

# Влияние спин-орбитального взаимодействия на оптические спектры акцептора в полупроводниковой квантовой точке

© А.Ф. Полупанов, В.И. Галиев, М.Г. Новак

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,  
103907 Москва, Россия

(Получена 15 августа 1996 г. Принята к печати 20 марта 1997 г.)

Вычислены зависимости энергий уровней и сил осцилляторов дипольных оптических переходов из основного в нечетные возбужденные состояния мелкого акцептора, расположенного в центре сферической квантовой точки, от энергии спин-орбитального расщепления валентных зон  $\Delta$  при различных значениях радиуса точки и величины отношения эффективных масс тяжелой и легкой дырки  $\beta$ . Установлено, что спин-орбитальное взаимодействие сильно влияет на некоторые состояния акцепторов в случае реальных больших величин  $\beta$  и при достаточно малых значениях радиуса точки. Наибольшее влияние спин-орбитальное взаимодействие оказывает на нижнее состояние симметрии  $\Gamma_6^-$ , поскольку его характер изменяется от тяжелодырочного ( $\Delta = 0$ ) до легкодырочного ( $\Delta = \infty$ ). В рамках использованных приближений задача решена точно, в частности получены точные аналитические выражения для волновых функций акцептора.

1. Состояния мелких примесей в полупроводниковых структурах с квантовыми ямами и их оптические свойства интенсивно исследуются в последние годы (см., например, обзор [1]). Это связано, в частности, с повышенным интересом к новым структурам, таким, например, как квантовые проволоки и квантовые точки и, соответственно, с необходимостью исследования примесных состояний в них, с попытками получить более точные 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 в случае примесей, расположенных в квазидвумерных квантовых ямах (см., например, [3–6]), в квазиодномерных квантовых проволоках [7–9]. Для случая полупроводниковых квантовых точек или полупроводниковых микрокристаллов в диэлектрической матрице имеются многочисленные расчеты в различных приближениях уровней энергии экситона и "свободной" дырки [10–14] (отметим, что при малых радиусах сферической квантовой точки, когда экситон квантуется как целое, эти задачи эквивалентны, см. [12]), а также появившиеся в последнее время расчеты состояний мелких доноров и акцепторов в них [9,15–17]. Следует отметить, что в подавляющем большинстве расчетов примесных состояний в структурах с квантовыми ямами вычислялись лишь энергии основного и нижнего возбужденного состояний, причем с использованием вариационного метода, обладающего хорошо известными недостатками (к которым относится, в частности, неопределенная точность вариационных волновых функций). Между тем, наряду с энергиями уровней для правильной идентификации оптических переходов необходимо знание еще одной из важнейших спектральных характеристик — сил осцилляторов переходов, что особенно важно в случае неводородоподобных примесей [18]. К таковым (неводородоподобным) относятся, в частности, акцепторы в полупроводниках с

вырожденной валентной зоной: в отличие от случая водородоподобной примеси силы осцилляторов оптических переходов из основного состояния акцептора изменяются немонотонно с увеличением номера возбужденного уровня (с уменьшением энергии связи возбужденных состояний), причем даже для серий переходов в состоянии одной симметрии [19,16]. В работе [16] мы вычислили зависимости энергий основного и ряда возбужденных уровней, а также сил осцилляторов дипольных оптических переходов мелких доноров и акцепторов от радиуса сферической квантовой точки с помощью нового численно-аналитического метода решения сингулярных многокомпонентных уравнений Шредингера [20,21], применение которого позволило решить задачу в рамках использованных приближений точно. В случае акцепторов при расчете из оптических спектров было использовано приближение бесконечно большого спин-орбитального расщепления валентных зон. Это приближение хорошо выполняется при расчете спектров акцепторов в объеме многих полупроводников, однако в случае квантовой точки при уменьшении ее радиуса из-за увеличения кинетической энергии носителей заряда эффекты спин-орбитального взаимодействия между валентной зоной  $\Gamma_8^+$  и спин-отбитально отщепленной зоной  $\Gamma_7^+$ . В настоящей работе, используя метод [20,21], мы исследуем зависимости энергий основного и ряда возбужденных уровней, а также сил осцилляторов дипольных оптических переходов мелкого акцептора, расположенного в центре сферической квантовой точки, от величины спин-орбитального расщепления валентных зон при различных значениях радиуса точки и величины отношения эффективных масс тяжелой и легкой дырок. Мы воспользуемся численно-аналитическим методом [20,21], что позволит решить задачу точно, в частности — получить точные аналитические выражения для волновых функций акцептора.

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. В сферическом приближении [22] гамильтониан приближения эффективной массы акцептора, точно учитывающий конечную величину спин-орбитального расщепления валентных зон, можно представить в виде

$$H = p^2 - 3\mu \left( P^{(2)} I^{(2)} \right) + \frac{2}{3} \left( \frac{1}{2} - \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} \right) \Delta + \frac{2Z}{r}. \quad (1)$$

Здесь  $\hbar \mathbf{p}$  — оператор импульса;  $P^{(2)}$  и  $I^{(2)}$  — неприводимые сферические тензорные операторы второго ранга, составленные, как в [18], из компонент вектора  $\mathbf{p}$  и вектора  $\mathbf{I}$  момента количества движения с  $I = 1$ ,  $\mathbf{S}$  — оператор спина,  $\mu = (4\gamma_2 + 6\gamma_3)/5\gamma_1$ , где  $\gamma_i$  — параметры Латтинджера валентной зоны,  $\Delta$  — величина спин-орбитального расщепления валентных зон; энергия и расстояния соответственно измеряются в единицах  $R_a = m_0 e^4 / 2\hbar \kappa^2 \gamma_1$  и  $a = \hbar \kappa \gamma_1 / m_0 e^2$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона,  $\kappa$  — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла,  $Z$  — величина заряда примесного иона.

Волновую функцию, соответствующую гамильтониану (1), будем искать в виде

$$\Psi = \sum_{JL} R_{LJ}(r) |LJFF_z\rangle, \quad (2)$$

где  $|LJFF_z\rangle$  — известные функции  $L$ - $J$ -связи,  $F$  — квантовое число полного момента  $\mathbf{F} = \mathbf{L} + \mathbf{J}$ , где  $\mathbf{J} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$ ,  $R_{LJ}(r)$  — радиальные волновые функции. Квантовое число  $J$  принимает значения  $J_1 = 3/2$ , что соответствует вырожденной валентной зоне  $\Gamma_8^+$ , и  $J_2 = 1/2$ , соответствующее спин-орбитально отщепленной зоне  $\Gamma_7^+$ . Ясно, что, как и в случае  $\Delta = \infty$  [22], состояния гамильтониана (1) классифицируются по значениям полного момента  $F = 1/2, 3/2, \dots$ , являющегося хорошим квантовым числом, и далее мы будем обозначать их, как это принято в сферическом приближении в пределе  $\Delta = \infty$  [22]. Подставляя выражение для волновой функции в уравнение Шредингера с гамильтонианом (1), получаем следующую систему трех связанных уравнений для радиальных функций ( $F > 1/2$ ):

$$\begin{aligned} & \left\{ \left( 1 + \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu \right) \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L_1(L_1 + 1)}{r^2} \right] \right. \\ & \left. + \frac{2Z}{r} + E \right\} R_{L_1 J_1} + \frac{2\beta\mu}{1 + \beta^2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2L_1 + 5}{r} \frac{d}{dr} \right. \\ & \left. + \frac{(l_1 + 1)(L_1 + 3)}{r^2} \right] R_{L_1 + 2, J_1} \\ & + \mu \left( L_1 J_1 \left| P^{(2)} \cdot I^{(2)} \right| L_2 J_2 \right) R_{L_2 J_2} = 0; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{2\beta\mu}{1 + \beta^2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2L_1 + 1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{L_1(L_1 + 2)}{r^2} \right] R_{L_1 J_1} \\ & + \mu \left[ (L_1 + 2) J_1 \left| P^{(2)} \cdot I^{(2)} \right| L_2 J_2 \right] R_{L_2 J_2} \\ & + \left\{ \left( 1 + \frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \mu \right) \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{(L_1 + 2)(L_1 + 3)}{r^2} \right] + \frac{2Z}{r} + E \right\} R_{L_1 + 2, J_1} = 0; \\ & - \mu \left( L_2 J_2 \left| P^{(2)} \cdot I^{(2)} \right| L_1 J_1 \right) R_{L_1 J_1} \\ & - \mu \left[ L_2 J_2 \left| P^{(2)} \cdot I^{(2)} \right| (L_1 + 2) J_1 \right] R_{L_1 + 2, J_1} \\ & + \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{L_2(L_2 + 1)}{r^2} \right. \\ & \left. + \frac{2Z}{r} + E - \Delta \right\} R_{L_2 J_2} = 0. \quad (3) \end{aligned}$$

Здесь  $\beta = 3^{L_1 - F + 1} [(F + 3/2)/(F - 1/2)]^{1/2}$ . Входящий в эти уравнения матричный элемент равен

$$\begin{aligned} & \left( LJ \left| P^{(2)} \cdot I^{(2)} \right| L' J' \right) \\ & = \sqrt{30} (-1)^{F + J + L} \left\{ \begin{matrix} F & J & L \\ 2 & L' & J' \end{matrix} \right\} \left( L \parallel P^{(2)} \parallel L' \right). \quad (4) \end{aligned}$$

Здесь таблица в фигурных скобках — это  $6j$ -символ, а  $(L \parallel P^{(2)} \parallel L')$  — приведенный матричный элемент, который не равен нулю только при  $L = L'$  и  $L = L' \pm 2$ ,

$$\begin{aligned} & \left( L \parallel P^{(2)} \parallel L' \right) = (-1)^{(L' - L)/2} \\ & \times \left( \frac{(L + L' + 2)(L + L')(4L + 2 - |L' - L|)(4 + |L' - L|)}{24(L + L' - 1 + |L' - L|)(4L + 6 - 3|L' - L|)} \right) \\ & \times \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{[(L' + 1/2)(L' - L) + 2 - |L - L'|]}{r} \frac{d}{dr} \right. \\ & \left. + (-1)^{(L' - L)/2} \frac{[4 - 2|L - L'| - (L' - 3L + 2)(5L' - L + 2)]}{16r^2} \right). \quad (5) \end{aligned}$$

Как и в пределе бесконечно большого спин-орбитального расщепления валентных зон [22], случай  $F = 1/2$  следует рассмотреть отдельно. В этом случае, как следует из правил сложения моментов, радиальное уравнение — это система двух связанных уравнений. Интересующие нас нечетные состояния с  $F = 1/2$  описываются следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} & \left\{ (1 + \mu)D + \frac{2Z}{r} + E \right\} R_{1J_1} - D\sqrt{2}\mu R_{1J_2} = 0, \\ & \left\{ D + \frac{2Z}{r} + E - \Delta \right\} R_{1J_2} - D\sqrt{2}\mu R_{1J_1} = 0. \quad (6) \end{aligned}$$

Отметим, что системы уравнений для радиальных волновых функций, описывающие состояния "свободной" дырки в сферической квантовой точке с учетом конечной

величины спин-орбитального расщепления, которые получаются из уравнений (3) и (6), если просто положить в них  $Z = 0$ , были получены ранее в [14]. Однако в [14] неправильно записан оператор, используемый при записи этих уравнений. Правильный его вид следующий:

$$A_l^+ = \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2l+1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{l(l+2)}{r^2}.$$

Поскольку нас интересует зависимость акцепторных состояний от  $\Delta$  при всех  $0 \leq \Delta \leq \infty$ , интересно проследить предельные переходы при  $\Delta \rightarrow 0$  и  $\Delta \rightarrow \infty$  для уравнений, описывающих эти состояния. Ясно, что при  $\Delta \rightarrow \infty$  состояния акцептора описываются системой первых двух уравнений из (3) и первым из уравнений (6), в которых следует положить равной нулю радиальную функцию с индексом  $J_2$ . Уравнения, описывающие состояния акцептора при  $\Delta = 0$ , получены в [22] (уравнения (30a)–(30d)), однако здесь необходимо сделать следующие замечания. Во-первых, в системе (30d) из [22], описывающей состояние  $\Phi(P_2)$ ,  $\Phi(P_2) = F_3(r)|L = 1, I = 1, F = 2, F_z\rangle + G_3(r)|L = 3, I = 1, F = 2, F_z\rangle$ , неправильно выбраны относительные знаки радиальных функций  $F_3(r)$  и  $G_3(r)$ , что не сказывается при вычислении энергий, но, естественно, приводит к неправильным результатам при вычислении матричных элементов. Правильные уравнения для этих функций имеют вид

$$\begin{bmatrix} \left(1 + \frac{1}{5}\mu\right)\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2}\right) + \frac{2}{r} + E & -\frac{3}{5}\sqrt{6}\mu\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{7}{r}\frac{d}{dr} - \frac{8}{r^2}\right) \\ -\frac{3}{5}\sqrt{6}\mu\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{3}{r}\frac{d}{dr} + \frac{3}{r^2}\right) & \left(1 + \frac{4}{5}\mu\right)\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{12}{r^2}\right) + \frac{2}{r} + E \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} F_3(r) \\ G_3(r) \end{bmatrix} = 0. \quad (7)$$

Кроме того важно отметить, что спин-орбитальное взаимодействие снимает вырождение некоторых состояний и при  $\Delta \rightarrow 0$  системы уравнений (3), (6) для некоторых различных состояний сводятся к одинаковым уравнениям. При  $\Delta \rightarrow 0$  системы связанных радиальных уравнений (3) и (6) расщепляются и сводятся, соответственно, к совокупности системы двух уравнений и одного уравнения и совокупности двух не связанных уравнений. При этом, когда  $\Delta \rightarrow 0$ , к системе (7) сводятся уравнения (3) как для радиальных функций нижнего состояния с  $F = 5/2, L_2 = L_1 + 2 = 3$  ( $2P_{5/2}$ ), так и первого возбужденного состояния с  $F = 3/2, L_2 = L_1 = 1$  ( $3P_{3/2}$ ). К уравнению же

$$\left\{ (1 - \mu) \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{2}{r^2} \right] + \frac{2}{r} + E \right\} F_2(r) = 0, \quad (8)$$

решение которого определяет при  $\Delta = 0$  радиальную функцию для состояния  $\Phi(P_1) = F_2(r)|L = 1, I = 1, F = 1, F_z\rangle$  [22], при  $\Delta \rightarrow 0$  сводится как уравнение (3),

описывающее нижнее состояние с  $F = 3/2, L_2 = L_1 = 1$  ( $2P_{3/2}$ ), так и уравнение (6) также для нижнего состояния с  $F = 1/2, L_2 = L_1 = 1$  ( $2P_{1/2}$ ).

3. Как ясно из выражений для матричных элементов (4), (5), уравнения (3) можно представить в виде

$$wr^2 \frac{d^2 R}{dr^2} + p_0 r \frac{dR}{dr} + (q_0 + q_1 r + q_2 r^2) R = 0, \quad (9)$$

где  $w, p_0, q_i$  — постоянные матрицы размерности  $3 \times 3$ , а  $R = R(r)$  — трехкомпонентная вектор-функция. Наиболее важной особенностью рассматриваемой задачи (как и других задач, приводящих к решению уравнений типа (9)) является наличие особых точек у многокомпонентного радиального уравнения Шредингера (9). Поскольку мы будем искать решения (3) на конечном интервале изменения  $r$ , в нашем случае имеется только регулярная особая точка  $r = 0$ . В [21] развит численно-аналитический метод построения всех решений из фундаментальной системы уравнений типа (9) (в [21] рассмотрены уравнения более общего вида) при произвольной конечной их размерности в случае произвольного вида матриц  $w, p_0, q_i$ . В рассматриваемом случае простых матриц коэффициентов, воспользовавшись результатами [20,21], можно сразу записать все решения из фундаментальной системы решений уравнений (3).

Определим следующую последовательность матриц:

$$\Gamma_k(\rho) = w(k+\rho)(k+\rho-1) + p_0(k+\rho) + q_0, \quad k = 0, 1, \dots \quad (10)$$

Как поведение решений уравнений (3) при  $r \rightarrow 0$ , так и структура решений определяются корнями следующего уравнения [20,21]:

$$\det \Gamma_0(\rho) = 0. \quad (11)$$

В случае гамильтонианов, являющихся квадратичной формой импульса, решения уравнения (11) известны точно при любой размерности системы радиальных уравнений (9) [20]. В рассматриваемом нами случае гамильтониана (1) решения уравнения (11) и, соответственно, вид решений уравнений (3) различаются для двух типов состояний. Действительно, поскольку гамильтониан (1) сохраняет квантовое число полного момента и четность (мы пренебрегаем слабыми эффектами, связанными с отсутствием центра инверсии у полупроводников с решеткой цинковой обманки), а квантовое число  $J$  принимает значения  $J_1 = 3/2$  и  $J_2 = 1/2$ , то при данном значении  $F$  и четности квантовое число  $L_1$  равно либо  $F - 3/2$ , при этом  $L_2 = L_1 + 2$ , либо  $F - 1/2$ , тогда  $L_2 = L_1$ . Используя это свойство, которое следует просто из правил сложения моментов, и явные выражения для матричных элементов (4), (5), легко понять, что в этих двух случаях уравнения (3) несколько отличаются и их следует рассматривать по отдельности.

а)  $L_1 = F - 3/2, L_2 = L_1 + 2$ . В этом случае операторы, действующие на функции  $R_{L_1+2, J_1}$  и  $R_{L_2, J_2}$  и определяющие

поведение функций в окрестности  $r = 0$ , т.е. операторы вида

$$P_L(r) \equiv \frac{d^2}{dr^2} + \frac{a_L}{r} \frac{d}{dr} + \frac{b_L}{r^2}, \quad (12)$$

совпадают с точностью до константы. Тогда неотрицательные решения уравнения (11), которые соответствуют регулярным при  $r = 0$  решениям уравнений (3), равны  $\rho_1 = \rho_2 = L_1 + 2$ ,  $\rho_3 = L_1$ , а решения (3) имеют вид

$$R^{(1)} = r^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(1)} r^k, \quad R^{(2)} = r^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(2)} r^k, \\ R^{(3)} = r^{\rho_3} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(3)} r^k + (K_1 R^{(1)} + K_2 R^{(2)}) \ln r, \quad (13)$$

где коэффициенты  $R_k^{(i)}$  и константы  $K_{1,2}$  определяются из следующих рекуррентных соотношений:

$$\Gamma_0(\rho_1)R_0^{1,2} = 0, \\ \Gamma_k(\rho_1)R_k^{1,2} + q_1 R_{k-1}^{1,2} + q_2 R_{k-2}^{1,2} = 0, \\ k = 1, 2, \dots (R_l = 0, l < 0); \quad (14a)$$

$$\Gamma_0(\rho_3)R_0^{(3)} = 0, \\ \Gamma_1(\rho_3)R_1^{(3)} + q_1 R_0^{(3)} = 0, \\ \Gamma_k(\rho_3)R_k^{(3)} + q_1 R_{k-1}^{(3)} + q_2 R_{k-2}^{(3)} + \{2(\rho_3 + k) + q_0 - 1\} \\ \times (K_1 R_{k-\rho_1+\rho_3}^{(1)} + K_2 R_{k-\rho_1+\rho_3}^{(2)}) = 0, k \geq 1. \quad (14b)$$

Отметим, что рекуррентные соотношения для коэффициентов  $R_k^{(1)}$  и  $R_k^{(2)}$  одинаковы, но решения  $R_0^{(1,2)}$  первого из уравнений (14a) выбираются линейно-независимыми.

б)  $L_1 = F - 1/2$ ,  $L_2 = L_1$ . В этом случае совпадают с точностью до константы операторы (12), действующие на  $R_{L_1 J_1}$  и  $R_{L_2 J_2}$ . Регулярным при  $r = 0$  решениям уравнений (3) соответствуют корни (11)  $\rho_1 = L_1 + 2$ ,  $\rho_2 = \rho_3 = L_1$ , а решения имеют вид

$$R^{(1)} = r^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(1)} r^k, \\ R^{(2)} = r^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(2)} r^k + (K_2 R^{(1)}) \ln r, \\ R^{(3)} = r^{\rho_3} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(3)} r^k + (K_3 R^{(1)}) \ln r, \quad (15)$$

где коэффициенты  $R_k^{(i)}$  и константы  $K_{2,3}$  определяются из рекуррентных соотношений

$$\Gamma_0(\rho_1)R_0^{(1)} = 0, \\ \Gamma_k(\rho_1)R_k^{(1)} + q_1 R_{k-1}^{(1)} + q_2 R_{k-2}^{(1)} = 0, \\ k = 1, 2, \dots (R_l = 0, l < 0); \quad (16a)$$

$$\Gamma_0(\rho_3)R_0^{(2,3)} = 0, \\ \Gamma_1(\rho_3)R_1^{(2,3)} + q_1 R_0^{(2,3)} = 0, \\ \Gamma_k(\rho_3)R_k^{(2,3)} + q_1 R_{k-1}^{(2,3)} + q_2 R_{k-2}^{(2,3)} \\ + \{2(\rho_3 + k) + q_0 - 1\} \\ \times K_{2,3} R_{k-\rho_2+\rho_3}^{(1)} = 0, k \geq 1. \quad (16b)$$

Видно, что рекуррентные соотношения для коэффициентов  $R_k^{(2)}$  и  $R_k^{(3)}$  одинаковы, но решения первого из уравнений (16b) для  $R_0^{(2,3)}$  выбираются линейно-независимыми.

Ясно, что уравнение (6) также можно представить в виде (9) с соответствующими матрицами размерности  $2 \times 2$ , однако его решения отличаются от полученных в [16]. Поскольку в этом случае уравнение (11) имеет кратные корни, регулярные при  $r = 0$ , решения (6) не содержат логарифмической функции и имеют вид

$$R^{(1)} = r^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(1)} r^k, \quad R^{(2)} = r^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} R_k^{(2)} r^k, \quad (17)$$

где  $\rho_1 = \rho_2 = 1$ . Коэффициенты  $R_k^{(1,2)}$  определяются из рекуррентных соотношений

$$\Gamma_0(\rho_1)R_0^{(1,2)} = 0, \\ \Gamma_k(\rho_1)R_k^{(1,2)} + q_1 R_{k-1}^{(1,2)} + q_2 R_{k-2}^{(1,2)} = 0, \\ k = 1, 2, \dots (R_l = 0, l < 0), \quad (18)$$

в которых выбираются два линейно-независимых решения первого из уравнений (18).

Как доказано нами в [21], степенные ряды в (13), (15) и (17) имеют бесконечный радиус сходимости и, следовательно, выражения (13)–(18) полностью определяют волновые функции всех состояний гамильтониана (1), причем как в объеме полупроводника (см. [20]), так и в квантовой точке, и для того чтобы вычислить энергии уровней и волновые функции акцептора, необходимо только удовлетворить соответствующим граничным условиям. Отметим, что эти выражения определяют волновые функции акцептора не только в сферическом приближении, но и при учете гофрировки валентных зон в первом порядке по "гофрировочному" параметру  $\delta = (\gamma_3 - \gamma_2)/\gamma_1$ , которому пропорциональны слагаемые кубической симметрии, добавляемые к (1) при ее учете [18,22]. Действительно, в этом приближении гофрировка вообще не влияет на состояния с  $F < 5/2$  и приводит к расщеплению состояний с  $F = 5/2$  (поскольку дипольные переходы из основного состояния в состояния с  $F > 5/2$  запрещены [18], мы их не будем рассматривать). Волновые функции теперь характеризуются по одному из представлений  $\Gamma = \Gamma_8^\pm$ ,  $\Gamma_7^\pm$  и  $\Gamma_6^\pm$  группы  $T_d \times C_i$  гамильтониана, а интересующее нас состояние  $2P_{5/2}$  расщепляется на состояния  $2\Gamma_8^-$  и  $1\Gamma_7^-$ . Однако уравнения для радиальных функций этих состояний имеют прежний вид (3), только с другими постоянными коэффициентами перед операторами типа

(12), а их решения, как и для состояния  $2P_{5/2}$ , даются формулами (13), (14).

В случае акцептора в квантовой точке необходимо удовлетворить граничным условиям при  $r = R_0$ , т.е. найти такие значения энергий  $E$  и линейные комбинации решений, для которых выполняется условие  $(R)_{r=R_0} = 0$ . Удобнее всего это сделать следующим образом. Образум из решений (13) или (15) (в зависимости от рассматриваемого состояния) в точке  $R_0$  матрицу  $A$  размером  $3 \times 3$ :

$$A(E) = \begin{pmatrix} R^{(1)}, R^{(2)}, R^{(3)} \end{pmatrix}_{r=R_0}.$$

Тогда процедура вычисления энергий уровней на некотором интервале  $[E', E'']$  сводится к численному решению "стрельбой" уравнения  $\det A(E) = 0$ . Если при некотором  $E = E_0$  выполняется условие  $\det A(E_0) = 0$ , то

$$\begin{pmatrix} R^{(1)} \end{pmatrix}_{r=R_0} = \alpha_1 \begin{pmatrix} R^{(2)} \end{pmatrix}_{r=R_0} + \alpha_2 \begin{pmatrix} R^{(3)} \end{pmatrix}_{r=R_0},$$

где константы  $\alpha_{1,2}$  соответствуют собственному значению  $E_0$ . Тогда нормированное решение, соответствующее этой энергии и удовлетворяющее граничным условиям, имеет вид

$$\varphi(r) = C \left( R^{(1)} - \alpha_1 R^{(2)} - \alpha_2 R^{(3)} \right),$$

а константа  $C$  определяется из условия нормировки

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

Отметим, что в рамках используемого подхода совершенно аналогично вычисляются уровни энергии и волновые функции "свободной" дырки в квантовой точке, т.е. дырки в отсутствие акцептора в яме. При этом нужно просто положить  $Z = 0$  в уравнении (3), выражения (13)–(18), как и прежде, являются точными решениями (3), а коэффициенты перед логарифмическими членами в (13), (15) обращаются в нуль — они пропорциональны  $Z$  [20].

4. 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 [23]:

$$f(a \rightarrow b) = \frac{2m_0}{\hbar^2 \gamma_1} \frac{E_b - E_a}{g_a} \sum_{m=1}^{g_a} \sum_{n=1}^{g_b} |(\mathbf{e} \cdot \mathbf{r})_{mn}|^2. \quad (19)$$

Здесь  $E_a$ ,  $E_b$  и  $g_a$ ,  $g_b$  — соответственно энергии и кратности вырождения уровней  $a$  и  $b$ ,  $\mathbf{e}$  — единичный вектор поляризации излучения. Коэффициент перед двойной суммой в (19) определяется правилом сумм сил осцилляторов для акцепторных примесей, которое зависит лишь от одного параметра Латтинджера  $\gamma_1$  [23,18]

и равен единице, если измерять энергии и расстояния соответственно в единицах  $R_a$  и  $a$ , как в (1). Тогда, подставляя в (19) выражение (2) для волновых функций, используя теорему Вигнера–Экарта и свойство ортогональности  $3j$ -символов, имеем

$$f(a \rightarrow b) = \frac{E_b - E_a}{3g_a} \left\{ \sum_{JL} (L_a J_a F_a || r || L_b J_b F_b) \right\}^2, \quad (20)$$

где приведенный матричный элемент равен

$$\begin{aligned} (L_a J_a F_a || r || L_b J_b F_b) &= \delta_{J_a J_b} (-1)^{F_b + J + L_a + 1} \\ &\times [(2F_a + 1)(2F_b + 1)]^{1/2} \\ &\times \begin{Bmatrix} L_b & J & F_b \\ F_a & 1 & L_a \end{Bmatrix} (L_a || r || L_b). \end{aligned} \quad (21)$$

Поскольку при  $\Delta \rightarrow 0$  некоторые различные возбужденные состояния становятся вырожденными (они описываются одинаковыми уравнениями, см. п. 2), интересно определить, как распределяется сила осциллятора, соответствующая при  $\Delta = 0$  переходу в данное вырожденное состояние, между переходами в возбужденные состояния, которые его образуют при  $\Delta \rightarrow 0$ . Непосредственный расчет по формулам (20), (21) показывает, что сила осциллятора перехода из основного состояния ( $1S_1$  в обозначениях [22],  $\Delta = 0$ ) в возбужденное состояние  $2P_1$  делится между переходами  $1S_{3/2}(1\Gamma_8^+) \rightarrow 2P_{3/2}(1\Gamma_8^-)$  и  $1S_{3/2}(1\Gamma_8^+) \rightarrow 2P_{1/2}(1\Gamma_6^-)$  при  $\Delta \rightarrow 0$  в отношении  $5 : 1$ , а сила осциллятора перехода в состояние  $2P_2$  — между переходами  $1S_{3/2}(1\Gamma_8^+) \rightarrow 2P_{5/2}(2\Gamma_8^- + 1\Gamma_7^-)$  и  $1S_{3/2}(1\Gamma_8^+) \rightarrow 3P_{3/2}(3\Gamma_8^-)$  в отношении  $9 : 1$ . Здесь в скобках указаны обозначения состояний, в которые переходят данные состояния при учете гофрировки.

5. Результаты расчета зависимости энергий уровней и сил осцилляторов дипольных оптических переходов из основного в возбужденные нечетные состояния мелкого акцептора в сферической квантовой точке от энергии спин-орбитального расщепления валентных зон  $\Delta$  приведены в табл. 1–4. Здесь же представлена зависимость от  $\Delta$  энергии нижнего уровня свободной дырки ( $Z = 0$ ) (вторая колонка в таблицах). В таблицах энергии указаны в единицах  $R_a$ , силы осцилляторов в  $10^{-2}$ . Мы вычислили эти величины при различных значениях радиуса точки и различных значениях параметра  $\mu$ , что позволяет оценить их для акцепторов в квантовых точках из разных материалов. Действительно, в сферическом приближении при использовании безразмерных единиц параметры  $\mu$  и  $\Delta$  полностью характеризуют валентную зону полупроводника, что видно, в частности, из уравнений (1), (3). Следует отметить, что отношение эффективных масс тяжелых и легких дырок (зона  $\Gamma_8^+$ )  $\beta$  выражается только через  $\mu$ :  $\beta = (1 + \mu)/(1 - \mu)$ . В таблицах представлены наиболее интересные результаты расчетов при значениях  $\mu = 0.8, 0.5$ , характерных для многих полупроводников, и при  $R_0 = 1.3$ . Здесь же приведены соответствующие данные, полученные в пределе

**Таблица 1.** Энергии уровней  $E$  и силы осцилляторов  $f$  оптических переходов из основного в возбужденные состояния мелкого акцептора в квантовой точке как функции спин-орбитального расщепления  $\Delta$ .  $\mu = 0.8, R_0 = 3$ 

$\Delta$	$E(Z=0)$	$E(1S_{3/2})$	$E(2P_{3/2})$	$f$	$E(3P_{3/2})$	$f$	$E(2P_{5/2})$	$f$	$E(2P_{1/2})$	$f$
0	0.449	-3.22	-1.25	0.041	-0.663	1.75	-0.663	15.8	-1.25	0.008
0.1	0.464	-3.21	-1.23	0.065	-0.607	1.79	-0.646	15.8	-1.18	0.020
0.5	0.511	-3.17	-1.19	0.151	-0.371	2.53	-0.595	15.8	-0.921	0.126
1	0.548	-3.12	-1.17	0.217	-0.255	2.52	-0.558	15.7	-0.608	0.390
2	0.592	-3.05	-1.14	0.265	-0.205	2.31	-0.520	15.9	-0.028	1.54
3	0.616	-3.00	-1.13	0.274	-0.177	2.34	-0.502	16.2	0.476	2.95
5	0.644	-2.92	-1.12	0.269	-0.147	2.42	-0.485	16.9	1.22	6.91
10	0.672	-2.81	-1.11	0.245	-0.117	2.56	-0.469	18.1	2.01	13.2
$\infty$	0.677	-2.57	-1.10	0.21	-0.073	2.90	-0.450	20.5	2.78	21.3

**Таблица 2.** Энергии уровней  $E$  и силы осцилляторов  $f$  оптических переходов из основного в возбужденные состояния мелкого акцептора в квантовой точке как функции спин-орбитального расщепления  $\Delta$ .  $\mu = 0.8, R_0 = 1$ 

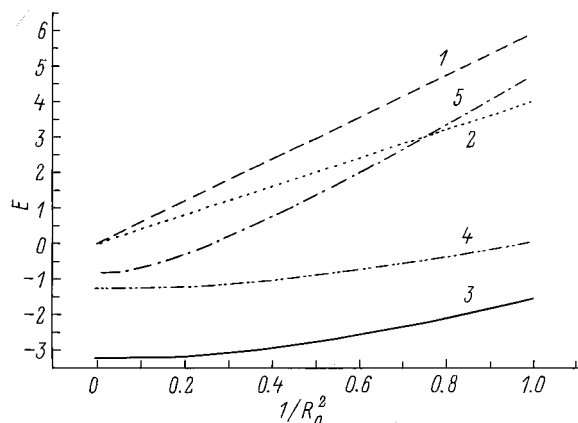
$\Delta$	$E(Z=0)$	$E(1S_{3/2})$	$E(2P_{3/2})$	$f$	$E(3P_{3/2})$	$f$	$E(2P_{5/2})$	$f$	$E(2P_{1/2})$	$f$
0	4.04	-1.52	0.076	$1 \cdot 10^{-4}$	4.76	1.79	4.76	16.1	0.076	$2 \cdot 10^{-5}$
1	4.19	-1.42	0.228	$3 \cdot 10^{-6}$	5.30	2.50	4.92	16.2	0.738	0.015
5	4.64	-1.16	0.639	0.001	6.79	7.26	5.15	16.5	3.29	0.479
10	4.99	-0.999	0.927	0.004	7.31	8.30	5.24	17.1	6.27	1.85
20	5.38	-0.854	1.23	0.010	7.72	8.65	5.29	17.8	11.4	6.20
50	5.84	-0.720	1.55	0.023	8.15	9.09	5.32	18.5	21.0	21.4
100	6.08	-0.659	1.72	0.034	8.37	9.33	5.33	18.8	26.8	34.0
$\infty$	6.09	-0.58	1.95	0.05	8.69	9.66	5.35	19.1	32.6	45.8

**Таблица 3.** Энергии уровней  $E$  и силы осцилляторов  $f$  оптических переходов из основного в возбужденные состояния мелкого акцептора в квантовой точке как функции спин-орбитального расщепления  $\Delta$ .  $\mu = 0.5, R_0 = 3$ 

$\Delta$	$E(Z=0)$	$E(1S_{3/2})$	$E(2P_{3/2})$	$f$	$E(3P_{3/2})$	$f$	$E(2P_{5/2})$	$f$	$E(2P_{1/2})$	$f$
0	1.03	-1.35	-0.222	3.20	0.621	4.32	0.621	38.9	-0.222	0.640
0.1	1.03	-1.34	-0.207	3.46	0.692	4.09	0.629	39.0	-0.156	0.826
0.5	1.04	-1.33	-0.165	4.19	0.989	3.56	0.654	39.4	0.095	1.83
1	1.04	-1.31	-0.136	4.67	1.35	3.85	0.675	40.0	0.377	3.673
2	1.04	-1.29	-0.108	5.06	1.71	4.72	0.701	40.8	0.829	8.77
3	1.04	-1.28	-0.095	5.20	1.75	4.06	0.715	41.5	1.14	14.3
5	1.05	-1.26	-0.081	5.30	1.78	3.70	0.730	42.4	1.50	22.6
10	1.05	-1.23	-0.069	5.32	1.79	3.48	0.745	43.6	1.81	30.7
$\infty$	1.05	-1.19	-0.054	5.3	1.81	3.22	0.76	45.6	2.10	37.7

**Таблица 4.** Энергии уровней  $E$  и силы осцилляторов  $f$  оптических переходов из основного в возбужденные состояния мелкого акцептора в квантовой точке как функции спин-орбитального расщепления  $\Delta$ .  $\mu = 0.5, R_0 = 1$ 

$\Delta$	$E(Z=0)$	$E(1S_{3/2})$	$E(2P_{3/2})$	$f$	$E(3P_{3/2})$	$f$	$E(2P_{5/2})$	$f$	$E(2P_{1/2})$	$f$
0	9.29	3.49	6.30	2.85	14.6	4.36	14.6	39.3	6.30	0.570
1	9.30	3.51	6.46	3.13	15.3	4.04	14.7	39.6	6.96	0.830
5	9.34	3.58	6.87	3.92	18.3	3.23	14.9	40.5	9.46	2.33
10	9.36	3.63	7.16	4.43	21.8	3.01	15.0	41.2	12.2	5.12
20	9.38	3.69	7.43	4.87	24.7	2.33	15.1	42.1	16.3	12.3
50	9.41	3.76	7.70	5.20	25.2	1.66	15.3	43.1	22.0	28.2
100	9.42	3.79	7.82	5.32	25.4	1.54	15.4	43.6	24.3	35.9
$\infty$	9.44	3.84	7.98	5.4	25.4	1.46	15.4	44.3	26.6	41.9



Зависимость энергий нижних уровней свободной дырки и акцептора ( $E$ ) от квадрата обратного радиуса квантовой точки ( $R_0$ ).  $\mu = 0.8$ ,  $\Delta = 0$ . 1 —  $S_1(Z = 0)$ , 2 —  $P_1(Z = 0)$ , 3 —  $1S_1$ , 4 —  $2P_{1,5}$ , 5 —  $2P_2$ . Энергия  $E$  приведена в единицах  $R_a$ , радиус квантовой точки  $R_0$  в единицах  $a$ .

$\Delta = \infty$  в [16]. Состояния в таблицах обозначены так, как это принято в сферическом приближении [22]. Следует отметить, что, как показано в работе [14], в квантовых точках малого радиуса в случае больших величин  $\beta$  и при достаточно малых  $\Delta$  может происходить инверсия порядка состояний свободной дырки  $s$ - и  $p$ -типа. Действительно, в нашем расчете при  $\mu = 0.8$  в квантовой точке радиуса  $R_0 = 3$  при  $0 \leq \Delta \leq 12$ , а в точке радиуса  $R_0 = 1$  при  $0 \leq \Delta \leq 103$  нижним уровнем размерного квантования свободной дырки является состояние  $P_{3/2}$ , в то время как при больших  $\Delta$ , а в случае  $\mu = 0.5$  при всех  $0 \leq \Delta \leq \infty$ , — состояние  $S_{3/2}$ . При этом инверсии акцепторных состояний не происходит ни при каких из исследованных параметров, что видно как из таблиц, так и из рисунка, на котором изображены результаты расчета зависимости энергий нижних уровней свободной дырки и акцепторных уровней от квадрата обратного радиуса квантовой точки при "критических" значениях  $\Delta = 0$ ,  $\mu = 0.8$ , когда инверсия порядка состояний свободной дырки  $s$ - и  $p$ -типа имеет место при всех конечных радиусах точки. Из таблиц видно, что полученные выше (п. 4) соотношения между силами осцилляторов при  $\Delta \rightarrow 0$  выполняются в численном расчете точно. Видно также, что энергии как основного, так и ряда возбужденных состояний акцептора слабо зависят от  $\Delta$  даже при малых радиусах квантовой точки, но при этом силы осцилляторов переходов могут изменяться значительно — на порядки величин. Результаты расчетов показывают, что наиболее существенное влияние спин-орбитальное взаимодействие оказывает на спектры энергий и силы осцилляторов оптических переходов при достаточно больших величинах  $\beta$  и достаточно малых радиусах точки. Понятно, что при малых величинах  $\beta$ , т. е. при  $\mu \rightarrow 0$ , состояния акцептора вообще перестают зависеть от  $\Delta$  — это легко увидеть из уравнений (3), (6). Наибольшее влияние спин-орбитальное взаимодействие

оказывает как на энергию, так и на силу осциллятора перехода в нижнее состояние симметрии  $\Gamma_6^-$  (в сферическом приближении его обозначают как  $2P_{1/2}$ ), поскольку его характер изменяется от тяжелодырочного (при  $\Delta = 0$ ) до легкодырочного (при  $\Delta = \infty$ ). Действительно, как видно из уравнений (6) и (8), в сферическом приближении и в первом порядке теории возмущений по параметру  $\delta$ , которому пропорциональны слагаемые, описывающие гофрировку валентных зон, соответствующее уравнение имеет в этих пределах чисто "водородоподобный" вид с  $L = 1$  и с сильно отличающимися массами, пропорциональными соответственно  $1/(1-\mu)$  и  $1/(1+\mu)$ . Именно поэтому при малых радиусах квантовой точки широко используемое при расчетах приближение бесконечно большого спин-орбитального расщепления валентных зон становится применимым для этих состояний лишь при очень больших  $\Delta$ .

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

## Список литературы

- [1] S. Fraizzoli, A. Pasquarello. *Physica Scripta*, **T39**, 182 (1991).
- [2] G. Bastard. *Phys. Rev. B*, **24**, 4714 (1981).
- [3] C. Mailhiot, Y.-C. Chang, T.C. McGill. *Phys. Rev. B*, **26**, 4449 (1982).
- [4] R.L. Green, K.K. Bajaj. *Phys. Rev. B*, **34**, 961 (1986).
- [5] W.T. Masselink, Y.-C. Chang, H. Morkoc. *Phys. Rev. B*, **32**, 5190 (1985).
- [6] S. Fraizzoli, A. Pasquarello. *Phys. Rev. B*, **44**, 1118 (1991).
- [7] G.W. Bryant. *Phys. Rev. B*, **29**, 6632 (1984).
- [8] J. Lee, H.N. Spector. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **16**, (1984).
- [9] D.S. Chuu, C.M. Hsiao, W.N. Mei. *Phys. Rev. B*, **46**, 3898 (1992).
- [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] Г.Б. Григорян, Э.М. Казарян, Ал.Л. Эфрос, Т.В. Язева. *ФТТ*, **32**, 1772 (1990).
- [15] J.-L. Zhu. *Phys. Rev. B*, **39**, 8780 (1989); J.-L. Zhu, J.-J. Xiong, B.-L. Gu. *Phys. Rev. B*, **41**, 6001 (1990).
- [16] В.И. Галиев, А.Ф. Полупанов. *ФТП*, **27**, 663 (1993).
- [17] J.-L. Zhu, X. Chen. *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**, L123 (1994).
- [18] Ш.М. Коган, А.Ф. Полупанов. *ЖЭТФ*, **80**, 394 (1981).
- [19] А.Ф. Полупанов, Ш.М. Коган. *ФТП*, **13**, 2338 (1979).
- [20] В.И. Галиев, А.Ф. Полупанов. *Препринт N 18(519) ИРЭ АН СССР (М., 1989)*.
- [21] V.I. Galiev, A.F. Polupanov, I.E. Shparlinski. *J. Comput. Appl. Math.*, **39**, 151 (1992).
- [22] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8**, 1525 (1973); *Phys. Rev. B*, **9**, 1525 (1974).
- [23] Sh.M. Kogan, A.F. Polupanov. *Sol. St. Commun.*, **27**, 1281 (1978).

Редактор Л.В. Шаронова

## Effect of the spin-orbit coupling on the acceptor optical spectra in a semiconductor quantum dot

A.F. Polupanov, V.I. Galiev, M.G. Novak

Institution of Radioengineering and Electronics,  
Russian Academy of Sciences,  
103907 Moscow, Russia

**Abstract** The energy levels and oscillator strengths of dipole optical transitions from the ground states to the odd excited states of a shallow acceptor placed in the center of a spherical quantum dot are calculated as functions of the spin-orbit split-off energy  $\Delta$  at different values of the dot radius  $R$  and different values of a heavy-to-light-hole mass ratio  $\beta$ . It was found that the spin-orbit coupling has a significant effect on some acceptor states in the actual range of large value of  $\beta$  and at sufficiently small values of  $R$ . The spin-orbit coupling has the most significant effect on the lowest state of the  $\Gamma_6^-$  symmetry since its character changes from the heavy-hole one (when  $\Delta = 0$ ) to the light-hole one ( $\Delta = \infty$ ). In the framework of the used approximations the problem is solved exactly, in particular, exact analytical expressions for acceptor wave functions have been derived.