию, соответствующую гамильтониану (1), и для того, чтобы вычислить энергии уровней и соответствующие волновые функции акцептора в квантовой точке, необходимо только удовлетворить граничным условиям при  $r=R_0$ , т. е. найти такие значения энергий  $E$  и линейные комбинации решений (4), для которых выполняется условие  $\begin{pmatrix} f_h \\ f_l \end{pmatrix} \Big|_{r=R_0} = 0$ . Удобнее всего это сделать следующим обра-

зом. Образует из решений (4) в точке  $R_0$  матрицу  $A$  размером  $2 \times 2$ :

$$A(E) = \begin{pmatrix} f_h^{(1)} & f_h^{(2)} \\ f_l^{(1)} & f_l^{(2)} \end{pmatrix} \Big|_{r=R_0}.$$

Тогда процедура вычисления энергий уровней в некотором интервале  $[E', E'']$  сводится к численному решению «стрельбой» уравнения  $\det A(E) = 0$ . Ясно, что если при некотором  $E = E_0$  выполняется условие  $\det A(E_0) = 0$ , то

$$\begin{pmatrix} f_h^{(1)} \\ f_l^{(1)} \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} f_h^{(2)} \\ f_l^{(2)} \end{pmatrix},$$

где константа  $\alpha$  соответствует собственному значению  $E_0$ . Тогда нормированное решение, соответствующее энергии  $E_0$  и удовлетворяющее граничным условиям, имеет вид

$$\varphi(r) = C \left\{ \begin{pmatrix} f_h^{(1)} \\ f_l^{(1)} \end{pmatrix} - \alpha \begin{pmatrix} f_h^{(2)} \\ f_l^{(2)} \end{pmatrix} \right\},$$

где константа  $C$  находится из условия нормировки

$$\int_0^{R_0} \varphi^T \varphi dr = 1.$$

Следует отметить, что в рамках нашего подхода совершенно аналогично вычисляются и уровни энергии и волновые функции «свободной» дырки в квантовой точке, т. е. для дырки в отсутствие акцептора в яме. Для этого нужно просто положить  $Z=0$  в уравнении (3), при этом выражения (4) и (5), как и прежде, являются точными решениями (3) и полностью определяют волновую функцию — в данном случае это есть просто разложение комбинаций соответствующих сферических функций Бесселя, а коэффициент перед логарифмическим членом в (4) обращается в нуль — он пропорционален  $Z$  [19]. Отметим, что ранее уровни энергии для такой системы вычислялись в [12] в связи с проблемой экситонных состояний в микрокристалле — эта задача полностью эквивалентна рассмотренной позднее другим методом задаче об уровнях энергии свободной дырки в сферической квантовой точке [13]. Здесь мы упомянули об этой задаче для полноты, поскольку наш подход позволяет единым образом, изменяя только входные параметры программы, рассмотреть как случай акцептора, так и свободной дырки и проследить непрерывно переход от случая акцептора и дырки к случаю водородоподобного донора и электрона [9], который происходит при стремлении  $\mu$  к нулю.

3. Зная волновые функции акцептора, легко вычислить силы осцилляторов внутрипримесных переходов. Поскольку симметрия рассматриваемой системы сферическая, силы осцилляторов дипольных оптических переходов между связанными состояниями  $a$  и  $b$  акцептора в квантовой точке даются известным выражением для объема полупроводника [14, 25]:

$$f(a \rightarrow b) = \frac{2m_0}{\hbar^2 \gamma_1} \frac{E_b - E_a}{g_a} \sum_{m=1}^{g_a} \sum_{n=1}^{g_b} |(\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})_{mn}|^2. \quad (6)$$

Здесь  $E_a$ ,  $E_b$  и  $g_a$ ,  $g_b$  — это соответственно энергии и кратности вырождения уровней  $a$  и  $b$ ,  $\mathbf{e}$  — единичный вектор поляризации излучения. Коэффициент перед двойной суммой в (6) определяется правилом сумм для акцепторных примесей, которое зависит лишь от одного параметра полупроводника  $\gamma_1$  [25]. Здесь нам удобнее перейти к другим радиальным функциям  $R_L$  и  $R_{L+2}$ , характеризующимся определенным значением квантового числа углового момента  $L$ , которые равны множителям соответственно перед  $\Phi(LJ\Gamma n)$  и  $\Phi(L+2, J\Gamma n)$  в выражении (2). Тогда, подставляя в (6) выражение (2) для волновых функций и используя теорему Вигнера—Экарта, имеем

$$f(a \rightarrow b) = \frac{E_b - E_a}{g_a} \sum_{mn} \left\{ \sum_L (-1)^{F-F_z} C_{nF_z}^{F_a \Gamma_a} \cdot C_{mF_z}^{F_b \Gamma_b} \cdot \begin{pmatrix} F_a & 1 & F_b \\ -F_z & 0 & F_z \end{pmatrix} \times \right. \\ \left. \times (L_a J F_a \parallel r \parallel L_b J F_b) \right\}^2. \quad (7)$$

В этом выражении энергии измеряются в единицах  $R_a$ , а расстояния — в единицах  $a$ . Приведенный матричный элемент в (7) равен

$$(L_a J F_a \parallel r \parallel L_b J F_b) = \\ = (-1)^{F_b + J + L_a + 1} [(2F_a + 1)(2F_b + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L_b & J & F_b \\ F_a & 1 & L_a \end{Bmatrix} (L_z \parallel r \parallel L_b). \quad (8)$$

Здесь таблица в фигурных скобках —  $6j$ -символ.

4. Результаты расчета зависимости энергий уровней и сил осцилляторов дипольных оптических переходов из основного в возбужденные нечетные состояния мелкого акцептора в GaAs-квантовой точке от ее радиуса  $R$  приведены в табл. 1. Здесь же (как и в следующих таблицах) для полноты приведена зависимость энергии наиболее низкого уровня свободной дырки (вторая колонка), т. е. в отсутствие примесного центра, от  $R$ . Ясно, что поскольку эта энергия обратно пропорциональна квадрату радиуса точки [12], достаточно ее знать лишь при каком-либо одном значении радиуса. Из таблицы, в частности, видно, что хотя энергии уровней очень сильно зависят от  $R$ , силы осцилляторов некоторых переходов практически не изменяются при изменении радиуса в широких пределах. Это характерно, например, для так называемой линии  $D$  (переход  $1\Gamma_8^+ - 2\Gamma_8^+$ ) — самой интенсивной линии в объеме полупроводника. С другой стороны, переход  $1\Gamma_8^+ - 1\Gamma_6^-$ , которому соответствует очень слабая, практически незаметная линия в объеме, становится самым интенсивным в квантовой точке

Таблица 1

Энергии уровней ( $E$ , в единицах  $R_a$ ) и силы осцилляторов оптических переходов ( $f$ , в единицах  $10^{-2}$ ) из основного в возбужденные состояния мелких акцепторов в GaAs-квантовой точке как функции ее радиуса  $R$  (в единицах  $a$ );  $\mu = 0.753$ ,  $\delta = 0.09$

$R$	$1\Gamma_8^+$ ( $Z=0$ )	$E1\Gamma_8^+$	$E1\Gamma_8^-$	$f$	$E2\Gamma_8^-$	$f$	$E1\Gamma_7^-$	$f$	$E3\Gamma_8^-$	$f$	$E1\Gamma_6^-$	$f$
8	0.112	-2.17	-0.928	0.44	-0.593	14	-0.464	5.7	-0.413	1.0	0.061	3.8
5	0.287	-2.17	-0.924	0.44	-0.567	15	-0.404	7.0	-0.324	1.6	0.649	12
3	0.796	-2.14	-0.840	0.45	-0.302	16	0.0083	9.1	0.228	3.5	2.67	28
2	1.79	-1.96	-0.448	0.36	0.537	16	1.15	9.7	1.69	6.2	6.97	40
1	7.16	0.628	3.08	0.17	6.62	13	8.86	9.1	11.2	9.1	31.7	49
0.5	28.7	16.3	21.1	0.075	35.0	12	43.6	8.5	53.7	11	134.1	51

малого радиуса, так что на этот переход приходится более половины всего поглощения (суммы сил осцилляторов). Две линии, которым в объеме соответствуют переходы в почти вырожденные возбужденные состояния ( $1\Gamma_7^-$  и  $3\Gamma_8^-$ ), и которые не разрешаются в спектроскопических измерениях и обозначаются одной линией  $C$ , при уменьшении радиуса квантовой точки расходятся, так что становятся в принципе вполне разрешимыми. Сила осциллятора второй из них вырастает на порядок и она становится более интенсивной, чем первая.

Представляется интересным вычислить спектр энергий и интенсивности спектральных линий не только для конкретного набора значений параметров, т. е. для конкретного материала, но и их зависимость от этих параметров, поскольку это позволит проследить переход от случая акцептора к случаю водородоподобного донора в квантовой точке и оценить эти характеристики для разных полупроводников. Действительно, в сферическом приближении, когда  $\delta = 0$ , при использовании безразмерных единиц единственным параметром, характеризующим полупроводник, является параметр  $\mu$  в (1) и (3). Величина параметра  $\mu$  характеризует эффективные массы тяжелой и легкой дырок:  $m_h = 1/(1 - \mu)\gamma_1$ ,  $m_l = 1/(1 + \mu)\gamma_1$  и полностью определяет отношение этих масс  $\beta = m_h/m_l$ ;  $\beta = (1 + \mu)/(1 - \mu)$ . Вычислив спектры при различных параметрах  $\mu$ , мы будем знать их (в безразмерных единицах) для акцепторов в квантовых точках из различных полупроводников. Более того, изменяя  $\mu$  так, чтобы этот параметр стремился к нулю, мы как раз и сможем проследить переход от случая акцептора к случаю водородоподобного донора в квантовой точке, поскольку при  $\mu = 0$  системы уравнений (3) расщепляются и сводятся к радиальным уравнениям для атома водорода. В табл. 2, 3 приведены результаты расчетов зависимостей энергий

Таблица 2

То же, что и в табл. 1 для мелкого акцептора в полупроводниковой квантовой точке при  $\mu = 0.8$  и  $\mu = 0.5$ ,  $\delta = 0$ .  $E1\Gamma^+(Z=0)$  — энергия основного состояния свободной дырки

$\mu$	0.8					0.5				
	5	3	2	1	0.5	5	3	2	1	0.5
$E1\Gamma^+(Z=0)$	0.244	0.677	1.52	6.09	24.4	0.378	1.05	2.36	9.44	37.8
$E1S_{3/2}$	-2.58	-2.57	-2.46	-0.58	12.0	-1.29	-1.19	-0.68	3.84	27.0
$E2P_{3/2}$	-1.14	-1.10	-0.83	1.95	17.0	-0.42	-0.054	0.97	7.98	39.8
$f$	0.21	0.21	0.18	0.05	0.01	4.3	5.3	5.6	5.4	5.1
$E2P_{5/2}$	-0.64	-0.45	0.22	5.35	29.8	-0.095	0.76	2.81	15.4	70.0
$f$	17.9	20.5	21.3	19.1	16.9	39.6	45.6	45.7	44.3	43.2
$E2P_{1/2}$	0.69	2.78	7.21	32.6	138	0.44	2.10	5.69	26.6	114
$f$	7.49	21.3	34.2	45.8	48.7	26.7	37.7	41.0	41.9	41.6

Таблица 3

То же, что и в табл. 2.  $\mu = 0.3$  и  $\mu = 0.1$ ,  $\delta = 0$

$\mu$	0.3					0.1				
	5	3	2	1	0.5	5	3	2	1	0.5
$E1\Gamma^+(Z=0)$	0.390	1.08	2.44	9.76	39.0	0.394	1.10	2.46	9.86	39.4
$E1S_{3/2}$	-1.08	-0.94	0.37	4.51	28.8	-1.002	-0.86	-0.26	4.72	29.4
$E2P_{3/2}$	-0.22	0.38	1.88	11.5	53.5	-0.057	0.775	2.74	14.8	66.8
$f$	11.8	14.3	14.9	14.9	14.7	22.4	26.1	26.6	26.5	26.3
$E2P_{5/2}$	0.015	1.00	3.26	17.0	75.7	0.028	0.999	3.24	16.8	74.7
$f$	44.7	51.7	52.7	52.5	52.0	44.2	50.8	51.6	51.3	50.9
$E2P_{1/2}$	0.27	1.65	4.68	22.5	97.6	0.102	1.19	3.66	18.5	81.4
$f$	24.7	29.9	30.6	30.2	29.7	17.9	20.5	20.8	20.6	20.4

уровней и сил осцилляторов переходов от радиуса квантовой точки для различных значений  $\mu$ . Здесь используется классификация состояний, принятая в сферическом приближении [21]. Следует учесть, что при учете  $\delta$  состояние  $2P_{5/2}$  расщепляется на состояния  $2\Gamma_{\bar{8}}$  и  $1\Gamma_{\bar{7}}$  (табл. 1), так, что в нижайшем порядке по  $\delta$  сила осциллятора соответствующего перехода распределяется между переходами в эти состояния в отношении 2 : 1 [14]. Видно, что при уменьшении  $\mu$  оптический спектр сильно видоизменяется, все более определяется тремя сближающимися линиями, которые происходят из водородной линии  $1s-2p$  и соответствуют переходам из основного в возбужденные состояния  $2P_{3/2}$ ,  $2P_{5/2}$  и  $2P_{1/2}$  акцептора. Из выражений (7) и (8) легко получить, что при  $\mu \rightarrow 0$  отношение сил осцилляторов этих линий к силе осциллятора перехода  $1s-2p$  в атоме водорода (линия  $L_{\beta}$ ) стремится к 1/3, 1/2 и 1/6 соответственно, так что сумма их сил осцилляторов должна стремиться к силе осциллятора линии  $L_{\beta}$ . Как видно из сравнения результатов, приведенных в табл. 3, 4, эти соотношения хорошо выполняются уже при  $\mu = 0, 1$ .

В табл. 4 приведена зависимость энергии основного и первого возбужденного состояния, а также силы осциллятора оптического перехода между ними от  $R$

Таблица 4

Энергии уровней (в единицах  $R_a = m_0 e^4 / 2\hbar^2 \kappa^2$ ) и силы осцилляторов оптических переходов из основного ( $1s$ ) в первое возбужденное состояние ( $2p$ ) мелкого водородоподобного донора в полупроводниковой квантовой точке как функции ее радиуса ( $R$  — в единицах  $a = \hbar^2 \kappa / m_0 e^2$ );  $\mu = 0$

$R$	5	4	3	2	1
$E1s (Z=0)$	0.395	0.617	1.10	2.47	9.87
$E1s$	-0.993	-0.967	-0.848	-0.250	4.748
$E1p$	0.0152	0.287	0.963	3.152	16.45
$f$	0.849	0.927	0.975	0.991	0.985

для случая  $\mu = 0$ , т. е. для водородоподобного донора. Этот переход является самым интенсивным в атоме водорода и, естественно, в водородоподобном доноре в объеме. Однако из табл. 4 видно, что если в объеме на него приходится менее половины всего поглощения ( $f = 0.412$ ), то при уменьшении  $R$  он практически исчерпывает все поглощение ( $\sim 99\%$ ), т. е. эффективно, с точки зрения оптического поглощения, водородоподобный атом становится «двухуровневой» системой.

Интересно отметить, что при  $R = 2$  задача для основного состояния водородоподобного донора, расположенного в центре полупроводниковой квантовой точки, решается точно и значение  $E = -0.25$  в табл. 4 является точным.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] S. Fraizzoli, A. Pasquarello. *Physica Scripta*, T39, 182 (1991).
- [2] G. Bastard. *Phys. Rev.*, B24, 4714 (1981).
- [3] C. Mailhot, Y.-C. Chang, T. C. McGill. *Phys. Rev.*, B26, 4449 (1982).
- [4] R. L. Green, K. K. Bajaj. *Phys. Rev.*, B34, 961 (1986).
- [5] W. T. Masselink, Y.-C. Chang, H. Morkoc. *Phys. Rev.*, B32, 5190 (1985).
- [6] S. Fraizzoli, A. Pasquarello. *Phys. Rev.*, B44, 1118 (1991).
- [7] G. W. Bryant. *Phys. Rev.*, B29, 6632 (1984).
- [8] J. Lee, H. N. Spector. *J. Vac. Sci. Techn.*, B2, 16 (1984).
- [9] J.-L. Zhu. *Phys. Rev.*, B39, 8780 (1989); J.-L. Zhu, J.-J. Xiong, B.-L. Gu. *Phys. Rev.*, B41, 6001 (1990).
- [10] Ал. Л. Эфрос, А. Л. Эфрос. *ФТП*, 16, 1209 (1982).
- [11] L. E. Brus. *J. Chem. Phys.*, 80, 4403 (1984).
- [12] А. И. Екимов, А. А. Онущенко, А. Г. Плюхин, Ал. Л. Эфрос. *ЖЭТФ*, 88, 1490 (1985).



- [13] M. Sweeny, J. Xu. Sol. St. Commun., 72, 301 (1989).
- [14] Ш. М. Коган, А. Ф. Полупанов. ЖЭТФ, 80, 394 (1981).
- [15] B. Pajot, I. L. Beinikhes, Sh. M. Kogan, M. G. Novak, A. F. Polupanov, C. Song. Semicond. Sci. Techn., 7, 1162 (1992).
- [16] N. C. Jarosik. Surf. Sci., 170, 459 (1986).
- [17] A. A. Reeder, B. D. McCombe, F. A. Chambers, G. P. Devane. Phys. Rev., B38, 4318 (1988).
- [18] A. F. Polupanov, V. I. Galiev, V. E. Zhuravlev. Mater. Sci. Forum, 65&66, 41 (1990).
- [19] В. И. Галиев, А. Ф. Полупанов. Препринт N 18(519) ИПЭ АН СССР, 38, М. (1989).
- [20] V. I. Galiev, A. F. Polupanov, I. E. Shparlinski. J. Comput. Appl. Math., 39, 151 (1992).
- [21] A. Baldereschi, N. O. Lipari. Phys. Rev., B8, 2697 (1973); Phys. Rev., B9, 1525 (1974).
- [22] А. Ф. Полупанов, Р. Таскинбоев. ФТП, 18, 279 (1984).
- [23] Б. И. Шкловский, А. А. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников, 301. М. (1979).
- [24] P. Janiszewski, M. Suffczynski. Sol. St. Commun., 37, 819 (1981).
- [25] Sh. M. Kogan, A. F. Polupanov. Sol. St. Commun., 27, 1281 (1978).

Редактор В. В. Чалдышев

---