

# Свойства мелких $D^-$ -центров в полярных полупроводниках

© Н.И. Каширина, В.Д. Лахно<sup>¶</sup>, В.В. Сычев\*, М.К. Шейнкман

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,  
03028 Киев, Украина

\* Институт математических проблем биологии Российской академии наук,  
142290 Пущино, Россия

(Получена 4 июня 2002 г. Принята к печати 9 июля 2002 г.)

Проведено теоретическое рассмотрение энергии нижайших синглетного и триплетного термов мелких  $D^-$ -центров (два электрона, связанных с однозарядным кулоновским центром) в полупроводниках с ионной связью. Электрон-фононное взаимодействие описывается гамильтонианом Фрелиха. Энергия  $D^-$ -центра рассчитана с использованием метода канонических преобразований Буймистрова–Пекара для произвольной силы связи с фононами. Показано, что для всей области параметров электрон-фононного взаимодействия метод Буймистрова–Пекара дает наиболее низкие значения энергии основного состояния  $D^-$ -центров и свободного биполярона по сравнению с лучшими на сегодняшний день численными расчетами соответствующих величин, проводившихся в рамках прямых вариационных методов. Расчеты показали отсутствие как связанных метастабильных триплетных состояний, соответствующих нижайшему триплетному терму  $D^-$ -центра, так и биполярона для всей области параметров электрон-фононного взаимодействия, в полной аналогии с теоремой Хилла об отсутствии связанных возбужденных состояний иона  $H^-$ .

## 1. Введение

Двухэлектронные  $D^-$ -центры в полупроводниках (в Si и Ge [1–3], в GaAs, InP, InSb [4]) наблюдаются по изучению частотной зависимости фотопроводимости в далекой инфракрасной области частот. Атомарным аналогом рассматриваемой системы является отрицательный ион водорода  $H^-$  с энергией ионизации  $0.0555 Ry$ . В пренебрежении химическим сдвигом и электрон-фононным взаимодействием,  $D^-$ -центры в кристалле обладают той же энергией, но измеренной в эффективных ридбергах  $Ry^* = m^* e^4 / 2\epsilon_0^2 \hbar^2$  (где  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $\epsilon_0$  — статическая диэлектрическая проницаемость кристалла). Учет взаимодействия с фононами может привести к значительному повышению энергии связи двухэлектронной системы в кристалле по сравнению с величиной  $0.0555 Ry^*$  [5,6]. В щелочно-галлоидных кристаллах аналогом  $D^-$ -центра являются  $F'$ -центры [7].

В последнее время тематика, связанная с изучением энергетической структуры двухэлектронных систем, интенсивно распространяется на низкоразмерные системы, включая квантовые точки [8,9] и кластеры [10,11]. Работы ведутся как в экспериментальной области [12,13], так и в области теоретического изучения энергетических уровней квазидвумерных систем, аналогов  $D^-$ -центров [14–17] и биполяронов [18] в изотропных кристаллах. Отчасти это связано с тем, что в последние годы интерес к подобным системам значительно повысился в связи с развитием нанотехнологий и принципиальной возможностью создания квантовых компьютеров на электронном спиновом резонансе [19–21] и, в частности, в структурах Ge–Si [21].

В первых работах [7,22], посвященных расчету энергии подобных двухэлектронных образований, прене-

брегали электронными корреляциями, что значительно понижало величину энергии связи  $D^-$ -центра. Тем не менее метод Буймистрова–Пекара, предложенный в [22] для расчета энергии одноэлектронных и двухэлектронных состояний в кристаллах с произвольной силой связи электронной системы с фононами, является, как мы полагаем, одним из наиболее простых и эффективных методов расчета энергетического спектра электронных систем в твердом теле.

Данный метод, в связи со своей простотой, достаточно часто используется для расчета энергии конкретных систем, как одноэлектронных, так и двухэлектронных в кристаллах с произвольной силой связи электронов с фононами [5,23–25]. Тем не менее общепринято полагать, что метод Буймистрова–Пекара дает менее точные значения энергии двухэлектронных систем по сравнению с методом оптимизированного канонического преобразования, предложенного Адамовским [6] и дающего на сегодняшний день наиболее низкие значения энергии двухэлектронных систем (биполяронов и  $D^-$ -центров, или связанных биполяронов). Мы покажем, что при достаточно гибкой пробной электронной волновой функции (ВФ), учитывающей межэлектронные корреляции (прямая зависимость ВФ от расстояния между электронами), метод Буймистрова–Пекара дает для всей области параметров электрон-фононного взаимодействия более низкие значения, чем метод Адамовского. Последнее наряду с опробованной нами простой для аналитических выкладок системой функций делает возможным надежные численные расчеты в рамках данного метода энергии двухэлектронных систем ( $D^-$ -центров, биполяронов и обменно-связанных пар парамагнитных центров) в анизотропных кристаллах, а также в низкоразмерных системах для произвольной величины связи электронов с фононами. Ранее [26] данная система функций была опробована при расчете энергии биполярона

<sup>¶</sup> E-mail: lak@impb.psn.ru

в кристаллах с анизотропными эффективной массой и диэлектрической проницаемостью в условиях сильного электрон-фононного взаимодействия.

## 2. Основные соотношения

Далее будем использовать фейнмановскую систему единиц, в которой  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$  и  $2m^* = 1$ . Следовательно, единицей энергии служит  $\hbar\omega$ , а единицей длины  $L_0 = \sqrt{\hbar/2m^*\omega_0}$ . Гамильтониан  $D^-$ -центра (или связанного биполярона в трактовке [6]) имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} + \frac{\beta}{r_{12}} + \sum_{j=1}^2 \left[ -\nabla_j^2 - \frac{\gamma}{r_j} - \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}} \frac{1}{k} (a_{\mathbf{k}} - a_{-\mathbf{k}}^+) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \right], \quad (1)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{2\hbar\omega} \left( \frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \frac{1}{L_0}, \quad L_0 = \sqrt{\hbar/2m^*\omega_0},$$

$$\beta = \frac{e^2}{\hbar\omega\varepsilon_{\infty}L_0} = \frac{2\alpha}{1-\eta}, \quad \gamma = \frac{e^2}{\hbar\omega\varepsilon_0L_0} = \frac{2\alpha\eta}{1-\eta},$$

где  $\mathbf{r}_j$  — радиус-вектор  $j$ -го электрона с эффективной массой  $m^*$ ,  $r_{12}$  — расстояние между электронами. Мы предполагаем, что кулоновский заряд сосредоточен в начале координат. Влияние поляризации кристалла на кулоновское поле статического заряда учитывается введением статической диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_0$ . В оператор электрон-электронного взаимодействия входит высокочастотная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_{\infty}$ ,  $a_{\mathbf{k}}^+(a_{\mathbf{k}})$  — оператор рождения (уничтожения) продольного оптического фонона с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Предполагаем, что частота фононов не зависит от  $\mathbf{k}$  и равна  $\omega$ ,  $\alpha$  — безразмерная константа связи Фрелиха,  $V$  — объем кристалла.

### 2.1. Метод Буймистрова–Пекара в применении к двухэлектронным системам в полярных кристаллах с промежуточной электрон-фононной связью

В современном изложении метод Буймистрова–Пекара сводится к применению к гамильтониану (1) канонического преобразования  $\exp(\alpha S) H \exp(-\alpha S)$  с унитарным оператором

$$S = \sum_{\mathbf{k}} \left[ F_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a_{\mathbf{k}} - F_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) a_{\mathbf{k}}^+ \right],$$

где  $F_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  — некоторая функция координат электронной системы. Тогда справедливы следующие выражения:

$$\exp(S) a_{\mathbf{k}} \exp(S) \rightarrow a_{\mathbf{k}} + F_{\mathbf{k}}, \quad \exp(S) a_{\mathbf{k}}^+ \exp(S) \rightarrow a_{\mathbf{k}}^+ + F_{\mathbf{k}}^*.$$

После усреднения по фононным переменным получим следующий функционал:

$$H = \frac{\beta}{r_{12}} + \sum_{j=1}^2 \sum_{\mathbf{k}} \nabla_j F_{\mathbf{k}}^* \nabla_j F_{\mathbf{k}} + \sum_{j=1}^2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ -\nabla_j^2 - \frac{\gamma}{r_j} + V_{\mathbf{k}} [F_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + F_{\mathbf{k}}^* \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j)] \right\} + \sum_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}} F_{\mathbf{k}}^*. \quad (2)$$

Выражение (2) — исходное выражение для дальнейшей работы. Выберем функцию  $F_{\mathbf{k}}$  в виде

$$F_{\mathbf{k}} = C_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3)$$

где  $C_{\mathbf{k}}$ ,  $\gamma_{\mathbf{k}}$  — вариационные параметры.

Подставив (3) в (2) и проварьировав по  $C_{\mathbf{k}}$  и  $\gamma_{\mathbf{k}}$  (в отличие от метода Буймистрова–Пекара в [6] параметры  $C_{\mathbf{k}}$  и  $\gamma_{\mathbf{k}}$  выбираются в заданном аналитическом виде), получим следующее выражение для функционала основного состояния двухэлектронной системы:

$$E_{Bp} = J_S + J_i, \quad (4)$$

$$J_i = - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^2 \frac{\tilde{U}_{\mathbf{k}}^2}{2k^2 + U_{\mathbf{k}}\omega_{\mathbf{k}}}, \quad (5)$$

$$\tilde{U}_{\mathbf{k}} = \langle \Psi_{12} | f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) L_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle - \langle \Psi_{12} | f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle \langle \Psi_{12} | L_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle, \quad (6)$$

$$L_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_1) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_2), \quad (7)$$

$$U_{\mathbf{k}} = \langle \Psi_{12} | f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle - \langle \Psi_{12} | f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle \langle \Psi_{12} | f_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \Psi_{12} \rangle, \quad (8)$$

где  $J_i$  — добавка, появившаяся для промежуточной связи, а  $J_S$  соответствует функционалу  $D^-$ -центра в пределе сильного электрон-фононного взаимодействия

$$J_S = \bar{T}_{12} + \beta \bar{V}_{ee} - \gamma \bar{V}_e + \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^2 | \langle \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_1) + \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_2) \rangle |^2, \quad (9)$$

$$\bar{T}_{12} = - \int \Psi_{12} (\Delta_1 + \Delta_2) \Psi_{12} d\boldsymbol{\tau}, \quad (10)$$

$$\bar{V}_{ee} = \int \frac{|\Psi_{12}|^2}{r_{12}} d\boldsymbol{\tau}, \quad (11)$$

$$\bar{V}_e = \int \frac{|\Psi_{12}|^2}{r_1} d\boldsymbol{\tau} + \int \frac{|\Psi_{12}|^2}{r_2} d\boldsymbol{\tau}. \quad (12)$$

## 2.2. Функционал основного состояния двухэлектронной системы

Выбирая  $f_k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = L_k^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  и, следовательно,  $\tilde{U}_k = U_k$ , получим

$$J_i = - \sum_{\mathbf{k}} V_k^2 \frac{U_k^2}{2k^2 + U_k \omega_k}. \quad (13)$$

В частном случае отсутствия электронных корреляций, когда ВФ электронной системы записываются в виде произведения одноэлектронных ВФ  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)$ , выражение (13) дает

$$J_i = - \sum_{j=1}^2 \sum_{\mathbf{k}} V_k^2 \frac{[1 - F_k^2(\mathbf{r}_j)]^2}{k^2 + [1 - F_k^2(\mathbf{r}_j)]\omega_k}, \quad (14)$$

где

$$F_k(\mathbf{r}_j) = \int \psi(\mathbf{r}_j) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \psi^*(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j.$$

Подставив (14) в выражение (4), получим функционал, совпадающий с формулой (18) работы Буймишрова и Пекара [22].

При более общем выборе ВФ (немультимпликативная форма, соответствующая учету электронных корреляций) следует пользоваться более общим функционалом, в котором добавка, соответствующая промежуточной связи  $J_i$ , определяется выражением (13).

В недавней работе [27], посвященной двухцентровому биполярону промежуточной связи, электронная ВФ выбиралась в виде симметризованного произведения поляронных функций, центрированных в различных точках, т.е. в немультимпликативной форме (метод Гайтлера–Лондона в применении к биполярону). При этом для варьирования использовался функционал с добавкой  $J_i$ , определявшейся (14), справедливый только для частного случая, когда ВФ двухэлектронной системы выбраны в виде произведения одноэлектронных ВФ. Последнее, естественно, привело автора работы [27] к варьированию неправильного функционала и ошибочным численным расчетам. Правильные выражения для расчета энергии биполярона методом Буймишрова–Пекара приведены в [24], однако пробная функция, выбранная в [24] для всей области параметров электрон-фононного взаимодействия, давала более высокие значения энергии биполярона по сравнению с результатами работы [28].

## 3. Численные расчеты

Выберем двухэлектронную ВФ в виде линейной комбинации гауссовых орбиталей:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{N_{12}}} \sum_{i=1}^N C_i [1 + (-1)^S P_{12}] \times \exp(-a_{1i}r_1^2 - 2a_{2i}\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2 - a_{3i}r_2^2), \quad (15)$$

где  $P_{12}$  — оператор перестановки электронных координат, показатель  $S = 0$  и  $S = 1$  для синглетного и

триплетного состояний двухэлектронной системы соответственно. ВФ полярона и  $F$ -центра выбирается в виде

$$\Psi_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^n C_i \exp(-a_i r^2), \quad (16)$$

где  $C_i, a_i, a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}$  — вариационные параметры,  $\mathbf{r}$  — координаты электрона в поляроне,  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$  — координаты первого и второго электрона в биполяроне соответственно,  $N_{12}, N_1$  — нормировочные множители.

В пределе  $\eta \rightarrow 0$  ( $\eta = \varepsilon_\infty/\varepsilon_0$ , где  $\varepsilon_\infty$  и  $\varepsilon_0$  — высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости соответственно) связь электронов с кулоновским ядром ослабевает и  $D^-$ -центр становится эквивалентен одноцентровому биполярону, или биполярону Пекара. Одноцентровая конфигурация биполярона может рассматриваться как простейшая двухэлектронная система в кристалле. В то же время функционал данной системы включает в себя наиболее сложную часть, описывающую нелокальное взаимодействие двухэлектронной системы с фононным полем. С этой точки зрения добавление взаимодействия с полем статического заряда лишь незначительно усложняет численные расчеты энергетического спектра связанного биполярона или  $D^-$ -центра.

В табл. 1 приведены значения энергии биполярона  $E_{Bp}$ , рассчитанные с использованием системы гауссовых функций (15) ( $S = 0$ ). Для всей области существования биполярона метод Буймишрова–Пекара дает наиболее низкие значения энергии основного состояния свободного биполярона и наиболее широкую область существования связанного биполярона по сравнению с наилучшими численными расчетами данных величин, проведенными прямыми вариационными методами [28]. В табл. 1 для сравнения приведены также численные расчеты данной величины  $E_{Bp}^A$ , выполненные в [28]. Количество слагаемых в ВФ (15) для расчета энергии биполярона  $N = 5$ .

При рассмотрении связанного биполярона в системе появляется дополнительный параметр, описывающий взаимодействие электронов с полем статического заряда. Выразим энергию  $D^-$ -центра как функцию двух безразмерных параметров — константы электрон-фононного взаимодействия Фрелиха  $\alpha = e^2/(2r_0\hbar\omega)\tilde{\varepsilon}$  (где  $1/\tilde{\varepsilon} = 1/\varepsilon_\infty - 1/\varepsilon_0$ ,  $r_0 = \sqrt{\hbar/2m^*\omega}$ ,  $\hbar\omega$  — частота длинноволновых продольных оптических фононов,  $m^*$  — эффективная масса электрона) и отношения эффективного ридберга к  $\hbar\omega$ :

$$R = m^*e^4/2\varepsilon_0^2\hbar^3\omega = (e^2/2r_0\hbar\omega\varepsilon_0)^2.$$

В табл. 2 приведены в качестве примера рассчитанные нами величины энергии основного состояния центров  $D^-$  ( $S = 0$ ) и  $D^0 - E^-$  и  $E^0$  соответственно для ряда кристаллов. Энергия связи обозначена как  $E_B$ . Все энергии выражены в единицах  $\hbar\omega$ . Верхними индексами L и A обозначены значения соответствующих величин,

**Таблица 1.** Энергия основного состояния свободного биполярона для различных значений параметра  $\alpha$ 

$\eta$	$\alpha$							
	6		7		9		20	
	$E_{Bp}$	$E_{Bp}^A$	$E_{Bp}$	$E_{Bp}^A$	$E_{Bp}$	$E_{Bp}^A$	$E_{Bp}$	$E_{Bp}^A$
0	-12.703	-12.601	-16.234	-16.067	-24.927	-24.652	-111.928	-110.504
0.01	-12.595	-12.487	-16.053	-15.91	-24.650	-24.354	-110.497	-109.064
0.1			-14.598	-14.500	-22.068	-21.756	-96.878	-95.335

Примечание. Значения  $E_{Bp}^A$  из работы [28].

**Таблица 2.** Энергия основного состояния  $D^-$ -центра (связанного биполярона) в единицах  $\hbar\omega$ 

Кристалл	$\alpha$	$R$	$\hbar\omega$ , мэВ	$E^-$	$E_0$	$E_B^-$	$E_B^0$	$E_B^-/E_B^0$
CdTe	0.272	0.657	21.08	-1.266	-0.965	0.029	0.693	0.042
CdS	0.529	0.783	38.0	-1.931	-1.363	0.039	0.834	0.047
ZnSe	0.45	0.924	31.4	-1.926	-1.428	0.048	0.978	0.049
AgBr	1.64	1.68	15.4	-5.656	-3.818	0.198	2.178	0.091
				-5.637 <sup>L</sup>	-3.817 <sup>L</sup>	0.180 <sup>L</sup>	2.177 <sup>L</sup>	0.083 <sup>L</sup>
AgCl	1.9	1.90	24.4	-6.668	-4.483	0.285	2.583	0.110
				-6.643 <sup>L</sup>	-4.482 <sup>L</sup>	0.261 <sup>L</sup>	2.582 <sup>L</sup>	0.101 <sup>L</sup>
CdF <sub>2</sub>	2.53	1.274	50.0	-6.662 <sup>A</sup>		0.202 <sup>A</sup>	2.560 <sup>A</sup>	0.078 <sup>A</sup>
				-7.357	-4.510	0.317	1.98	0.016

Примечание. Верхними индексами L обозначены результаты расчета из работы [5], индексами A — из работы [6].

полученные в работах [5] и [6] соответственно. Количество слагаемых в ВФ (15) и (16), использовавшихся для расчета энергии  $D^-$ - и  $D^0$ -центров, равно 12.

Для определения гибкости используемых нами функций при расчетах энергии двухэлектронных систем мы вычисляли с их помощью значения энергии основного состояния отрицательного иона водорода  $H^-$  (данная атомная система является наиболее близким аналогом биполярона в атомной физике). Соответствующая энергия составила  $-1.055470$  [ $N = 28$  в (15)] по сравнению с точным значением  $-1.055502$  [29].

Отдельного рассмотрения заслуживает вопрос о возможности формирования метастабильных триплетных состояний  $D^-$ -центров. Особую важность данный вопрос приобретает в связи с тем, что отсутствие связанных триплетных состояний  $D^-$ -центров (подобно отсутствию связанных возбужденных состояний иона  $H^-$  [30]) является одним из принципиальных условий для реализации способа детектирования спинового состояния двухэлектронной системы в квантовых компьютерах, работающих на электронном спиновом резонансе [21]. Приложенная в [21] схема кратко может быть описана следующим образом: приложение электрического поля вдоль линии, соединяющей обменно-связанную пару мелких парамагнитных центров, которая находится в синглетном состоянии, может привести к контролируемому переносу заряда на один из кулоновских центров и образованию  $D^-$ -центра. В триплетном состоянии подобное объединение невозможно.

Доноры остаются нейтральными, и перенос заряда между центрами отсутствует. Последнее и делает наблюдаемым спиновое состояние двухэлектронной системы.

Вариационные расчеты с использованием системы функций (15) для  $S = 1$  показали, что для всей области параметров электрон-фононного взаимодействия, включая область предельно сильной связи ( $\alpha > 20$ ), выполняется соотношение  $E_p + E_D \leq E_{Dt}$ , где  $E_p$ ,  $E_D$ ,  $E_{Dt}$  — энергия полярона, нейтрального донора и  $D^-$ -центра в триплетном состоянии соответственно. Таким образом, в континуальном приближении электрон-фононное взаимодействие не приводит к образованию метастабильного триплетного состояния  $D^-$ -центра, в полной аналогии с теоремой об отсутствии связанных возбужденных состояний отрицательного иона водорода  $H^-$  [30]. Связанное состояние триплетного биполярона, образованного в результате взаимодействия с оптическими фононами, как показали наши расчеты, также энергетически невыгодно. Проведенные нами контрольные расчеты энергии ортогогелия с использованием системы функций (15) для  $S = 1$  привели к полному воспроизведению экспериментального значения энергии ортогогелия.

Обратим внимание на то, что включение в рассмотрение внешнего магнитного поля приводит к появлению вышележащих возбужденных состояний  $D^-$ -центра [31]. Расчеты триплетных состояний  $D^-$ -центра в сферических квантовых точках исследовались в [8].

## 4. Заключение

Выбранная нами система гауссовых функций в сочетании с методом расчета Буймистрова–Пекара дает наиболее низкие значения энергии  $D^-$ -центров и позволяет выполнять расчеты энергетического спектра более сложных двухэлектронных систем, таких как обменно-связанные пары парамагнитных центров, а также получить надежные значения энергии основного состояния парамагнитных центров и их комплексов в анизотропных кристаллах и системах с пониженной размерностью.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-07-90317).

## Список литературы

- [1] S. Narita. J. Phys. Soc. Jap., **49**, 173 (1980).
- [2] P.J. Dean, J.R. Hayes, W.F. Flood. Phys. Rev., **161**, 711 (1967).
- [3] P. Gross, M. Gienger, K. Lassmann. Jap. J. Appl. Phys., pt. 1, **26**, 673 (1987).
- [4] C.J. Armistead, S.P. Najda, R.A. Stradling. Sol. St. Commun., **53**, 1109 (1985).
- [5] D.M. Larsen. Phys. Rev. B, **39**, 13 061 (1989).
- [6] J. Adamowski. Phys. Rev. B, **39**, 13 061 (1989).
- [7] С.И. Пекар. *Исследования по электронной теории кристаллов* (М.; Л., ГИТТЛ, 1951).
- [8] B. Szafran, B. Stebe, J. Adamowski, S. Bednarek. Phys. Rev. B, **60**, 15 558 (1999).
- [9] B. Szafran, J. Adamowski, B. Stebe. J. Phys.: Condens. Matter, **10**, 7575 (1998).
- [10] В.Д. Лахно. Изв. РАН. Сер. физ., **60**, 65 (1996).
- [11] В.Д. Лахно. Изв. РАН. Сер. физ., **62**, 1091 (1998).
- [12] S. Holmes, J.P. Cheng, B.D. McCombe, W. Schaff. Phys. Rev. Lett., **69**, 2571 (1992).
- [13] Z.X. Jiang, B.D. McCombe, J.-L. Zhu, W. Schaff. Phys. Rev. B, **56**, R1692 (1997).
- [14] D.M. Larsen, S.Y. McCann. Phys. Rev. B, **45**, 3485 (1992).
- [15] J.M. Shi, F.M. Peeters, J.T. Devreese. Phys. Rev. B, **51**, 7714 (1995).
- [16] I.K. Marmorkos, V.A. Schweigert, F.M. Peeters. Phys. Rev. B, **55**, 5065 (1997).
- [17] J.M. Shi, F.M. Peeters, G.A. Farias, J.A.K. Freine, G.O. Hai, J.T. Devreese, S. Bednarek, J. Adamowski. Phys. Rev. B, **57**, 3900 (1998).
- [18] S. Mukhopadhyay, A. Chatterjee. J. Phys.: Condens. Matter, **8**, 4017 (1996).
- [19] A. Barenco, D. Deutsch, A. Ekert. Phys. Rev. Lett., **74**, 4083 (1995).
- [20] D. Loss, D.P. DiVincenzo. Phys. Rev. A, **57**, 120 (1998).
- [21] R. Vrijen, E. Yablonovitch, K. Wang, H.W. Jiang, A. Balandin, V. Roychowdhury, T. Mor, D.P. DiVincenzo. Phys. Rev. A, **62**, 012 306 (2000).
- [22] В.М. Буймистров, С.И. Пекар. ЖЭТФ, **32** (5), 1193 (1957).
- [23] R.S. Brandt, F.C. Brown. Phys. Rev., **181**, 1241 (1969).
- [24] П.Ж. Баймагов, Д.Ч. Хужакулов, Х.Т. Шарипов. ФТТ, **39**, 284 (1997).
- [25] S.A. McGill, K. Cao, W.B. Fowler, G.G. DeLeo. Phys. Rev. B, **57**, 8951 (1998).
- [26] Н.И. Каширина, Е.М. Моздор, Э.А. Пашицкий, В.И. Шека. Изв. РАН. Сер. физ., **52** (8), 127 (1995).
- [27] В.К. Мухоморов. Опт. и спектр., **86** (1), 50 (1999).
- [28] J. Adamowski, S. Bednarek. J. Phys.: Condens. Matter., **4**, 2845 (1992).
- [29] A.J. Thakkar, V.H. Smith, jr. Phys. Rev. A, **15**, 1 (1977).
- [30] R.N. Hill. Phys. Rev. Lett., **38**, 643 (1977).
- [31] D.M. Larsen. Phys. Rev. B, **20**, 5217 (1979).

Редактор Т.А. Полянская

## Properties of shallow $D^-$ -centers in a polar semiconductor

N.I. Kashirina, V.D. Lakhno\*, V.V. Sychev\*, M.K. Sheinkman

Institute of Semiconductor Physics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
03028 Kiev, Ukraine

\* Institute of Mathematical Problems of Biology,  
Russian Academy of Sciences,  
142290 Pushchino, Russia