

УДК 621.315.592

## Расчет волновых функций резонансных состояний акцепторов в узкозонных соединениях CdHgTe

© М.С. Жолудев<sup>1,2</sup>, Д.В. Козлов<sup>1,2</sup>, Н.С. Куликов<sup>1,2</sup>, А.А. Разова<sup>1,2</sup>, В.И. Гавриленко<sup>1,2</sup>, С.В. Морозов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики микроструктур Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, Россия

<sup>2</sup> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

E-mail: zholudev@ipmras.ru

Поступила в Редакцию 6 апреля 2020 г.

В окончательной редакции 12 апреля 2020 г.

Принята к публикации 12 апреля 2020 г.

Проведены расчеты волновых функций электрона в зоне проводимости бесщелевого твердого раствора HgCdTe в поле кулоновского акцептора. Определены энергии резонансных состояний.

**Ключевые слова:** примесь, резонансные состояния, кадмий–ртуть–теллур, волновая функция.

DOI: 10.21883/FTP.2020.08.49652.9404

### 1. Введение

Тройное соединение кадмий–ртуть–теллур (КРТ) в последнее время привлекает большое внимание исследователей [1–8]. Множество работ посвящено различным фундаментальным свойствам, таким как гигантское спиновое расщепление [9,10], состояние топологического изолятора [3,4,11] и безмассовые фермионы Кейна [5,6]. С прикладной точки зрения КРТ — основной материал для инфракрасных приемников [12] и перспективная основа для лазеров среднего и дальнего инфракрасного диапазона [13]. Несмотря на то что за последние два десятилетия наблюдается значительный прогресс в технологии изготовления структур на основе КРТ [14,15], остаточные примеси и дефекты все еще остаются актуальной проблемой для данного материала. В относительно широкозонных образцах локализованные состояния в запрещенной зоне оказывают существенное влияние на время жизни носителей заряда, что отражается на эффективности оптоэлектронных устройств [16,17]. В узкозонных и бесщелевых структурах поглощение терагерцового излучения примесно-дефектными центрами существенно искажает спектры межзонных переходов, чем усложняет оптические исследования различных фундаментальных эффектов [6,18,19]. Кроме того, наличие примесей и дефектов акцепторного типа в таких образцах приводит к возникновению резонансных состояний в зоне проводимости [20], которые могут повлиять также на процессы оже-рекомбинации. Таким образом, задача теоретического описания примесей в КРТ является весьма актуальной.

Предыдущие работы, посвященные расчету характеристик дискретных уровней в запрещенной зоне [21–23], позволили существенно продвинуться в понимании природы примесно-дефектных центров в КРТ. Было показано, что большинство экспериментально наблюдаемых

линий в спектрах фотопроводимости и фотолюминесценции могут быть объяснены влиянием вакансий ртути, представляющих собой двухвалентные акцепторы. Однако детальные теоретические исследования влияния таких центров на непрерывный спектр (в том числе их резонансных состояний) до сих пор не проводились. Расчет волновых функций состояний континуума с учетом потенциала точечных дефектов является актуальной задачей, решение которой позволит получить данные для более точного вычисления матричных элементов излучательных и безызлучательных переходов. В данной работе предлагается метод расчета волновых функций резонансных состояний акцептора в зоне проводимости узкозонного твердого раствора КРТ.

### 2. Метод расчета

Рассмотрим систему, состоящую из однородного полупроводника с однократно заряженным акцепторным центром. Общий гамильтониан этой системы имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(r), \quad (1)$$

где  $\hat{H}_0$  — гамильтониан электрона в однородном полупроводнике, а в качестве потенциала дефекта используется кулоновский потенциал

$$V(r) = \frac{e^2}{\epsilon_0 r},$$

где  $e$  — элементарный заряд,  $\epsilon_0$  — низкочастотная диэлектрическая проницаемость материала. Будем считать систему сферически симметричной, что позволит аналогично [24,25] перейти от трехмерной задачи к одномерной.

Будем искать волновую функцию в приближении огибающих функций [26], явно учитывая зону проводимости, а также зоны легких и тяжелых дырок (модель Кейна  $6 \times 6$  с зонами  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ ). При этом волновая функция записывается следующим образом:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{S=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \sum_{\mu=-S}^S F_{S,\mu}(\mathbf{r}) u_{S,\mu}(\tilde{\mathbf{r}}),$$

где  $F$  — плавные огибающие,  $u$  — базисные функции. Обозначение  $\tilde{\mathbf{r}}$  означает, что зависимость базисных функций от  $\mathbf{r}$  является периодической и быстроосциллирующей (период совпадает с параметром элементарной ячейки кристалла). Аналогично работам [24,25] мы воспользуемся приближением, в рамках которого базисные функции считаются собственными функциями оператора полного углового момента [27]

$$\begin{aligned} u_{1/2,+1/2} &= S \uparrow; \\ u_{1/2,-1/2} &= S \downarrow; \\ u_{3/2,+3/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow; \\ u_{3/2,+1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow]; \\ u_{3/2,-1/2} &= -\frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow]; \\ u_{3/2,-3/2} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow. \end{aligned} \quad (2)$$

Гамильтониан  $\hat{H}_0$  в сферически-симметричном приближении удобно записать в виде комбинации неприводимых тензоров [28] оператора квазиимпульса  $\hat{\mathbf{k}}_1$ , действующего на огибающие, и оператора  $\hat{U}_c^{(a,b)}$ , действующего на базисные функции. Компоненты этих тензоров определены следующим образом:

$$\hat{\mathbf{k}}_1 = \begin{pmatrix} \hat{k}_{1,1} \\ \hat{k}_{1,0} \\ \hat{k}_{1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{k}_x + i\hat{k}_y) \\ \hat{k}_z \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{k}_x - i\hat{k}_y) \end{pmatrix};$$

$$\langle u_{S,\mu} | \hat{U}_c^{(a,b)} | u_{S',\mu'} \rangle = \delta_{Sa} \delta_{S'b} C_{S,\mu;S',\mu'}^{c,\gamma}.$$

При записи гамильтониана мы будем использовать следующие обозначения для неприводимого тензорного произведения и скалярного произведения неприводимых тензоров [28]:

$$\{\mathbf{A}_a \otimes \mathbf{B}_b\}_{c,\gamma} = \sum_{\alpha=-a}^a \sum_{\beta=-b}^b C_{a,\alpha;b,\beta}^{c,\gamma} A_{a,\alpha} B_{b,\beta},$$

$$(\mathbf{A}_a \cdot \mathbf{B}_a) = \sum_{\alpha=-a}^a B_{a,\alpha}^* A_{a,\alpha}.$$

Здесь  $C_{a,\alpha;b,\beta}^{c,\gamma}$  — коэффициенты Клебша–Гордона [28]. Таким образом, гамильтониан Кейна  $6 \times 6$  в сфериче-

ском приближении может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= E_g \sqrt{2} \hat{U}_0^{(1/2,1/2)} - A_c \sqrt{6} \left( \{\hat{\mathbf{k}}_1 \otimes \hat{\mathbf{k}}_1\}_0 \cdot \hat{U}_0^{(1/2,1/2)} \right) \\ &+ P \frac{2}{\sqrt{3}} \left( \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{U}_1^{(1/2,3/2)} \right) - P \frac{2}{\sqrt{3}} \left( \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{U}_1^{(3/2,1/2)} \right) \\ &+ \gamma 2\sqrt{3} \left( \{\hat{\mathbf{k}}_1 \otimes \hat{\mathbf{k}}_1\}_0 \cdot \hat{U}_0^{(3/2,3/2)} \right) \\ &+ \nu \sqrt{6} \left( \{\hat{\mathbf{k}}_1 \otimes \hat{\mathbf{k}}_1\}_2 \cdot \hat{U}_2^{(3/2,3/2)} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Используются следующие параметры:

$$\begin{aligned} A_c &= \frac{\hbar^2}{2m_0} (1 + 2F) + \frac{P^2}{3(E_g + \Delta)}, \\ \gamma &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1, \\ \nu &= 2 \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{2\gamma_2 + 3\gamma_3}{5}. \end{aligned}$$

В сферически симметричной системе интегралами движения являются  $J$  (модуль полного углового момента) и  $M$  (проекция полного углового момента на ось  $z$ ). В общем случае волновая функция с заданными значениями  $J$  и  $M$  в базисе (2) есть

$$\Psi_{J,M}(\mathbf{r}) = \sum_{S=\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \sum_{L=|J-S|}^{J+S} f_{L,S}^{(J)}(r) \Phi_{L,S}^{(J,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}), \quad (4)$$

где функции  $\Phi_{L,S}^{(J,M)}$  являются собственными функциями оператора полного момента и его проекции на ось  $z$ . Каждая из них представляет собой комбинацию огибающих  $Y_{L,m}^{(\theta,\varphi)}$  с орбитальным моментом  $L$  и базисных функций  $u_{S,\mu}(\tilde{\mathbf{r}})$  с полным угловым моментом  $S$ :

$$\begin{aligned} \Phi_{L,S}^{(J,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}) &= \{\mathbf{Y}_L(\theta, \varphi) \otimes \mathbf{u}_S(\tilde{\mathbf{r}})\}_{J,M} \\ &= \sum_{m=-L}^L \sum_{\mu=-S}^S C_{L,m;S,\mu}^{J,M} Y_{L,m}(\theta, \varphi) u_{S,\mu}(\tilde{\mathbf{r}}). \end{aligned}$$

Подставив волновую функцию (4) в стационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом (3) и воспользовавшись свойствами неприводимых тензоров [28] аналогично [24,25], можно убедиться, что в случае  $J \geq 3/2$  решения будут иметь вид

$$\begin{aligned} \Psi_{J,L,M}(\mathbf{r}) &= f_1^{(J,L)}(r) \Phi_{L,1/2}^{(J,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}) \\ &+ f_2^{(J,L)}(r) \Phi_{L+1,3/2}^{(J,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}) + f_3^{(J,L)}(r) \Phi_{L-1,3/2}^{(J,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}), \end{aligned}$$

а при  $J = 1/2$

$$\begin{aligned} \Psi_{1/2,L,M}(\mathbf{r}) &= f_1^{(1/2,L)}(r) \Phi_{L,1/2}^{(1/2,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}) \\ &+ f_2^{(1/2,L)}(r) \Phi_{L+1,3/2}^{(1/2,M)}(\theta, \varphi, \tilde{\mathbf{r}}), \end{aligned}$$

где

$$L = J \pm 1/2.$$

Таким образом, мы можем перейти к одномерной задаче на вычисление радиальных функций  $f_i(r)$ , которые удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$[\hat{\mathbf{H}}_0 + V(r)]\mathbf{f}(r) = E\mathbf{f}(r), \quad (5)$$

где гамильтониан однородного полупроводника записан в матричном виде:

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \begin{pmatrix} E_g - A_c \hat{K}_-^{(L)} & -iP_- \hat{K}_-^{L+1} & +iP_+ \hat{K}_+^{L-1} \\ -iP_- \hat{K}_+^{L+1} & -\gamma_+ \hat{K}_+^{L+1} & v_2 \hat{K}_+^{L-1} \\ -iP_+ \hat{K}_-^{L-1} & v_2 \hat{K}_-^{L+1} & \gamma_- \hat{K}_-^{L-1} \end{pmatrix}.$$

В данном выражении используются следующие обозначения:

$$\begin{aligned} P_+(J, L) &= P_{w_+}^{(J, L)}, \\ P_-(J, L) &= P_{w_-}^{(J, L)}, \\ \gamma_+(J, L) &= \gamma + v w^{(J, L)}, \\ \gamma_-(J, L) &= \gamma - v w^{(J, L)}, \\ v_2(J, L) &= v w_2^{(J, L)}, \\ \hat{K}_+^{(L)} &= -i \left( \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L}{r} \right), \\ \hat{K}_+^{(L)} &= i \left( \frac{\partial}{\partial r} + \frac{L+1}{r} \right), \\ \hat{K}_-^{(L)} &= \hat{K}_-^{(L+1)} \hat{K}_+^{(L)}, \\ \hat{K}_+^{(L)} &= \hat{K}_+^{(L+1)} \hat{K}_-^{(L)}, \\ \hat{K}_-^{(L)} &= \hat{K}_-^{(L-1)} \hat{K}_-^{(L)}, \\ w_+^{(J, J-1/2)} &= \sqrt{\frac{2J-1}{4J}}, \\ w_-^{(J, J-1/2)} &= \sqrt{\frac{2J+3}{12J}}, \\ w_+^{(J, J-1/2)} &= -\frac{2J-3}{4J}, \\ w_2^{(J, J-1/2)} &= \frac{\sqrt{3(2J-1)(2J+3)}}{4J}, \\ w_-^{(J, J+1/2)} &= \sqrt{\frac{2J+3}{4(J+1)}}, \\ w_+^{(J, J+1/2)} &= \sqrt{\frac{2J-1}{12(J+1)}}, \\ w_+^{(J, J+1/2)} &= \frac{2J+5}{4(J+1)}, \\ w_2^{(J, J+1/2)} &= \frac{\sqrt{3(2J-1)(2J+3)}}{4(J+1)}. \end{aligned}$$

В случае  $J \geq 3/2$  система из трех уравнений второго порядка (5) имеет шесть линейно независимых решений.

С помощью обобщенного метода Фробениуса [29] была найдена асимптотика этих решений при  $r \rightarrow 0$ , и для трех из них, которые не имеют особенности в начале координат, были получены начальные условия для функций  $f_i(r)$  и их производных. Уравнения решались численно методом Рунге–Кутты, в процессе решения с помощью метода стрельбы подбирались такая комбинация начальных условий, чтобы исключить экспоненциально растущие решения при  $r \rightarrow \infty$ . Полученные решения нормировались на  $\delta$ -функцию от энергии:

$$\begin{aligned} &\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty r^2 dr \Psi_{J, L, E}^*(r) \Psi_{J, L, E}(r) \\ &= \sum_{i=1}^3 \int_0^\infty r^2 dr [f_i^{(J, L, E)}(r)]^* f_i^{(J, L, E')}(r) = \delta(E - E'). \end{aligned}$$

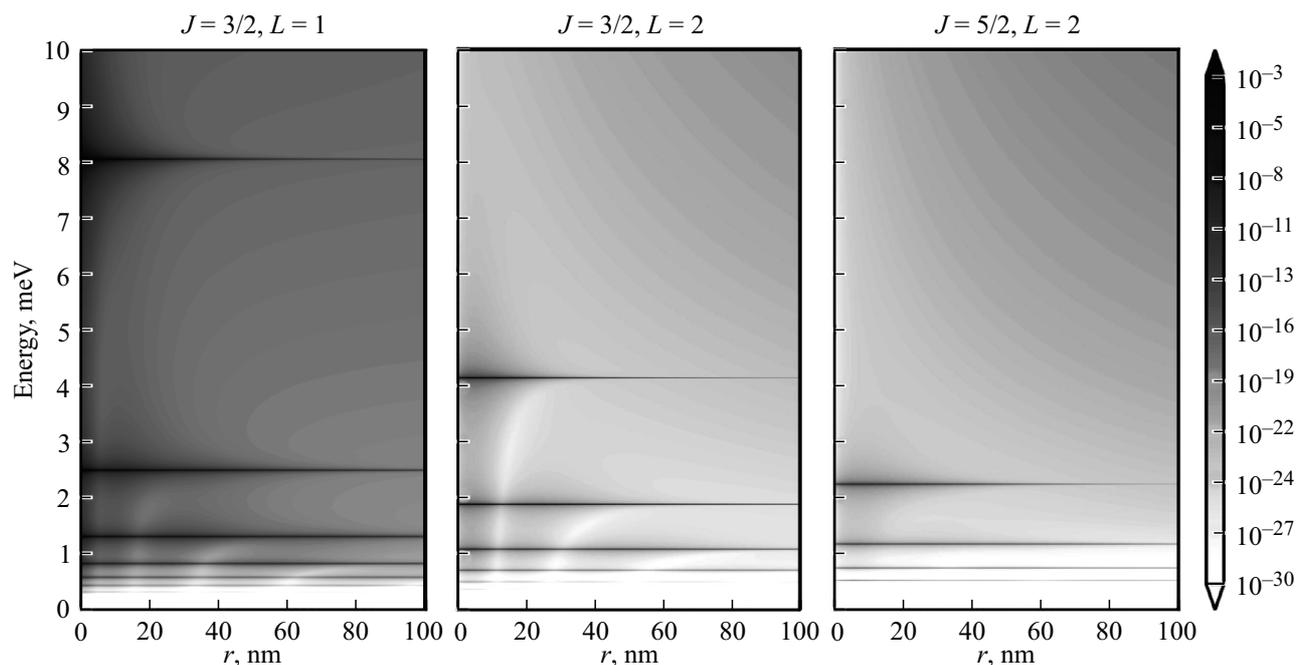
При  $J = 1/2$  решение системы (5) ищется аналогично, за исключением того, что в этом случае существует два линейно независимых решения без особенности в начале координат вместо трех.

### 3. Результаты и обсуждение

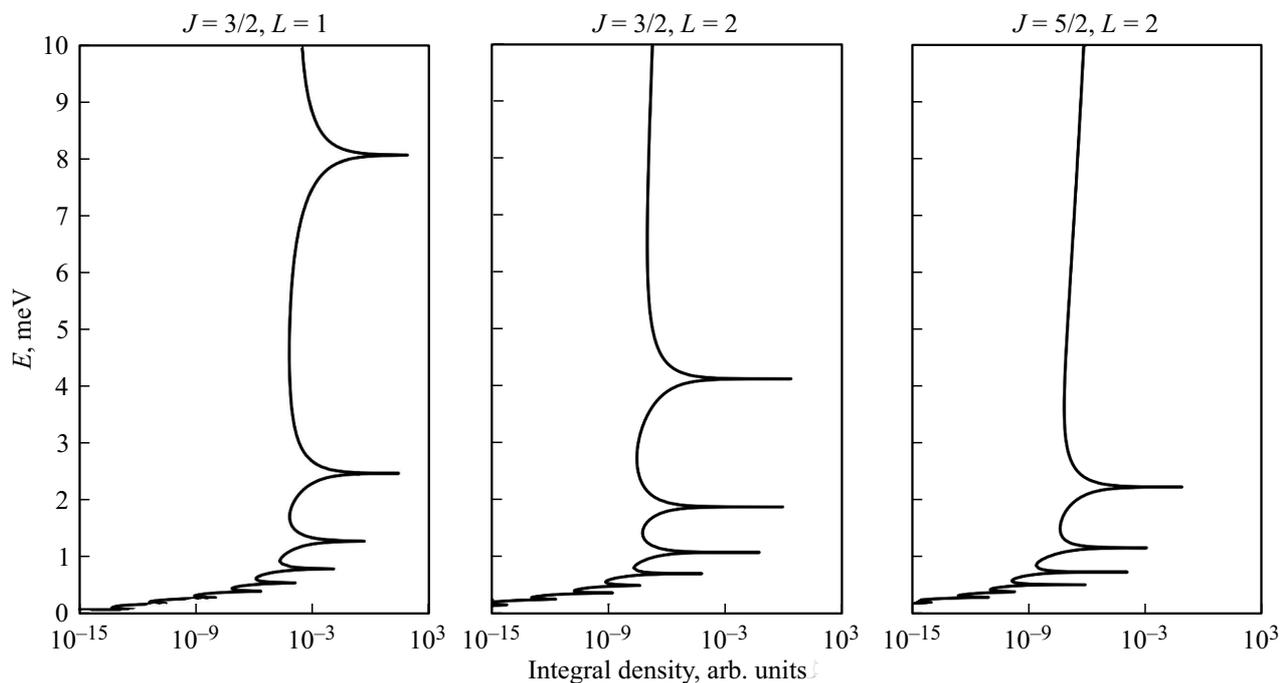
Особый интерес представляет случай бесщелевого полупроводника, в котором все состояния акцептора являются резонансными. В данной работе мы приводим результаты расчетов для такого соединения ( $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ,  $x = 0.1684$ ) со следующими параметрами материала, вычисленными на основе данных работ [27,30]:  $E_g = 0$  мэВ,  $\gamma = 139$  мэВ · нм<sup>2</sup>,  $A_c = 264$  мэВ · нм<sup>2</sup>,  $v = 60.9$  мэВ · нм<sup>2</sup>,  $P = 846$  мэВ · нм,  $e^2/\epsilon_0 = 75.7$  мэВ · нм.

Как было показано в работе [24], отношение энергий самых глубоких уровней акцептора с  $J = 3/2$  и  $J = 1/2$  быстро возрастает с увеличением отношения масс тяжелых и легких дырок. В случае узкозонного твердого раствора КРТ это означает, что с уменьшением ширины запрещенной зоны глубина состояний с  $J = 1/2$  будет уменьшаться вследствие уменьшения эффективной массы электронов и легких дырок вплоть до нуля. Следовательно, возникновение резонансных состояний в зоне проводимости возможно только при  $J \geq 3/2$ .

На рис. 1 представлены рассчитанные гистограммы плотности вероятности обнаружения электрона на различных расстояниях от дефекта при различных энергиях. Резонансные уровни хорошо видны как максимумы плотности состояний (темные полосы). При этом минимумы плотности вероятности, характерные для возбужденных уровней, наблюдаются как пересечения светлых и темных полос. Как и в дискретном спектре широкозонных образцов [22], самым глубоким является уровень с  $J = 3/2$ .



**Рис. 1.** Рассчитанная зависимость плотности вероятности обнаружения электрона в зоне проводимости от энергии и расстояния до акцептора. Расчеты выполнены для бесщелевого полупроводника  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  с  $x = 0.1684$ . Энергия отсчитывается от точки касания зон. Значение плотности вероятности усреднено по углам.



**Рис. 2.** Рассчитанная зависимость от энергии интегральной плотности вероятности обнаружения электрона на расстоянии не более 20 нм до акцептора. Расчеты выполнены для бесщелевого полупроводника  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ,  $x = 0.1684$ . Энергия отсчитывается от точки касания зон. Значение плотности вероятности усреднено по углам.

На рис. 2 приведены зависимости интегральной вероятности обнаружения электрона вблизи дефектного центра от энергии  $E$ . Видно, что в случае резонансных состояний вероятность обнаружения электрона вблизи дефекта на несколько порядков превос-

ходит таковую для обычных состояний непрерывного спектра. Этот график удобен для определения энергии резонансных состояний, причем здесь мы можем различить гораздо больше возбужденных уровней чем на рис. 1.

## 4. Заключение

Таким образом, нами разработан метод расчета волновых функций непрерывного спектра узкозонных твердых растворов  $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$  с учетом потенциала примеси. Полученные этим методом данные могут быть использованы для расчета матричных элементов межзонных переходов в таких структурах.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-72-00128).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] M. Orlita, K. Masztalerz, C. Faugeras, M. Potemski, E.G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **83**, 115307 (2011).
- [2] M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretiskii, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, W. Knap. *Phys. Rev. B*, **86**, 205420 (2012).
- [3] B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.C. Zhang. *Science*, **314**, 1757 (2006).
- [4] M. König, S. Wiedmann, C. Brune, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molenkamp, X.L. Qi, S.C. Zhang. *Science*, **318**, 766 (2007).
- [5] M. Orlita, D.M. Basko, M.S. Zholudev, F. Teppe, W. Knap, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, P. Neugebauer, C. Faugeras, A.-L. Barra, G. Martinez, M. Potemski. *Nature Phys.*, **10**, 233 (2014).
- [6] F. Teppe, M. Marcinkiewicz, S.S. Krishtopenko, S. Ruffenach, C. Consejo, A.M. Kadykov, W. Desrat, D. But, W. Knap, J. Ludwig, S. Moon, D. Smirnov, M. Orlita, Z. Jiang, S.V. Morozov, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii. *Nature Commun.*, **7**, 12576 (2016).
- [7] M.S. Zholudev, A.V. Ikonnikov, F. Teppe, M. Orlita, K.V. Maremyanin, K.E. Spirin, V.I. Gavrilenko, W. Knap, S.A. Dvoretiskii, N.N. Mikhailov. *Nanoscale Res. Lett.*, **7**, 534 (2012).
- [8] М.С. Жолудев, Ф. Теп, С.В. Морозов, М. Орлита, К. Консейо, С. Руфенах, В. Кнап, В.И. Гавриленко, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов. *Письма ЖЭТФ*, **100**, 895 (2015).
- [9] X.C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **63**, 245305 (2001).
- [10] Y.S. Gui, C.R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z.J. Qiu, E.G. Novik, M. Schäfer, X.Z. Shu, J.H. Chu, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **70**, 115328 (2004).
- [11] M.S. Zholudev, A.M. Kadykov, M.A. Fadeev, M. Marcinkiewicz, S. Ruffenach, C. Consejo, W. Knap, J. Torres, S.V. Morozov, V.I. Gavrilenko, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, F. Teppe. *Condens. Matter*, **4**, 27 (2019).
- [12] A. Rogalski. *Opto-Electron. Rev.*, **20**, 279 (2012).
- [13] S. Morozov, V. Romyantsev, M. Fadeev, M. Zholudev, K. Kudryavtsev, A. Antonov, A. Kadykov, A. Dubinov, N. Mikhailov, S. Dvoretiskii, V. Gavrilenko. *Appl. Phys. Lett.*, **111**, 192101 (2017).
- [14] N.N. Mikhailov, R.N. Smirnov, S.A. Dvoretiskii, Yu.G. Sidorov, V.A. Shvets, E.V. Spesivtsev, S.V. Rykhlytski. *Int. J. Nanotechnology*, **3**, 120 (2006).
- [15] S. Dvoretiskii, N. Mikhailov, Yu. Sidorov, V. Shvets, S. Danilov, B. Wittman, S. Ganichev. *J. Electron. Mater.*, **39**, 918 (2010).
- [16] A. Rogalski. *Rep. Prog. Phys.*, **68**, 2267 (2005).
- [17] S. Krishnamurthy, M.A. Berding, Z.G. Yu. *J. Electron. Mater.*, **35**, 1369 (2006).
- [18] В.В. Румянцев, А.В. Иконников, А.В. Антонов, С.В. Морозов, М.С. Жолудев, К.Е. Спиринов, В.И. Гавриленко, С.А. Дворецкий, Н.Н. Михайлов. *ФТП*, **47**, 1446 (2013).
- [19] V.V. Romyantsev, S.V. Morozov, A.V. Antonov, M.S. Zholudev, K.E. Kudryavtsev, V.I. Gavrilenko, S.A. Dvoretiskii, N.N. Mikhailov. *Semicond. Sci. Technol.*, **28**, 125007 (2013).
- [20] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, В.С. Варавин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Ф. Теппе. *ФТП*, **49**, 1654 (2015).
- [21] V.V. Romyantsev, D.V. Kozlov, S.V. Morozov, M.A. Fadeev, A.M. Kadykov, F. Teppe, V.S. Varavin, M.V. Yakushev, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretiskii, V.I. Gavrilenko. *Semicond. Sci. Technol.*, **32**, 095007 (2017).
- [22] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, С.В. Морозов, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, Н.-В. Хуберс, В.И. Гавриленко. *ФТП*, **52**, 1257 (2018).
- [23] Д.В. Козлов, В.В. Румянцев, А.М. Кадыков, М.А. Фадеев, Н.С. Куликов, В.В. Уточкин, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий, В.И. Гавриленко, Х.-В. Хюберс, Ф. Теппе, С.В. Морозов. *Письма ЖЭТФ*, **109**, 679 (2019).
- [24] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8**, 2697 (1973).
- [25] E.P. Pokatilov, V.A. Fonoberov, V.M. Fomin, J.T. Devreese. *Phys. Rev. B*, **64**, 245328 (2001).
- [26] J. M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.*, **97**, 869 (1955).
- [27] E.G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C.R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **72**, 035321 (2005).
- [28] Д.А. Варшавович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. *Квантовая теория углового момента* (Л., Наука, 1975).
- [29] M. Barkatou, T. Cluzeau, C. ElBacha. *Proc. Mathematical Theory of Networks, Systems* (Budapest, Hungary, July 2010) p. 1059.
- [30] F.-M. Tong, N.M. Ravindra. *Infrared Phys.*, **34**, 207 (1993).

Редактор Л.В. Шаронова

### Calculation of acceptor resonant states in narrow-gap CdHgTe compounds

M.S. Zholudev<sup>1,2</sup>, D.V. Kozlov<sup>1,2</sup>, N.S. Kulikov<sup>1,2</sup>, A.A. Razova<sup>1,2</sup>, V.I. Gavrilenko<sup>1,2</sup>, S.V. Morozov<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Institute for Physics of Microstructures, Russian Academy of Sciences, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

<sup>2</sup> Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** Wavefunctions of electron have been calculated for conduction band of narrow-gap HgCdTe alloy with Coulomb acceptor. Energies of resonant states have been estimated.