[2] Аверкиев Н. С., Гельмонт Б. Л., Голубев В. Г., Иванов-Омский В. И., Кропотов Г. И. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. В. 4 (10). С. 1409—1417.
[3] Голубев В. Г., Гореленок А. Т., Иванов-Омский В. И., Минервин И. Г., Осутин А. В. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. В. 2. С. 282—285.
[4] Broeckx J., Clauws P., Van den Steen K., Vennik J. // J. Phys. C. 1979. V. 12. P. 4061—4079.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получено 1.08.1989
Принято к печати 1.09.1989

ФТП, том 24, вып. 1, 1990

ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ДЫРКИ С НЕЙТРАЛЬНЫМ АКЦЕПТОРОМ В АЛМАЗОПОДОБНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Гельмонт Б. Л., Родина А. В., Эфрос Ал. Л.

Известно, что нейтральный донор или акцептор может присоединить к себе еще одну заряженную частицу — электрон или дырку и образовать при этом так называемый D- или A^+-центр соответственно [1]. В полупроводниках с простой параболической зоной проводимости D^--центр аналогичен отрицательному иону водорода H^-. Структура его волновых функций хорошо известна, а для энергии связи расчеты дают значение, составляющее 5.5 % от энергии связи нейтрального центра [2].

Настоящая работа посвящена расчету энергии связи дырки с нейтральным центром акцепторного типа (A^+-центр) в полупроводниках с вырожденной валентной зоной (типа Ge, InSb, GaAs). Интерес к центрам такого типа возрос в последнее время в связи с возможностью прямого и точного измерения их энергии связи [3].

Рассмотрим только мелкий «водородоподобный» акцептор,[1] потенциал примесного центра в котором имеет кулоновский вид $-e^2/\varkappa r$, где $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость полупроводника. Гамильтониан, описывающий A^+-центр такого типа, можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{r}_1) + \hat{H}_0(\mathbf{r}_2) + \frac{e^2}{\varkappa\,|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \tag{1а}$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \hat{H}_L(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{\varkappa r}, \tag{1б}$$

$$\hat{H}_L(\mathbf{r}) = \frac{1}{m_0}\left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma\right)\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \gamma(\hat{\mathbf{p}}\mathbf{J})^2\right], \tag{1в}$$

где $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — координаты двух дырок относительно примесного центра, m_0 — масса свободного электрона. Гамильтониан Латтинжера $\hat{H}_L$ записан в пренебрежении гофрировкой изоэнергетических поверхностей. Соответственно с этим γ_1 и $\gamma=\gamma_2=\gamma_3$ — постоянные Латтинжера, связанные с эффективной массой легкой и тяжелой дырок соотношениями $m_l=m_0/(\gamma_1+2\gamma)$, $m_h=m_0/(\gamma_1-2\gamma)$ [5]. Входящие в $\hat{H}_L$ матрицы J_x, J_y, J_z имеют размерность 4×4 и являются проекциями спинового момента $J=3/2$ [6]. Гамильтониан $\hat{H}_0$ описывает дырку на нейтральном акцепторе в полупроводнике с вырожденной валентной зоной.

В связи со сферической симметрией гамильтониана $\hat{H}_0$ все дырочные состояния на нейтральном акцепторе характеризуются полным моментом $\hat{F}$ и $(2F+1)$-

---

[1] Для глубоких акцепторов энергия связи A^+-центров находилась по теории возмущений в работе [4].

кратно вырождены по проекции момента M. Основное состояние дырки на акцепторе обладает моментом $F=3/2$, а соответствующие этому четырехкратно вырожденному состоянию волновые функции имеют вид [7]

$$\psi_M = \sum_{l=0,\,2} R_l(r) \sum_{m+\mu=M} \begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2 \\ m & \mu & -M \end{pmatrix} \chi_\mu Y_{l,\,m}(\Omega), \tag{2}$$

где $M=\pm{}^1/_2,\ \pm{}^3/_2$, $Y_{l,\,m}$ — нормированные шаровые функции, спиноры χ_μ являются собственными решениями уравнения $J_z\chi_\mu=\mu\chi_\mu$ $(\mu=\pm{}^1/_2,\ \pm{}^3/_2)$, $\begin{pmatrix} i & j & k \\ l & m & n \end{pmatrix}$ — 3 — j-символы. Радиальные волновые функции R_0 и R_2 удовлетворяют системе дифференциальных уравнений второго порядка, приведенной в [7].

Будем искать основное состояние гамильтониана (1а) вариационным образом, считая, что основной вклад в энергию связи A^+-центра дают дырки с моментом $F=3/2$, волновые функции которых имеют вид (2). Из таких дырок можно сформировать только два типа состояний A^+-центра, удовлетворяющих условию антисимметричности полной двухчастичной волновой функции $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ относительно перестановок дырок: одно с полным моментом $J=2$, а другое с $J=0$. Соответствующие этим моментам волновые функции имеют вид

$$\Phi^{1,\,2}_{J,\,J_z}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (-1)^{J_z}\sqrt{2J+1} \sum_{M_1+M_2=J_z} \begin{pmatrix} 3/2 & 3/2 & J \\ M_1 & M_2 & -J_z \end{pmatrix} \psi^1_{M_1}(\mathbf{r}_1)\,\psi^2_{M_2}(\mathbf{r}_2), \tag{3}$$

где J_z — проекция момента J. Здесь у функций $\psi^{1,\,2}_M$ введен верхний индекс, отражающий возможность для дырок с одним и тем же моментом занимать разные радиальные орбиты, т. е. возможность двух наборов радиальных функций $R_0^{1,\,2}$ и $R_2^{1,\,2}$, входящих в (2). В случае, когда обе дырки занимают одинаковую орбиту $[R_0^1(r)=R_0^2(r)$ и $R_2^1(r)=R_2^2(r)]$, двухчастичные функции (3) удовлетворяют условию антисимметричности $\Phi_{J,\,J_z}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Phi_{J,\,J_z}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Если же радиальные функции разные, то пробная двухчастичная функция должна выбираться в виде антисимметричной комбинации собственных функций полного момента J

$$\xi_{J,\,J_z} = \frac{1}{2}\left[\Phi^{1,\,2}_{J,\,J_z}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \Phi^{1,\,2}_{J,\,J_z}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)\right]. \tag{4}$$

Остановимся теперь на выборе вида радиальных функций R_0 и R_2. Энергия связи основного состояния A^+-центра будет находиться в приближении $m_l \ll m_h$, которое справедливо для большинства алмазоподобных полупроводников. В этом пределе радиальные волновые функции связаны соотношением [8]

$$\frac{dR_0}{dr} + \left(\frac{3}{r} + \frac{d}{dr}\right) R_2 = 0. \tag{5}$$

Тогда, выбирая R_0 в виде

$$R_0(r) = C \exp(-\alpha r/a_B), \tag{6}$$

где α — вариационный параметр, $a_B=\varkappa\hbar^2/m_h e^2$ — боровский радиус тяжелой дырки, а C — нормировочная константа, из (5) получаем

$$R_2(r) = C\left\{6\left(\frac{a_B}{\alpha r}\right)^3 - \exp\left(-\frac{\alpha r}{a_B}\right)\left[1 + 3\left(\frac{a_B}{\alpha r}\right) + 6\left(\frac{a_B}{\alpha r}\right)^2 + 6\left(\frac{a_B}{\alpha r}\right)^3\right]\right\}. \tag{7}$$

Подобный выбор радиальных волновых функций дает для энергии связи нейтрального акцептора в пределе $m_l/m_h \ll 1$ значение $\varepsilon_0^*=0.4341\,E_B$ при $\alpha^*=0.6589$, в то время как ее точное значение составляет $\varepsilon_0^{\text{ex}}=0.4444 E_B$, где $E_B=m_h e^4/2\varkappa^2\hbar^2$ — боровская энергия тяжелой дырки.

Выбор радиальных функций в виде (6), (7) задает радиус орбиты дырки параметром α. В дальнейшем расчете рассматривается общий случай, когда дырки могут занимать две разные орбиты, характеризуемые двумя вариационными параметрами α_1 и α_2.

При нахождении зависимости усредненного на функциях (4) гамильтониана (1) $\langle \xi_J | \hat{H} | \xi_J \rangle$ от α_1 и α_2 основная трудность возникает при расчете энергии кулоновского отталкивания двух дырок $\langle \xi_J | e^2/\varkappa | \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 | | \xi_J \rangle$. Результаты углового усреднения дают для этой энергии следующее выражение:

$$V_J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{2\varkappa} \left\{ \frac{1}{2r_>} \sum_{\substack{k \neq m, \\ l \neq n}} \langle \psi_M^k(\mathbf{r}_1) \psi_M^l(\mathbf{r}_1) \rangle_\Omega \langle \psi_M^m(\mathbf{r}_2) \psi_M^n(\mathbf{r}_2) \rangle_\Omega + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{25}(5 - 4J) \frac{r_<^2}{r_>^3} \left[4R_0^1(r_1) R_2^1(r_1) R_0^2(r_2) R_2^2(r_2) + \sum_{\substack{k \neq l, \\ m \neq n}} R_0^k(r) R_2^l(r_1) R_0^m(r_2) R_2^n(r_2) \right] \right\}, \quad (8)$$

где $k, l, m, n = 1, 2$. Функции ψ_M^1 и ψ_M^2 отличаются друг от друга разным значением параметра α (α_1 и α_2), входящего в радиальные функции R_0 (R_0^1 и R_0^2) и R_2 (R_2^1 и R_2^2); $r_< = \min\{r_1, r_2\}$, $r_> = \max\{r_1, r_2\}$, а $\langle \psi_M^k(\mathbf{r}) \psi_M^l(\mathbf{r}) \rangle_\Omega = R_0^k(r) \times R_0^l(r) + R_2^k(r) R_2^l(r)$. При получении (8) использовалось тождество

$$\int \psi_{M_1}^{l*} Y_{l,m} \psi_{M_2}^k d\Omega = (R_0^l(r) R_0^k(r) + R_2^l(r) R_2^k(r)) \frac{\delta_{M_1, M_2} \delta_{l,0}}{2\sqrt{\pi}} +$$

$$+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} (-1)^{M_1 + 1/2} \delta_{l,2} \begin{pmatrix} 2 & 3/2 & 3/2 \\ m & M_2 & -M_1 \end{pmatrix} R_0^l(r) R_2^k(r), \quad (9)$$

которое приводит к тому, что в (8) отсутствуют члены вида $r_<^4 / r_>^5$. Если считать, что обе дырки занимают одну орбиту ($\alpha_1 = \alpha_2$), то выражение (8) сильно упрощается и принимает вид

$$V_J(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{e^2}{\varkappa} \left\{ \frac{1}{r_>} [(R_0(r_1))^2 + (R_2(r_1))^2] [(R_0(r_2))^2 + (R_2(r_2))^2] + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{25}(5 - 4J) \frac{r_<^2}{r_>^3} R_0(r_1) R_2(r_1) R_0(r_2) R_2(r_2) \right\}. \quad (10)$$

Дальнейшее вычисление среднего значения $\langle \xi_J | e^2/\varkappa | r_1 - r_2 | | \xi_J \rangle$, как и полной энергии $\langle \xi_J | \hat{H} | \xi_J \rangle$, может быть проведено аналитически. Однако из-за его громоздкости приведем здесь лишь выражение для энергии $E_J = \langle \xi_J | \hat{H} | \xi_J \rangle$ в случае ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$), когда обе дырки расположены на одной радиальной орбите:

$$E_J = \{2\alpha^2 - 2\alpha(12 \ln \alpha - 7) + 2\alpha [1.6856 + 0.0014 (5 - 4J)]\}. \quad (11)$$

В выражении (11) первый член соответствует кинетической энергии дырок, второй — потенциальной энергии их взаимодействия с акцептором, а третий — энергии отталкивания двух дырок.

Минимизация выражения (11) по α дает вариационное значение полной энергии двух дырок на акцепторе, равное $E_2^* = 0.4677\ E_B$ и $E_0^* = 0.4460\ E_B$ при $\alpha = 0.4835$ и 0.4722 соответственно. Используя точное значение энергии связи нейтрального акцептора ε_0^{ex}, найдем энергию связи второй дырки с нейтральным акцептором $\varepsilon_J^i = E_J^* - \varepsilon_0^{ex}$ для момента $J = 2 - \varepsilon_2^i = 0.0233\ E_B$ и для момента $J = 0$ — $\varepsilon_0^i = 0.0016\ E_B$. Видно, что даже однопараметрическая пробная функция ($\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$) дает связанное состояние A^+-центра. Это указывает на существенное ослабление кулоновского отталкивания двух дырок в A^+-центре, так как известно [2], что в D^--центре не удается образовать связанного состояния из двух электронов с одной орбиты.

Использование двухпараметрической пробной функции дает для A^+-центра с моментами $J = 2$ и 0 энергии связи второй дырки

$$\varepsilon_2^i = 0.0357 E_B, \quad \varepsilon_0^i = 0.0175 E_B \quad (12)$$

при наборах параметров $\alpha_1 = 0.2837$, $\alpha_2 = 0.6750$ и $\alpha_1 = 0.2553$, $\alpha_2 = 0.6750$. Сравнивая найденные значения параметров с $\alpha^* = 0.6589$ для нейтрального акцептора, можно заметить, что радиус внешней орбиты в A^+-центре существенно превышает боровский радиус тяжелой дырки a_B, а радиус внутренней орбиты практически совпадает с радиусом дырки в нейтральном акцепторе. Такой же результат известен и для D^--центров [2]. Заметим, что найденные энергии связи удовлетворяют известному в атомной физике для многоэлектронных систем правилу Хунда [9], а именно состоянию с бо́льшим полным моментом соответствует бо́льшая энергия связи.

В заключение рассмотрим влияние химического сдвига акцептора на энергию связи A^+-центра. Если его величина относительно невелика, т. е. разница между экспериментальным значением энергии связи нейтрального акцептора E_B^{ex} и ее теоретической величиной $(^4/_9\, E_B)$ $E_B^{ex} - {}^4/_9\, E_B \ll E_B$, то его влияние может быть рассмотрено по теории возмущений. Используя явный вид волновых функций (6), (7), представим короткодействующий потенциал, обусловленный химической природой акцептора, в виде

$$\Delta(r) = \left(E_B^{ex} - \frac{4}{9} E_B\right) \frac{\delta(ra^*)}{2(a^*r)^2}. \tag{13}$$

Тогда, считая, что потенциал (13) действует на обе дырки, найдем поправку к энергии связи A^+-центра ΔE_J в первом порядке теории возмущений. Она оказывается равной

$$\Delta E_J = \frac{E_B^{ex} - \frac{4}{9} E_B}{2a^{*3}} \frac{[(\alpha_1+\alpha_2)^3(\alpha_1^3+\alpha_2^3) + 16\alpha_1^3\alpha_2^3](\alpha_1+\alpha_2)^3}{(\alpha_1+\alpha_2)^6 + 64\alpha_1^3\alpha_2^3} = \left(E_B^{ex} - \frac{4}{9} E_B\right) A_J, \tag{14}$$

где $A_2=1.01$, $A_0=0.99$. Видно, что результирующая поправка для A^+-центра практически совпадает с величиной химического сдвига нейтрального акцептора, что связано с большой величиной радиуса орбиты, занимаемой второй дыркой.

Список литературы

[1] Гершензон Е. М., Гольцман Г. Н., Мельников А. П. // Письма ЖЭТФ. 1971. Т. 14. В. 5. С. 281—283.
[2] Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., 1960. 562 с.
[3] Burger W., Lassmann K. // Phys. Rev. 1986. V. B33. N 8. P. 5868—5870.
[4] Аверкиев Н. С., Ребане Ю. Т., Ясиевич И. Н. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 1. С. 96—100.
[5] Luttinger J. H. // Phys. Rev. 1956. V. 102. N 4. P. 1030—1040.
[6] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
[7] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1971. Т. 5. В. 11. С. 2191—2193.
[8] Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И. // ФТП. 1973. Т. 7. В. 10. С. 2013—2016.
[9] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М., 1963. 702 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получено 15.08.1989
Принято к печати 6.09.1989

ФТП, том 24, вып. 1, 1990

(Al, Ga) As ДГС РО ЛАЗЕРЫ НА ДЛИНЫ ВОЛН 0.8 МКМ (175 А/СМ²) И 0.73 МКМ (350 А/СМ²) С ЛЕГИРОВАННОЙ КВАНТОВОЙ ЯМОЙ

Алфёров Ж. И., Иванов С. В., Копьев П. С., Леденцов Н. Н., Мельцер Б. Я., Луценко М. Э.

В настоящее время пороговые плотности тока (Al, Ga) As ДГС РО лазеров снижены до величин ~50—80 А/см² [1, 2]. Вместе с тем для (Al, Ga) As-лазеров на длины волн $\leqslant 0.8$ мкм достигнуты менее впечатляющие результаты [3]. Было также обнаружено, что наименьшая плотность порогового тока реализуется в структурах с нелегированной активной областью [1]. Вместе с тем