

# Энергия связи экситонно-примесных комплексов в полупроводниках со структурой алмаза и цинковой обманки

© С.М. Зубкова, Е.В. Смелянская\*, Е.И. Шульзингер

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича Национальной академии наук Украины, 252680 Киев, Украина

\* Национальный технический университет "Киевский политехнический институт", 252056 Киев, Украина

(Получена 18 апреля 1997 г. Принята к печати 21 октября 1997 г.)

Энергии связи четырех комплексов: экситон + заряженная примесь, экситон + нейтральная примесь рассчитывались вариационным методом в полупроводниках со структурой типа алмаза и цинковой обманки с учетом вырождения края валентной зоны. Численные расчеты проделаны для экситонно-примесных комплексов в ряде кристаллов типа  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^V$  и  $A^{IV}B^{IV}$ .

## 1. Введение

Впервые существование нескольких типов экситонно-примесных комплексов (ЭПК) было предсказано в [1]. В [2,3] при  $T = 1.6\text{ К}$  впервые наблюдались в гексагональном CdS линии поглощения и излучения нескольких ЭПК, идентифицированных по величине  $g$ -фактора, как ЭПК на нейтральном акцепторе, нейтральном доноре и ионизированном доноре. Первые расчеты энергии связи экситона с ионизированной примесью были сделаны в приближении метода эффективной массы (МЭМ) с простыми параболическими законами дисперсии для электрона и дырки. Так, в [4] с помощью вариационного принципа вычислялась энергия связи экситона с ионизированной примесью в полупроводниках. Было показано, что связанное состояние экситон +  $D^+$  существует при  $m_h > 5m_e$ , а экситон +  $A^-$  — при  $m_h > 4m_e$ .

В вариационных вычислениях [5] энергии и волновые функции комплексов экситон +  $D^+$  и экситон +  $A^-$  рассчитаны для широкого интервала отношений  $m_e/m_h$ , охватывающего их экспериментальные значения в InSb, InAs, InP, GaAs, GaSb и т.д. Авторы [5] пришли к выводу, что связанные экситоны существуют при  $1.4 \leq m_e/m_h \leq 4.5$ .

Энергия экситона, связанного на ионизированной примеси, рассчитывалась также в [6] прямым вариационным методом в полупроводниках типа  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^V$  со структурой сфалерита с учетом вырождения края валентной зоны и в приближении усредненной эффективной массы. Было показано, что экситонные комплексы в ионных полупроводниках могут образовываться лишь на однозарядных примесях. В [7–9] исследовалась проблема стабильности экситонов на нейтральном доноре или акцепторе. Авторы показали, что для стабильности ЭПК критический параметр должен быть в интервале  $1 < \left(\sigma_{cr} = \frac{m_e}{m_h}\right) < 2$ . Энергии связи ЭПК вычислялись вариационным методом с 46- и 35-членными пробными волновыми функциями атомного типа. Численные расчеты проделаны для кристаллов CdS, CdSe, ZnO, GaAs, InP без учета сложной зонной структуры этих кристаллов.

В более поздней работе [10] энергия основного состояния ЭПК экситон +  $D^0$  рассчитывалась вариацион-

ным методом в приближении простых параболических зон для произвольного значения отношения  $\sigma = m_e/m_h$ . Было показано, что этот комплекс устойчив при любом отношении электронной и дырочной эффективных масс.

Таким образом, несмотря на почти 35-летнюю историю исследования ЭПК в кристаллах, имеются существенные расхождения вплоть до противоречий в теоретических результатах различных авторов, касающихся как условий существования и стабильности ЭПК, так и конкретных величин энергии связи различных комплексов. Кроме того, большинство теоретических расчетов проведено в приближении модельной зонной структуры с простыми параболическими законами дисперсии. Иными словами, проблему ЭПК в полупроводниках нельзя считать окончательно решенной. Это относится прежде всего к разработке единого метода оперативного и надежного расчета энергий связи четырех важнейших ЭПК: экситон +  $D^+$ , экситон +  $A^-$ , экситон +  $D^0$ , экситон +  $A^0$  в реальных полупроводниках со сложной зонной структурой с использованием единого подхода к описанию как экситонных и примесных состояний, так и состояний ЭПК и одновременным выяснением возможности их существования в конкретном кристалле.

## 2. Постановка задачи. Гамильтониан экситонно-примесного комплекса

Наша работа посвящена расчету энергий основного состояния вышеперечисленных четырех ЭПК с учетом вырождения вершины валентной зоны в полупроводниках со структурой алмаза и цинковой обманки.

Ранее при участии одного из авторов в [11,12] на основе многоэлектронной задачи были выведены уравнения МЭМ [13,14], описывающие состояние экситона в алмазно- и сфалеритоподобных полупроводниках с учетом вырождения верхней валентной зоны, спин-орбитального взаимодействия, а также анизотропии и непараболичности зоны проводимости. Система 4-х дифференциальных уравнений в частных производных 2-го порядка каждое, описывающая экситон в пренебрежении

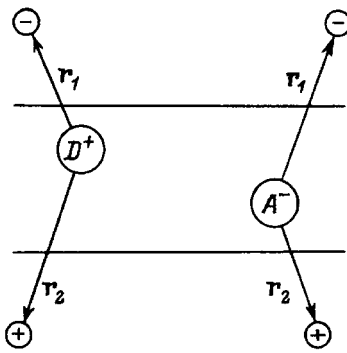


Рис. 1. Экситон на ионизированной примеси.

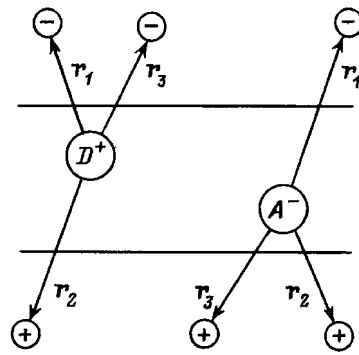


Рис. 2. Экситон на нейтральной примеси.

спин-отщепленной валентной зоной, имеет вид

$$\begin{cases} (\hat{b}_1 - E) \Phi + (\hat{P} + i\hat{Q}) \chi = 0; \\ (\hat{P} - i\hat{Q}) \Phi + (\hat{b}_4 - E) \chi = 0; \end{cases} \quad \Phi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}; \quad \chi = \begin{pmatrix} \Psi_2 \\ \Psi_3 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} (\hat{P} + i\hat{Q}) &= \sqrt{C^2 + 3B^2} \left( -I \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \pm i\sigma_3 \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \mp i\sigma_2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right)_2 \\ &\mp \frac{i\sqrt{3}}{2} B\sigma_1 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)_2, \quad (2) \\ \hat{b}_{1,4} &= -|A|\Delta_2 \pm \frac{B}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - 2\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)_2 \\ &- \frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_1 - \frac{e^2}{\epsilon_\infty |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} + V, \quad (3) \end{aligned}$$

$A, B, C$  — параметры Дрессельхауза–Кипа–Киттеля,  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  — матрицы Паули,  $I$  — единичная матрица,  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  — радиус-векторы электрона и дырки в экситоне,  $V$  — потенциальная энергия примесного центра.

Для экситона, связанного на ионизированной примеси, имеем

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{ze^2}{\epsilon_0 r_2} - \frac{ze^2}{\epsilon_0 r_1}, \quad (4)$$

при этом для комплекса экситон +  $D^+$   $z = 1$ , для комплекса экситон +  $A^-$   $z = -1$ ,  $z$  — заряд примесного центра (см. рис. 1).

Для экситона, связанного на нейтральной примеси,

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \frac{\hbar^2}{2m_e(m_h)} \Delta_3 - \frac{e^2}{\epsilon_0 r_3} \\ &- \frac{ze^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} + \frac{ze^2}{\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|}. \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь  $\mathbf{r}_3$  — радиус-вектор электрона (дырки), обеспечивающих нейтральность примеси,  $z = \pm 1$  в случае нейтрального донора или акцептора соответственно (см. рис. 2).

### 3. Расчет энергии основного состояния ЭПК

Системы (1)–(6) решались численно прямым вариационным методом. Пробная функция аппроксимировалась с мультипликативной форме, причем для электрона ( $\mathbf{r}_1$ ) в экситоне и для собственного электрона (дырки) ( $\mathbf{r}_3$ ) нейтральной примеси выбирались водородоподобные функции с вариационными параметрами  $\alpha$  и  $\beta$  соответственно:

$$\begin{aligned} \Psi &= \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_1} \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}} e^{-\beta r_3} \\ &\times \left( \psi_1(r_2) \psi_2(r_2) \psi_3(r_2) \psi_4(r_2) \right)^+. \quad (6) \end{aligned}$$

Столбец  $(\psi_1 \psi_2 \psi_3 \psi_4)^+$  описывает состояние дырки в 4-кратно вырожденной валентной зоне с полным моментом  $j = 3/2$ . Пробные функции  $\psi_i$  в соответствии с симметрией дырочной части гамильтониана (1)–(3) выбирались в виде разложения по водородоподобным  $s$ - и  $d$ -состояниям типа

$$\psi_i = \varphi_i(r, \theta) e^{-\alpha_i r} e^{im_i \varphi}. \quad (7)$$

Аксиальная симметрия задачи [15] позволяет приписать четырем функциям  $\psi_i$  такие зависимости от угла  $\varphi$ :

$$m_1 = m, \quad m_2 = m + 1, \quad m_3 = m - 2, \quad m_4 = m - 1. \quad (8)$$

Самому низкому 4-кратно вырожденному состоянию дырки соответствует  $m = 0, 1$ . Тогда для каждой из 4-х компонент имеем:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= c_1 e^{-\alpha_1 r_2} + c_5 (x^2 + y^2 - 2z^2) e^{-\alpha_5 r_2}; \\ \psi_2 &= c_2 z(x + iy) e^{-\alpha_2 r_2}; \quad \psi_3 = c_3 i(x - iy)^2 e^{-\alpha_3 r_2}; \\ \psi_4 &= c_4 iz(x - iy) e^{-\alpha_4 r_2}. \quad (9) \end{aligned}$$

Для комплексов экситон + заряженная примесь второй сомножитель в (6) отсутствует.  $\alpha, \beta, \alpha_i, c_i, i = 1, \dots, 5$  — вариационные параметры. Подстановка

(6) и (9) в (1)–(4) с учетом нормировки  $\int \Psi^+ \Psi d\tau = 1$  дает для комплексов экситон +  $D^+$  или  $A^-$  функционал:

$$E(\alpha, \alpha_i, c_i) = \int \Psi^+ \hat{H} \Psi d\tau = \frac{\alpha^2}{2m_e} + A s_1(\alpha_i, c_i) \pm \frac{B}{2} s_2(\alpha_i, c_i) + \sqrt{3} B s_3(\alpha_i, c_i) + \sqrt{C^2 + 3B^2} S_4(\alpha_i, c_i) + \frac{z\alpha}{\varepsilon_0} - z s_5(\alpha_i, c_i)/\varepsilon_0 - s_6(\alpha, \alpha_i, c_i)/\varepsilon_\infty, \quad (10)$$

где

$$s_1 = \pi (\varepsilon_2 \alpha_1^4 + 3\varepsilon_2 + 12\varepsilon_3 + 3\varepsilon_4 + 18\varepsilon_5);$$

$$s_2 = 6\pi (32\omega_{15}/5 - \varepsilon_2/7 + 8\varepsilon_3/7 + 1\varepsilon_4/7 + 12\varepsilon_5/7);$$

$$s_3 = 32\pi (1\omega_{13}/5 - 96\delta_{35}/7 + 24\delta_{24}/7);$$

$$s_4 = 32\pi \left[ -(\omega_{12} + \omega_{13})/5 + 48(2\delta_{35} - \delta_{25})/7 + 24(2\delta_{34} - \delta_{24})/7 \right];$$

$$s_5 = \pi (\varepsilon_1 \alpha_1^3 + \varepsilon_2/\alpha_2 + 4\varepsilon_3/\alpha_3 + \varepsilon_4/\alpha_4 + 6\varepsilon_5/\alpha_5);$$

$$s_6 = s_5 - \pi \left[ C_1^2 \frac{2\alpha + \alpha_1}{(\alpha + \alpha_1)^3} + \gamma_2 + 4\gamma_3 + \gamma_4 + 6\gamma_5 \right];$$

$$\varepsilon_i = c_i^2/\alpha_i^5; \quad \omega_{ij} = \frac{c_i c_j \alpha_i (5\alpha_i + \alpha_j)}{(\alpha_i + \alpha_j)^5};$$

$$\delta_{ij} = \frac{c_i c_j \alpha_i \alpha_j}{(\alpha_i + \alpha_j)^7}; \quad \gamma_i = \frac{c_i^2 (4\alpha + \alpha_i)}{(\alpha + \alpha_i)^7}.$$

Функционал (10) записан так, что явно видны вклады от кинетической энергии экситонного электрона (слагаемое 1), кинетической энергии экситонной дырки с учетом 4-кратного вырождения края валентной зоны (слагаемые 2–5), экранированного кулоновского взаимодействия электрона (дырки) с заряженной примесью (слагаемые 6–7), экранированного взаимодействия электрона и дырки в экситоне (слагаемое 8). Отметим, что анализ уравнения  $\partial E(\alpha, \alpha_i, c_i)/\partial \alpha = 0$  показал, что оно удовлетворяется только при условии  $z < \varepsilon_0/\varepsilon_\infty$ , следовательно, ЭПК экситон +  $D^+$  или  $A^-$  могут образовываться только на однозарядной примеси, что совпадает с выводами [6].

Условие нормировки приводит к

$$\pi \left( \varepsilon_1 \alpha_1^2 + 3\varepsilon_2/\alpha_2^2 + 12\varepsilon_3/\alpha_3^2 + 3\varepsilon_4/\alpha_4^2 + 18\varepsilon_5/\alpha_5^2 \right) = 1. \quad (11)$$

При получении (10)–(11) использовалось важное свойство операторов  $\hat{b}_2$  и  $\hat{b}_3$ :

$$\int \psi_n^* \hat{b}_{2,3} \psi d\tau = \int \psi \hat{b}_{2,3} \psi_n^* d\tau. \quad (12)$$

Функционал (10) и все последующие формулы записаны в безразмерных переменных

$$\varepsilon = E \frac{\hbar^2}{m_0 e^4}, \quad \rho = r \frac{m_0 e^2}{\hbar^2}.$$

Для ЭПК с нейтральными примесями к (10) добавляются слагаемые

$$\frac{\beta^2}{2m_e(m_h)} - \frac{|z|\beta^2}{\varepsilon_0} + \frac{\text{sign}(z)}{\varepsilon_\infty} \left[ \frac{\alpha^2(\alpha + 2\beta)}{(\alpha + \beta)^3} - \alpha - \pi \times \left( c_1^2 \frac{\alpha_1 + 2\beta}{(\alpha_1 + \beta)^3} + c_2^2 \chi_2 + 4c_3^2 \chi_3 + c_4^2 \chi_4 + 6C_5^2 \chi_5 \right) \right],$$

$$\chi_i = \frac{\alpha_i + 4\beta}{(\alpha_i + \beta)^7}, \quad i = 2, 3, 4, 5. \quad (13)$$

Эти слагаемые включают кинетическую энергию электрона (дырки), нейтрализующего примесь, кулоновское взаимодействие этого электрона (дырки) с заряженным примесным центром, кулоновское взаимодействие экситонных электрона и дырки с электроном (дыркой) нейтральной примеси.

Функционалы (10), (13) с учетом (11) численно минимизировались по 10–11 параметрам методом крутого спуска (градиентным методом). Рабочая программа позволяет получать энергии связи четырех ЭПК для Ge, Si и полупроводников типа  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^V$  со структурой цинковой обманки.

#### 4. Обсуждение результатов

Расчеты выполнены для 16 кристаллов указанных выше типов. Сравнительный анализ вкладов отдельных слагаемых в функционалах (10), (13) позволяет судить о возможности существования данного комплекса в конкретном кристалле при данных параметрах  $m_e$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$ . Например, в Si при  $A = -4.25$ ,  $B = -0.7$ ,  $C^2 = 21.72$  в единицах  $(\hbar^2/2m_0)$  в ЭПК экситон +  $A^-$  взаимодействие экситонных электрона и дырки и взаимодействие электрона с  $A^-$  почти на 4 порядка меньше взаимодействия дырки с  $A^-$ , т.е. мы получили мелкий акцепторный уровень с  $E_b = -30.3$  мэВ, что хорошо согласуется с  $E_b = -30.6$  мэВ, рассчитанной в [16] при тех же параметрах.

В табл. 1 и 2 полученные нами энергии основного состояния четырех ЭПК для ряда кристаллов сравниваются с расчетами других авторов и имеющимися экспериментальными данными. В табл. 3 приведены использованные параметры  $m_e$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C^2$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $\varepsilon_\infty$ , а также усредненное  $m_h$  и  $\sigma = m_e/m_h$ . Сравнение показывает удовлетворительное согласие с экспериментальными данными, а для GaAs, CdTe, GaSb, InSb, InP — хорошее согласие. Расхождения моно прежде всего отнести к существенному различию в параметрах зонной структуры, полученных различными авторами как экспериментально, так и теоретически.

**Таблица 1.** Энергии связи (мэВ) основного состояния ЭПК экситон +  $D^+$  и экситон +  $D^0$  для ряда полупроводников

		GaAs		ZnTe		ZnSe		CdTe		GaSb		GaP		InSb		InP	
ЭПК Экситон + $D^+$	Настоящая работа	-5.65		-32.2		-34		-15.5		-2.5		-16.7		-0.706		-6.95	
	Теоретические расчеты	-5.5	[6]	-11.5	[4]	-17.1	[23]	-14.6	[18]	-2.7	[18]	-22.8	[18]	-1.06	[23]	-6.8	[18]
		$\sigma=0.25$						$\sigma=0.27$		$\sigma=0.16$		$\sigma=0.18$				$\sigma=0.18$	
		-6.15	[18]	-13	[18]	-37.1	[18]							-0.7	[18]		
	Эксперимент	-7.2	[19]		$\sigma=0.15$	-34.3	[24]	-14	[25]					$\sigma=0.04$			
		-6.1	[20]			-37.3	[24]	-19	[26]								
ЭПК Экситон + $D^0$	Настоящая работа	-5.6		-30.05		-32.5		-12.8		-2.43		-15.38		-0.695		-6.45	
	Теоретические расчеты	-6.4	[21]	-25.9	[22]	-31.4	[22]	-12.9	[21]	-2.5	[21]					-8.1	[21]
		$\sigma=0.14$				$\sigma=0.21$											
	Эксперимент	-6	[19]	-12.1	[21]	-26.9	[21]	-21.3	[22]								
						-33.3	[24]										

**Таблица 2.** Энергии связи (мэВ) основного состояния ЭПК экситон +  $A^-$  и экситон +  $A^0$  для ряда полупроводников

		GaAs		ZnTe		CdTe		GaSb		GaP	
ЭПК Экситон + $A^-$	Настоящая работа	-29.5		-118.5		-73.1		-10.8		-30.1	
	Теоретические расчеты	-22.1	[16]	-106	[4]			-7.2	[6]	-36	[6]
		$\sigma=0.25$						$\sigma=0.28$		$\sigma=0.40$	
		$\varepsilon_0=12.9$						-8.75	[6]	-47.1	[6]
		-28.1	[6]					$\sigma=0.34$		$\sigma=0.34$	
	$\sigma=0.25$						-18	[4]			
	$\varepsilon=11.6$										
	Эксперимент	-31.9	[19]					-8	[28]	-30	[29]
								-17	[28]		
Экситон + $A^0$	Настоящая работа	-34.4		-74.2		-74.6		-12.6		-26.1	
	Теоретические расчеты	$\sigma=0.28$		$\sigma=0.39$		$\sigma=0.16$		$\sigma=0.25$			
		-29.3	[27]								
		$\sigma=0.22$									
	Эксперимент	-34	[20]			-76.8	[27]				
		-39	[27]								
		-36.7	[19]								

**Таблица 3.** Параметры кристаллов

	$A \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right)$	$B \left( \frac{\hbar^2}{2m_0} \right)$	$C^2 \left( \frac{\hbar^4}{4m_0^2} \right)$	$\varepsilon_0$		$\varepsilon_\infty$		$m_e$	$m_h$	$\sigma$
GaAs	-5.5	-4.5	-1	12.9	[6]	10.9	[6]	0.066	0.55	0.12
ZnTe	-1.2	-2.38	-0.2	8.7	[30]	7.2	[30]	0.17	0.58	0.29
ZnSe	-1.71	-2.39	4.5	8.6	[30]	5.9	[30]	0.21	0.82	0.26
CdTe	-3.9	-4	-14	10.7	[30]	7.1	[30]	0.11	2.56	0.043
GaSb	-10.2	-8.6	16	16.1	[6]	14.2	[6]	0.046	0.38	0.12
GaP	-4.7	-2.6	9	10.7	[6]	8.5	[6]	0.13	0.34	0.38
InSb	-31.5	-29.3	113	17.2	[30]	15.3	[30]	0.015	0.27	0.056
InP	-6.3	-5.3	0	12.3	[30]	9.5	[30]	0.072	0.54	0.133

Заметим, что само понятие так называемой усредненной эффективной массы дырки, используемое в большинстве работ по ЭПК, зависит от способа ее определения. Например, в GaAs  $m_h$ , определенная из энергии связи свободного экситона, равна  $0.17m_0$ ; из энергии связи мелкого акцептора —  $0.3m_0$ , а как арифметическое среднее эффективных масс тяжелой ( $m_{hh}$ ) и легкой ( $m_{lh}$ ) дырок —  $0.27m_0$  [10]. Еще раз заметим, что в нашей работе мы не прибегали к такому понятию, оперируя параметрами Д-К-К.  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , описывающими структуру верхней валентной зоны. В табл. 3 приводятся  $m_h$ , равные среднему арифметическому эффективных масс тяжелых и легких дырок

$$m_{hh(lh)} = \frac{m_0}{\gamma_1 \mp 2|\gamma|}, \quad \gamma = \frac{2\gamma_2 + 3\gamma_3}{5}, \quad \frac{\gamma_1}{m_0} = -\frac{2A}{\hbar^2},$$

$$\frac{\gamma_2}{m_0} = -\frac{B}{\hbar^2}, \quad \frac{\gamma_3}{m_0} = \frac{\sqrt{C^2 + 3B^2}}{\sqrt{3}\hbar^2}, \quad (14)$$

где  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\gamma_3$  — известные параметры Латтинджера [17], и соответствующие  $\gamma = m_e/m_h$ . Наши  $\sigma$ , вычисленные с использованием (14), часто значительно отличаются от  $\sigma$ , приведенных другими авторами, что затрудняет корректное сравнение результатов.

Расчеты показали, что слагаемые, происходящие от недиагональных частей гамильтониана (1)–(3) и соответствующие учету вырождения верхней валентной зоны, дают вклад 10–30% в энергию связи комплексов во многих кристаллах, что оправдывает отход от модельной зонной структуры и введения усредненной эффективной массы дырки. Такой вклад оказался особенной существенным в кристаллах ZnS, InAs, GaP, AlSb, GaSb, AlAs для ЭПК экситон +  $A^-$ , в кристаллах SiC, ZnTe, ZnS для ЭПК экситон +  $D^+$ , в кристаллах GaAs, ZnS, Si, CdTe, GaP, GaSb, ZnSe для ЭПК экситон +  $A^0$ . В случае ЭПК экситон +  $D^0$  вклад от членов, связанных с вырождением валентной зоны, оказался пренебрежимо малым во всех исследованных кристаллах.

Из табл. 1 видно, что энергии ЭПК с  $D^+$  и  $D^0$  очень близки по величине, причем энергия комплекса экситон +  $D^+$  больше энергии комплекса экситон +  $D^0$  в среднем на 5–7%. Для комплексов с  $A^-$  и  $A^0$  имеет место значительно больший разброс энергий связи.

Для дальнейшего улучшения расчетов необходимо учесть спин-орбитально отщепленную валентную зону, что особенно актуально для легких кристаллов (Si, SiC, ZnS), в которых величина спин-орбитального расщепления сравнима с энергией связи локализованного состояния. В этом случае необходимо решать систему шести дифференциальных уравнений в частных производных [32].

## Список литературы

- [1] M.A. Lampert. Phys. Rev. Lett., **1**, 450 (1958).
- [2] J.J. Hopfield, D.G. Thomas. Phys. Rev., **122**, 35 (1961).
- [3] D.G. Thomas, J.J. Hopfield. Phys. Rev., **128**, 2135 (1962).

- [4] R.R. Sharma, S. Rodrigues. Phys. Rev., **153**, 823 (1967).
- [5] О.С. Зинец, В.И. Сугаков. УФЖ, **12**, 344 (1967).
- [6] Ш.Н. Гифейсман, В.П. Корочану. ФТП, **18**, 671 (1984).
- [7] G. Munschy. Phys. St. Sol. B, **53**, 377 (1972).
- [8] G. Munschy, C. Carabatos. Phys. St. Sol., **57**, 523 (1973).
- [9] B. Stébe, G. Munschy. Phys. St. Sol., **88**, 713 (1978).
- [10] T.D. Clark, K.K. Bajaj, W.M. Theis, D.E. Phelps. Phys. St. Sol. B, **110**, 341 (1982).
- [11] С.М. Зубкова, К.Б. Толпыго. ФТТ, **19**, 556 (1977).
- [12] С.М. Зубкова, К.Б. Толпыго. ФТТ, **21**, 1210 (1979).
- [13] К. Киттель, А. Митчелл. В кн.: *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.Л. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957) с. 505.
- [14] Дж. Латтинджер, В. Кон. *Проблемы физики полупроводников*, под ред. В.Л. Бонч-Бруевича (М., ИЛ, 1957) с. 515.
- [15] В.Н. Демьянков, С.М. Зубкова, К.Б. Толпыго, В.Г. Филин. ФТТ, **25**, 3114 (1983).
- [16] S.M. Zubkova, V.G. Filin, E.V. Smelyanskaya, K.B. Tolpygo. Phys. St. Sol. B, **183**, 497 (1994).
- [17] J.M. Luttinger. Phys. Rev., **102**, 1030 (1956).
- [18] G. Mahler, U. Schröder. Phys. Rev. Lett., **27**, 1358 (1971).
- [19] E.H. Bogardus, H.B. Bebb. Phys. Rev., **176**, 993 (1968).
- [20] M.A. Gilileo, P.T. Bailey, D.E. Hill. Phys. Rev., **174**, 898 (1968).
- [21] F. Mokross, H. Buttner. Phys. St. Sol., **94**, 107 (1979).
- [22] W. Ungier, M. Suffczynski, J. Adamowski. Phys. Rev. B, **24**, 2109 (1981).
- [23] M. Suffczynski. Phys. Lett., **24A**, 453 (1967).
- [24] J.L. Merz, H. Kukimoto, K. Nassau, J.W. Shiever. Phys. Rev. B, **6**, 545 (1972).
- [25] G. Babonas., A. Sileika. Phys. St. Sol., **42**, 577 (1970).
- [26] Г.Л. Бир, Б.С. Разбирин, И.Н. Уральцев. ФТТ, **14**, 360 (1972).
- [27] А.Н. Лобаев, А.П. Силин. ФТТ, **24**, 1457 (1982).
- [28] E.J. Johnson, H.Y. Fan. Phys. Rev., **139**, A 1991 (1965).
- [29] *Оптические свойства полупроводников*, под ред. Р.К. Уиллардсона, А.С. Бира (М., Мир, 1970) с. 488.
- [30] А.Н. Пихтин, А.Д. Яськов. ФТП, **12**, 1047 (1978).
- [31] M. Cardona. J. Phys. Chem. Sol., **24**, 1543 (1963).
- [32] В.Н. Демьянков, С.М. Зубкова, К.Б. Толпыго, В.Г. Филин. ФТТ, **25**, 3114 (1983).

Редактор В.В. Чалдышев

## The binding energies of the exciton-impurity complexes in semiconductors with diamond and sphalerite type structures

S.M. Zubkova, E.V. Smelyansky, E.I. Shulzinger

Institute of Materials Science Problems,  
National Academy of Sciences of Ukraine  
252680 Kiev, Ukraine

**Abstract** The binding energies of four complexes: exciton + ionized impurity and exciton + neutral impurity are calculated by the variational method taking into account the upper fourfold degenerate valence band in semiconductors with diamond and sphalerite type structures. The numerical calculations are made for exciton-impurity complexes in some crystals of  $A^{II}B^{VI}$ ,  $A^{III}B^V$ ,  $A^{IV}B^{IV}$ -types.

Fax: (380–44) 444–20–78