ЖЭТФ, 2002, том 121, вып. 3, стр. 692–702

РЕЗОНАНСНЫЕ АКЦЕПТОРНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ОДНООСНО-ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

М. А. Одноблюдов [a,b], **А. А. Прокофьев** [*b], **И. Н. Яссиевич** [b]

[a] *Division of Solid State Theory, Department of Physics, Lund University SE-223 62 Lund, Sweden*

[b] *Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук 194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 12 июля 2001 г.

Предложен новый подход к расчету параметров резонансных состояний, позволяющий находить также вероятности резонансного рассеяния и вероятности захвата на резонансное состояние. Он основан на использовании метода конфигурационного взаимодействия, впервые предложенного Фано для рассмотрения автоионизации атома гелия. Для состояний континуума и затравочного локального состояния используются, следуя Фано, два разных гамильтониана нулевого приближения. Волновые функции строятся, следуя Дираку, как это принято в общей теории рассеяния. Детальное рассмотрение и конкретные расчеты выполнены для акцепторных резонансных состояний в одноосно-деформированном германии при давлении вдоль осей [001] и [111].

PACS: 71.22.+i

1. ВВЕДЕНИЕ

Квазистационарные (резонансные) состояния представляют собой достаточно хорошо изученные объекты в атомной физике. Полупроводники оказались еще одной системой, в которой квазистационарные состояния играют существенную роль в физических процессах. Резонансные состояния возникают, например, при легировании мелкой акцепторной примесью бесщелевых полупроводников [1, 2] или в спектре двумерных дырок при энергиях, превышающих глубину ямы [3]. Особый интерес вызывают резонансные состояния, наводимые мелкой акцепторной примесью в одноосно-деформированном германии, в связи с генерацией излучения в ТГц-диапазоне [4–6].

В полупроводниках со структурой цинковой обманки (арсенид галлия, германий, кремний) вершина валентной зоны четырехкратно вырождена, соответственно также вырождено и основное акцепторное состояние (см., например, [7]). При деформации вершина валентной зоны расщепляется на две двукратно вырожденные подзоны, при этом снимается четырехкратное вырождение акцепторных уровней. В пределе достаточно больших давлений одна серия уровней попадает в сплошной спектр и формирует резонансные состояния. В этой ситуации становятся возможными эффективные оптические переходы между резонансными и локальными состояниями одной и той же примеси. В электрических полях выше порога примесного пробоя практически все дырки оказываются в валентной зоне. В этих условиях за счет заселения резонансных состояний возможно формирование внутрицентровой инверсии, которая и является основой для генерации излучения в ТГц-диапазоне [8, 9].

Поэтому актуальной задачей является нахождение функции распределения дырок в деформированном p-Ge во внешних электрических полях с учетом резонансного рассеяния, а также вопрос о вычислении заселенности резонансных состояний. Для это-

*E-mail: lxpro@pop.ioffe.rssi.ru

го требуется разработка метода, позволяющего не только находить положение и ширину резонанса, но и вычислять вероятности захвата и выброса на резонансный уровень. Именно такой метод предлагается в настоящей работе и демонстрируется на примере акцепторных резонансных состояний в деформированном p-Ge.

Резонансные акцепторные состояния в деформированных полупроводниках изучались в рамках модели потенциала нулевого радиуса [10], а для кулоновского потенциала с использованием подхода Дирака [11]. Численный метод рассмотрения резонансных состояний, основанный на дискретизации непрерывного спектра, был использован в работе [12]. Применение метода Дирака требует выделения гамильтониана нулевого приближения, в котором можно получить затравочные локальные состояния на фоне сплошного спектра [13], что обычно трудно сделать непосредственно. В работе [11] в качестве гамильтониана нулевого приближения использовалась диагональная часть гамильтониана Латтинжера, а его недиагональная часть рассматривалась как возмущение, приводящее к распаду локальных состояний. Однако такой подход хорош для локальных состояний, обусловленных отщепившейся зоной, но для непрерывного спектра справедлив только при малых квазиимпульсах.

В данной работе предложен новый метод для расчета как параметров резонансных состояний, так и вероятности резонансного рассеяния и вероятности захвата на резонансное состояние. Он основан на использовании метода конфигурационного взаимодействия, впервые предложенного Фано для рассмотрения автоионизации атома гелия [14]. Для состояний континуума и затравочного локального состояния применяются, следуя Фано, два разных гамильтониана нулевого приближения. А волновые функции строятся, как это принято в общей теории рассеяния, следуя Дираку. Детальное рассмотрение и конкретные расчеты выполнены для акцепторных резонансных состояний в одноосно-деформированном германии при давлении вдоль осей [001] и [111].

В разд. 2 излагается общий подход на примере сферического приближения для гамильтониана Латтинжера и обобщение на случай цилиндрического приближения при деформации вдоль оси [001]. В разд. 3 приводятся результаты расчета для вероятностей упругого рассеяния и захвата на резонансное акцепторное состояние в p-Ge при деформации вдоль оси [001]. В разд. 4 приведено обобщение на случай деформации вдоль оси [111].

2. ПРИБЛИЖЕНИЕ КОНФИГУРАЦИОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ АКЦЕПТОРНЫХ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ

Гамильтониан Латтинжера полупроводника кубической симметрии имеет вид

$$\hat{H}_L(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\begin{bmatrix} \hat{a}_+ & \hat{b} & \hat{c} & 0 \\ \hat{b}^* & \hat{a}_- & 0 & \hat{c} \\ \hat{c}^* & 0 & \hat{a}_- & -\hat{b} \\ 0 & \hat{c}^* & -\hat{b}^* & \hat{a}_+ \end{bmatrix}, \qquad (1)$$

где матричные элементы

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ &= -(\gamma_1 - 2\gamma_2)\hat{k}_z^2 - (\gamma_1+\gamma_2)(\hat{k}_x^2+\hat{k}_y^2), \\ \hat{a}_- &= -(\gamma_1 + 2\gamma_2)\hat{k}_z^2 - (\gamma_1-\gamma_2)(\hat{k}_x^2+\hat{k}_y^2), \\ \hat{b} &= 2\sqrt{3}\gamma_3(\hat{k}_x - i\hat{k}_y)\hat{k}_z, \\ \hat{c} &= \sqrt{3}\gamma_2(\hat{k}_x^2-\hat{k}_y^2) - i\gamma_3 2\sqrt{3}\hat{k}_x\hat{k}_y. \end{aligned} \qquad (2)$$

Здесь операторы $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$, а кинетическая энергия дырок считается положительной. Гамильтониан (1) выписан в базисе блоховских функций:

$$\begin{aligned} u_{+3/2} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(X+\mathrm{i}Y)\uparrow, \\ u_{-3/2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X-\mathrm{i}Y)\downarrow, \\ u_{+1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}}[-(X+\mathrm{i}Y)\downarrow +2Z\uparrow], \\ u_{-1/2} &= \frac{1}{\sqrt{6}}[(X-\mathrm{i}Y)\uparrow +2Z\downarrow]. \end{aligned} \qquad (3)$$

При наличии деформации гамильтониан получает добавку H_ε, которая зависит от компонент тензора деформации ε_{ij} аналогично тому, как H_L зависит от произведений k_ik_j:

$$\hat{H}_\varepsilon = \begin{bmatrix} \hat{p}_+ & \hat{s} & \hat{r} & 0 \\ \hat{s}^* & \hat{p}_- & 0 & \hat{r} \\ \hat{r}^* & 0 & \hat{p}_- & -\hat{s} \\ 0 & \hat{r}^* & -\hat{s}^* & \hat{p}_+ \end{bmatrix}, \qquad (4)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{p}_+ &= (a+b)\varepsilon_{zz} + (a-0.5b)(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}), \\ \hat{p}_- &= (a-b)\varepsilon_{zz} + (a+0.5b)(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}), \\ \hat{s} &= \sqrt{3}d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}), \\ \hat{r} &= 0.5\sqrt{3}b(\varepsilon_{xx}-\varepsilon_{yy}) - i0.5\sqrt{3}d\varepsilon_{xy}, \end{aligned} \qquad (5)$$

а a, b, d — деформационные потенциалы. В присутствии кулоновского акцепторного центра полный гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_L(\mathbf{k}) + \hat{H}_\varepsilon - \hat{V}_c(\mathbf{r}), \qquad (6)$$

где

$$\hat{V}_c(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\kappa \mathbf{r}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad (7)$$

e — заряд электрона, а κ — диэлектрическая константа.

Изложим приложение метода конфигурационного взаимодействия к задаче о рассеянии и захвате в резонансное акцепторное состояние в деформированном полупроводнике, используя сферическое приближение для гамильтониана Латтинжера. В этом приближении γ_2 и γ_3 заменяются на $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$ и матричные элементы гамильтониана $\hat{H}_L$ принимают вид

$$\begin{aligned} \hat{a}_+ &= -(\gamma_1 - 2\gamma)\hat{k}_z^2 - (\gamma_1 + \gamma)(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2), \\ \hat{a}_- &= -(\gamma_1 + 2\gamma)\hat{k}_z^2 - (\gamma_1 - \gamma)(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2), \\ \hat{b} &= 2\sqrt{3}\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y)\hat{k}_z, \\ \hat{c} &= \sqrt{3}\gamma(\hat{k}_x - i\hat{k}_y)^2. \end{aligned} \qquad (8)$$

Пусть давление приложено вдоль оси [001]. Тогда тензор деформации имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = S_{12}P, \\ \varepsilon_{zz} &= S_{11}P, \\ \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zy} = 0, \end{aligned} \qquad (9)$$

где S_{ij} — компоненты тензора упругих модулей, P — давление. В этом случае отличны от нуля только диагональные компоненты гамильтониана $\hat{H}_\varepsilon$. Исключая из рассмотрения члены вида $a\mathrm{Tr}\,\hat{\varepsilon}$, описывающие сдвиг вершины валентной зоны, гамильтониан $\hat{H}_\varepsilon$ удобно записать в виде

$$\hat{H}_\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} \zeta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\zeta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\zeta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \zeta \end{bmatrix}, \qquad (10)$$

где параметр ζ связан с компонентами тензора деформации и деформационным потенциалом b соотношениями

$$\frac{\hbar^2\zeta}{2m_0} = b(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}) = b(S_{11} - S_{12})P. \qquad (11)$$

Одноосная деформация по оси [001] приводит к расщеплению четырехкратно вырожденной вершины валентной зоны на два двукратно вырожденных уровня, разделенных энергетическим зазором:

$$E_{def} = 2\frac{\hbar^2\zeta}{2m_0} = \alpha P, \qquad (12)$$

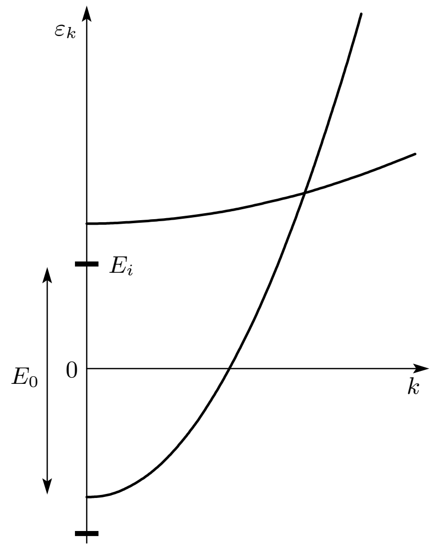

Рис. 1. Валентная зона сжатого Ge в направлении деформации. Указаны акцепторные уровни

где $\alpha = 2b(S_{11} - S_{12})$, (для германия, сжатого вдоль оси [001], $\alpha = 6$ мэВ/кбар).

Энергетический спектр при этом состоит из двух подзон, состояния в которых будем характеризовать значениями проекций полного момента M в точке Γ, и определяется формулами

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\gamma_1 k^2 \pm \sqrt{\zeta^2 - 2\gamma\zeta\,(3k_z^2 - k^2) + 4\gamma^2 k^4}\right]. \quad (13)$$

Здесь знак «+» относится к верхней подзоне ($M = \pm 3/2$), а «−» — к нижней ($M = \pm 1/2$), см. рис. 1.

Аналогично расщепляется и четырехкратно вырожденное основное акцепторное состояние. При достаточно большом давлении двукратно вырожденное состояние, соответствующее верхней подзоне ($M = \pm 3/2$), оказывается в области сплошного спектра нижней подзоны, в результате чего происходит гибридизация их волновых функций и формируется резонансное состояние.

Для нахождения затравочного локального состояния $\varphi^{\pm 3/2}$ используем в качестве нулевого приближения диагональную часть полного гамильтониана (6). Такое приближение вполне оправдано при малых k ($k^2 \ll \zeta$), т. е. в пределе, когда E_{def} больше энергии связи E_A.

Соответствующие волновые функции затравочного двукратно вырожденного локального состояния находятся вариационным методом и могут быть представлены в базисе (3) в виде [15]

$$\varphi^{3/2}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \varphi(\mathbf{r}), \qquad \varphi^{-3/2}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \varphi(\mathbf{r}), \tag{14}$$

где

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2 b}} \exp\left(-\sqrt{\frac{\rho^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}}\right), \tag{15}$$

а вариационные параметры a и b связаны с энергией связи уровня E_A, отсчитанной от дна верхней подзоны (см. [15]).

В случае германия решение соответствующей вариационной задачи дает $a = 114$ Å, $b = 61.8$ Å, $E_A = 4.68$ мэВ.

В качестве начального приближения для волновых функций непрерывного спектра выберем собственные функции свободного гамильтониана Латтинжера с учетом давления:

$$\left[\hat{H}_L + \hat{H}_\varepsilon\right] \psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}, \tag{16}$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^{1/2} = \frac{1}{N_l(\mathbf{k})} \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\sqrt{V}} \begin{bmatrix} -b \\ d_+ \\ 0 \\ -c^* \end{bmatrix}, \qquad \psi_{\mathbf{k}}^{-1/2} = \frac{1}{N_l(\mathbf{k})} \frac{e^{i\mathbf{kr}}}{\sqrt{V}} \begin{bmatrix} -c \\ 0 \\ d_+ \\ b^* \end{bmatrix}, \tag{17}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \times \left[\gamma_1 k^2 - \sqrt{\zeta^2 - 2\gamma\zeta\left(3k_z^2 - k^2\right) + 4\gamma^2 k^4}\right], \tag{18}$$

$$\begin{aligned} b &= 2\sqrt{3}\gamma(k_x - ik_y)k_z, \\ c &= \sqrt{3}\gamma(k_x - ik_y)^2, \\ d_+ &= a_+ + \frac{2m\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\hbar^2}, \\ N_l^2(\mathbf{k}) &= |b(\mathbf{k})|^2 + |c(\mathbf{k})|^2 + d^2(\mathbf{k}). \end{aligned} \tag{19}$$

Следуя Дираку [13], будем искать решение уравнения Шредингера с полным гамильтонианом

$$\hat{H}\Psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2} = E_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}, \tag{20}$$

как это принято в общей теории рассеяния, в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}}^{1/2} = \psi_{\mathbf{k}}^{1/2} + a_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2}\varphi^{3/2}(\mathbf{r}) + a_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2}\varphi^{-3/2}(\mathbf{r}) + \\ + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,1/2}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\gamma} \psi_{\mathbf{k}'}^{1/2} + \\ + \sum_{\mathbf{k}'} \frac{t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,-1/2}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\gamma} \psi_{\mathbf{k}'}^{-1/2}. \end{aligned} \tag{21}$$

Здесь мы пренебрегаем влиянием потенциала одной примеси на состояния сплошного спектра: $E_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$. Волновая функция $\Psi_{\mathbf{k}}^{1/2}$ описывает рассеяние частицы, находящейся вдали от центра в состоянии $\psi_{\mathbf{k}}^{1/2}$, которое сопровождается переходами в состояния $\psi_{\mathbf{k}'}^{\pm 1/2}$, а также захватом в состояния $\varphi^{\pm 3/2}(\mathbf{r})$. Аналогично рассматривается рассеяние частицы из начального состояния $\psi_{\mathbf{k}}^{-1/2}$.

Подставляя (21) в уравнение (20), домножая его на $(\varphi^{\pm 3/2}(\mathbf{r}))^*$ или $(\psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2})^*$ и интегрируя по $d\mathbf{r}$, получаем систему уравнений для коэффициентов захвата $a_{\mathbf{k}}^{1/2,\pm 3/2}$ и амплитуд рассеяния $t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,\pm 1/2}$. Решение этой системы дает следующие выражения:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2} A_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2}, \\ a_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2} &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \frac{1}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2} A_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2}, \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned} t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,1/2} &= -\frac{\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{1/2,1/2}}{V} - \frac{W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{V}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d_+}{N_l(\mathbf{k}')} \times \\ &\quad \times \left[b^*(\mathbf{k}')a_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2} + c(\mathbf{k}')a_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2}\right], \\ t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,-1/2} &= -\frac{\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{-1/2,1/2}}{V} - \frac{W_{\mathbf{k}'}}{\sqrt{V}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d_+}{N_l(\mathbf{k}')} \times \\ &\quad \times \left[c^*(\mathbf{k}')a_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2} - b(\mathbf{k}')a_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2}\right]. \end{aligned} \tag{23}$$

В Приложении А выписаны выражения для коэффициентов $A_{\mathbf{k}}^{1/2,\pm 3/2}$, а также матричные элементы $W_{\mathbf{k}}$ и $\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{\pm 1/2,1/2}$ Выражения для Γ и ΔE приведены в Приложении Б. Резонансный характер захвата и рассеяния обусловлен присутствием знаменателя $\varepsilon_{\mathbf{k}} - (E_i + \Delta E) + i\Gamma/2$ в коэффициентах захвата (22). Выражения для амплитуд рассеяния (23) получены при учете кулоновского потенциального рассеяния в первом приближении. Этому рассеянию соответствуют первые члены в выражениях (23). Остальные члены в этих формулах описывают резонансное рассеяние, которое является результатом захвата и последующего выброса.

Видно, что в результате конфигурационного взаимодействия, энергетический уровень затравочного локального состояния сдвигается на величину ΔE и приобретает ширину $\Gamma/2$, что соответствует конечному времени жизни частицы в этом квазилокальном состоянии. Величины ΔE и $\Gamma/2$ зависят от энергии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ (см. Приложение Б), поэтому положение резонанса E_0 естественно определять как энергию, при которой вещественная часть резонансного знаменателя равна нулю:

$$E_0 - E_i - \Delta E(E_0) = 0. \tag{24}$$

Тогда полуширина резонанса определяется как значение $\Gamma/2$, вычисленное по формуле (59) Приложения Б при резонансной энергии E_0.

Следует отметить, что сферическое приближение для гамильтониана Латтинжера является довольно грубым и исключает из рассмотрения влияние анизотропии спектра подзоны легких дырок на параметры резонансного состояния. Учесть эффекты анизотропии позволяет использование цилиндрического приближения для гамильтониана Латтинжера. Переход к этому приближению осуществляется заменой γ_2 и γ_3 в недиагональных элементах гамильтониана (1) на их среднее значение $\gamma_c = 0.5(\gamma_2+\gamma_3)$. При этом закон дисперсии в подзоне легких дырок принимает вид

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\Big[\gamma_1(k_\perp^2+k_z^2) - \big[\zeta^2 + 2\gamma_2\zeta(k_\perp^2 - 2k_z^2) + \\ + (\gamma_2^2+3\gamma_c^2)k_\perp^4 + 4\gamma_2^2k_z^4 + 4(3\gamma_c^2+\gamma_2^2)k_\perp^2k_z^2\big]^{1/2}\Big], \tag{25}$$

где $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$. Результаты расчета положения резонанса и его полуширины для p-Ge при деформации вдоль оси [001] приведены на рис. 2, 3.

На рис. 3 приведены также результаты расчета полуширины резонансного уровня $\Gamma/2$ для сферического приближения в гамильтониане Латтинжера.

График, приведенный на врезке в рис. 3, демонстрирует, что при малых энергиях резонанса ($E_0 \ll E_{def}$) зависимость $\Gamma(E_0)$ имеет характер $E_0^{5/2}$ в соответствии с общей теорией [11].

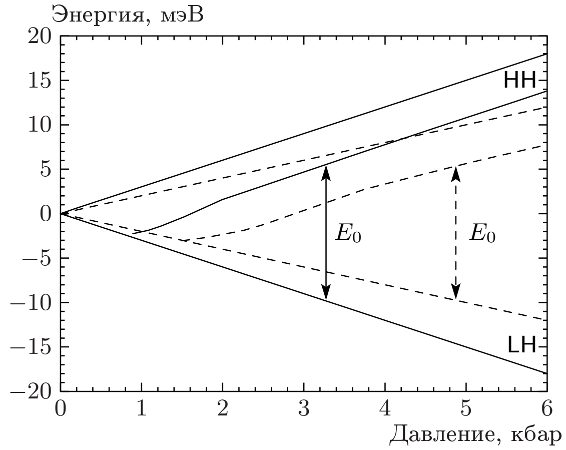

Рис. 2. Энергетическая диаграмма зависимости расщепления подзон легких и тяжелых дырок, а также положения резонансного уровня от приложенного давления. Направления деформации: [001] — сплошная линия, [111] — штриховая

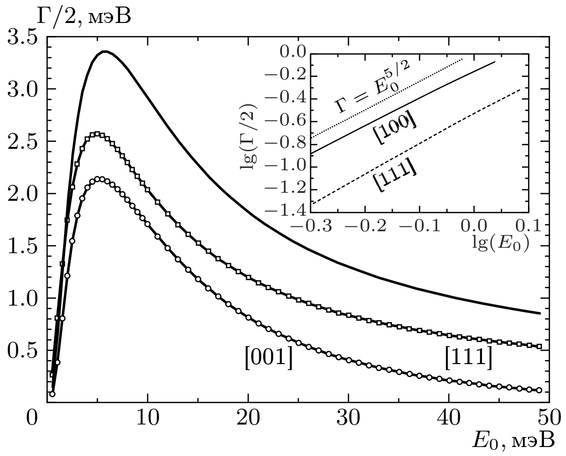

Рис. 3. Зависимость полуширины резонансного уровня от его положения E_0 в цилиндрическом и сферическом (сплошная линия) приближениях для двух направлений приложенного давления: [001] и [111]. Врезка демонстрирует пропорциональность полученных зависимостей $E_0^{5/2}$ при малых энергиях

3. ВЕРОЯТНОСТИ ЗАХВАТА В РЕЗОНАНСНОЕ СОСТОЯНИЕ И УПРУГОГО РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ

Представление волновой функции в виде (21) позволяет получить выражения для вероятности упругого резонансного рассеяния носителей $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{1/2}$ и вероятности захвата на примесь $W_{\mathbf{k}r}^{1/2}$, которые связаны с коэффициентами захвата $a_{\mathbf{k}}^{1/2,\pm 3/2}$ и с амплитудами рассеяния $t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,\pm 1/2}$ соотношениями [11]

$$W_{\mathbf{kr}}^{1/2} = \left|a_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2}\right|^2 + \left|a_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2}\right|^2. \qquad (26)$$

$$W_{\mathbf{kk}'}^{1/2} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\left|t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,1/2}\right|^2 + \left|t_{\mathbf{kk}'}^{1/2,-1/2}\right|^2\right) \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \qquad (27)$$

Отметим, что упругий характер резонансного рассеяния имеет место в случае, когда за время жизни $\hbar/\Gamma$ в резонансном состоянии не происходит сбой фазы, т. е. имеет место захват и последующий когерентный выброс. В противоположном случае резонансное рассеяние приобретает неупругий характер и $\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})$ в (27) заменяется на лоренцевский множитель [8, 11].

Рассматривая рассеяние частицы, находящейся в состоянии $\psi_{\mathbf{k}}^{-1/2}$, легко показать, что $W_{\mathbf{kk}'}^{1/2} = W_{\mathbf{kk}'}^{-1/2}$ и $W_{\mathbf{k}r}^{1/2} = W_{\mathbf{k}r}^{-1/2}$. Соответственно равны друг другу и функции распределения дырок $f_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}$, которые следует находить, решая кинетическое уравнение с учетом упругого резонансного рассеяния.

Заселенность резонансного состояния f_r определяется формулой [11]

$$f_r = \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}r}^{1/2} f_{\mathbf{k}}^{1/2} + \sum_{\mathbf{k}} W_{\mathbf{k}r}^{-1/2} f_{\mathbf{k}}^{-1/2}. \qquad (28)$$

Вероятность захвата (26) удобно представить в форме, аналогичной простой изотропной модели Брейта–Вигнера [16, 17], выделяя резонансный множитель и безразмерный множитель $w(\theta, \varepsilon_{\mathbf{k}})$, дающий угловую зависимость. В силу резонансного характера процесса захвата этот множитель можно вычислять при значении энергии дырки $\varepsilon_{\mathbf{k}} = E_0$:

$$W_{\mathbf{k}r}^{1/2} = \frac{1}{V}\,\frac{\Gamma}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_0)^2 + \Gamma^2/4}\,\frac{\pi}{4\sqrt{E_0}} \times \left.\left\{\left[\frac{1}{k_\perp}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\perp} + \frac{1}{k_z}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_z}\right]^{3/2}\right\}\right|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}=E_0} w(\theta, E_0), \qquad (29)$$

$$w(\theta, E_0) = \frac{4\sqrt{E_0}}{\pi\Gamma}\left\{\left(\left|A_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2}\right|^2 + \left|A_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2}\right|^2\right) \times \left.\left(\frac{1}{k_\perp}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\perp} + \frac{1}{k_z}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_z}\right)^{-3/2}\right\}\right|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}=E_0}. \qquad (30)$$

Результаты численного расчета $w(\theta, E_0)$ для германия, сжатого вдоль оси [001], как функции угла

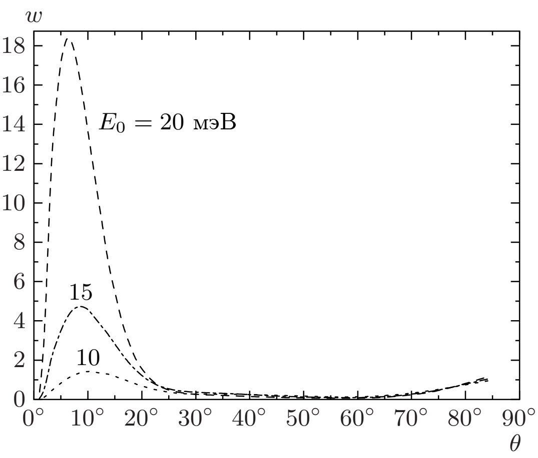

Рис. 4. Угловая зависимость коэффициента $w(\theta, E_0)$ в вероятности захвата (см. (29)). Угол $\theta = \mathrm{arctg}(k_\perp/k_z)$, $E_0 = 10, 15, 20$ мэВ. Давление по оси [001]. Цилиндрическое приближение

θ между волновым вектором и направлением давления (осью z) представлены на рис. 4. Легко показать, что $w(\theta, E_0) = w(\pi - \theta, E_0)$, поэтому зависимости представлены в интервале $0 < \theta < \pi/2$.

Выражение для вероятности упругого рассеяния, полученное с помощью формул (22), (23), (27), распадается на два слагаемых, соответствующих потенциальному кулоновскому рассеянию (борновское приближение) и резонансному рассеянию. Резонансную часть вероятности упругого рассеяния $\tilde{W}_{\mathbf{kk}'}^{1/2}$ удобно представить, вводя резонансное сечение рассеяния $\sigma_{\mathbf{kk}'}^{1/2}$:

$$\tilde{W}_{\mathbf{kk}'}^{1/2} = \frac{2\pi}{\hbar}\sigma_{\mathbf{kk}'}^{r}\frac{1}{V^2}\,\frac{\pi}{4} \times \left(\frac{1}{k_\perp}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\perp} + \frac{1}{k_z}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_z}\right)^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}'). \qquad (31)$$

Используя (22), (23), можно, выделяя резонансный множитель, записать $\sigma_{\mathbf{kk}'}^{1/2}$ в виде

$$\sigma_{\mathbf{kk}'}^{1/2} = \pi a^2 b \frac{\Gamma}{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_0)^2 + \Gamma^2/4} \times E_0^{3/2}\left.\left\{\left(\frac{1}{k_\perp}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_\perp} + \frac{1}{k_z}\frac{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_z}\right)^{-1/2}\right\}\right|_{\varepsilon_{\mathbf{k}}=E_0} \times w(\theta, E_0)\eta(\theta', E_0), \qquad (32)$$

где a и b определяют размеры затравочного локализованного состояния (15), а безразмерный множи-

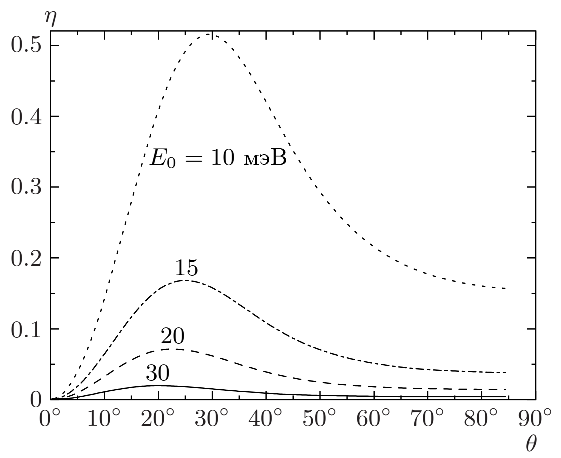

Рис. 5. Угловая зависимость коэффициента $\eta(\theta', E_0)$ в вероятности выброса (см. (32)). Угол $\theta' = \mathrm{arctg}(k'_\perp/k'_z)$, $E_0 = 10, 15, 20, 30$ мэВ. Давление по оси [001]. Цилиндрическое приближение

тель $\eta(\theta', E_0)$, зависящий от угла рассеяния относительно оси сжатия (оси z), определяется формулой

$$\eta(\mathbf{k}') = \left\{ \frac{64}{[1 + b^2 k_z'^2 + a^2 k_\perp'^2]^4} \frac{|b(\mathbf{k}')|^2 + |c(\mathbf{k}')|^2}{N_l(\mathbf{k}')^2} \times \right. \left. \times \left[\frac{\hbar^2}{2mE_0} a_+(\mathbf{k}') + 1 \right]^2 \right\} \Bigg|_{\varepsilon'_{\mathbf{k}} = E_0} . \quad (33)$$

Расчетная зависимость множителя $\eta(\theta, E_0)$ для случая германия, деформированного вдоль оси [001], представлена на рис. 5.

Видно, что частицы, движущиеся вдоль оси z, имеют нулевые вероятности захвата и рассеяния. Этот результат можно получить, не прибегая к расчетам, а из анализа выражений для $W_{\mathbf{kr}}$. Это связано с тем, что рассматриваемый захват происходит, если состояния подзоны легких дырок содержат примесь состояний подзоны тяжелых дырок, т. е. если волновая функция (17) содержит ненулевые компоненты при блоховских функциях $u_{\pm 3/2}$. В случае же, когда волновой вектор частицы направлен вдоль оси z, состояния в обеих подзонах являются «чистыми», т. е. содержат вклады только своих подзон. При этом перпендикулярная компонента волнового вектора, а также недиагональные элементы гамильтониана Латтинжера (1) обращаются в нуль и функции (17) принимают вид $\psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2} = e^{i\mathbf{kr}}/\sqrt{V} u_{\pm 1/2}$. Таким образом, частица, находящаяся в состоянии $\psi_{\mathbf{k}}^{\pm 1/2}$, не взаимодействует с локальными состояниями (14) и захвата на него не происходит. Вероятность захвата растет при увеличении компоненты волнового вектора частицы, перпендикулярной направлению давления. Если частицы движутся в электрическом поле, направленном вдоль оси сжатия, в отсутствие всякого рассеяния (стримминговый режим), то функция распределения частиц вытянута вдоль направления поля и при достижении ими резонансной энергии вероятность захватиться в резонансное состояние крайне мала. Это приводит к уменьшению заселенности центра. Напротив, при диффузионном режиме, который характеризуется широким угловым распределением частиц, вероятность захвата для большинства частиц увеличивается, что ведет к увеличению заселенности центра. Вероятность заполнения резонансного состояния примесного центра при диффузионном режиме рассматривалась в работе ([9]).

Расчеты показывают (см. рис. 4, 5), что вероятность захвата максимальна для частиц с волновым вектором, направленным под углом порядка 10° к направлению сжатия. Упругое же рассеяние происходит в основном в направлении под углом около 20°.

4. СЛУЧАЙ ДЕФОРМАЦИИ ВДОЛЬ ОСИ [111]

Рассмотрим теперь обобщение метода конфигурационного взаимодействия для резонансных акцепторных состояний, возникающих при деформации вдоль оси [111]. В этом случае тензор деформации имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} &= \frac{(S_{11} + 2S_{12})}{3} P, \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zy} &= \frac{S_{44}}{12} P, \end{aligned} \quad (34)$$

Исключая из рассмотрения члены, описывающие сдвиг вершины валентной зоны, аналогично случаю сжатия вдоль оси [001], гамильтониан $\hat{H}_\varepsilon$ удобно записать в виде

$$\hat{H}_\varepsilon = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{bmatrix} 0 & \hat{h} & \hat{j} & 0 \\ \hat{h}^* & 0 & 0 & \hat{j} \\ \hat{j}^* & 0 & 0 & -\hat{h} \\ 0 & \hat{j}^* & -\hat{h}^* & 0 \end{bmatrix}, \quad (35)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{h} &= -\frac{\sqrt{3}}{3} \zeta (1 - i), \\ \hat{j} &= \frac{i\sqrt{3}}{3} \zeta. \end{aligned} \quad (36)$$

Расщепление вершины валентной зоны дается выражением

$$E_{def} = 2\frac{\hbar^2\zeta}{2m_0} = 6d\varepsilon_{xy} = \frac{S_{44}}{2}dP = \alpha P, \qquad (37)$$

где $\alpha = 4$ мэВ/кбар. Дисперсионные соотношения при $\mathbf{k} \parallel [111]$ имеют вид

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(h)} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[(\gamma_1 - 2\gamma_3)k^2 + \zeta\right], \\ \varepsilon^{(l)} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[(\gamma_1 + 2\gamma_3)k^2 - \zeta\right], \end{aligned} \qquad (38)$$

а при $\mathbf{k}$, лежащем в плоскости, перпендикулярной оси [111] (направленном, например, вдоль оси $[11\bar{2}]$),

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(h)} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[(\gamma_1 + \gamma_3)k^2 + \zeta\right], \\ \varepsilon^{(l)} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[(\gamma_1 - \gamma_3)k^2 - \zeta\right]. \end{aligned} \qquad (39)$$

Для нахождения гамильтониана нулевого приближения для локальных акцепторных состояний под зоной тяжелых дырок перейдем к координатному базису $(x'y'z')$ с осью z', направленной вдоль направления [111], осью y' — вдоль направления $[1\bar{1}0]$ и осью z' — вдоль оси $[11\bar{2}]$. Координаты вектора $\mathbf{k}$ в старой и повернутой системах координат связаны линейным преобразованием $\mathbf{k} = \hat{T}\mathbf{k}'$, где

$$\hat{T} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}. \qquad (40)$$

При таком повороте системы координат базис (3) и гамильтониан (6) преобразуются посредством линейного преобразования $\hat{D}$. Матрица этого преобразования может быть составлена из собственных векторов гамильтониана (6), в которых вектор $\mathbf{k}$ заменен на единичный вектор, направленный вдоль новой оси квантования $z' \parallel [111]$:

$$\hat{D} = \frac{1}{\sqrt{2}} \times$$
$$\times \begin{bmatrix} 1 & \frac{\sqrt{3}}{3}(1-i) & -\frac{\sqrt{3}}{3}\,\mathrm{i} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3}(1+i) & -1 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{3}i \\ \frac{\sqrt{3}}{3}i & 0 & -1 & -\frac{\sqrt{3}}{3}(1-i) \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3}i & -\frac{\sqrt{3}}{3}(1+i) & 1 \end{bmatrix}. \qquad (41)$$

Отметим, что координатные оси повернутой системы координат совпадают с главными осями тензора деформации при давлении вдоль направления [111]. Преобразование $\hat{D}$ приводит $\hat{H}_\varepsilon$ в (35) к диагональному виду, аналогичному (10), а гамильтониан кулоновского взаимодействия оставляет неизменным. В качестве гамильтониана нулевого приближения для нахождения волновых функций локальных состояний под зоной тяжелых дырок, будем использовать диагональную часть гамильтониана (6), преобразованного с помощью матрицы $\hat{D}$

$$\left[\hat{\tilde{H}}_0 - \hat{V}_c\right]\varphi^{\pm\frac{3}{2}\prime}(\mathbf{r}) = E_A\varphi^{\pm\frac{3}{2}\prime}(\mathbf{r}), \qquad (42)$$

где

$$\hat{\tilde{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\begin{bmatrix} \hat{\tilde{a}}_+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{\tilde{a}}_- & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\tilde{a}}_- & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{\tilde{a}}_+ \end{bmatrix} \qquad (43)$$

с матричными элементами

$$\begin{aligned} &\hat{\tilde{a}}_+ = -\gamma_1(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2) + \\ &+2\gamma_3(\hat{k}_x\hat{k}_y + \hat{k}_x\hat{k}_z + \hat{k}_y\hat{k}_z) - \zeta, \\ &\hat{\tilde{a}}_- = -\gamma_1(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2) - \\ &-2\gamma_3(\hat{k}_x\hat{k}_y + \hat{k}_x\hat{k}_z + \hat{k}_y\hat{k}_z) + \zeta. \end{aligned} \qquad (44)$$

Собственные функции этого гамильтониана в преобразованном базисе $u'_{\pm3/2}, u'_{\pm1/2}$ выглядят аналогично функциям (14) в базисе (3). Следует, однако, помнить, что переменные z и ρ в выражении для огибающей волновой функции (15) связаны с повернутым координатным базисом с осью z, направленной вдоль оси [111]. Вариационные параметры теперь равны $a = 110$ Å, $b = 49.9$ Å, а энергия состояния $E_A = 5.05$ мэВ. Дальнейшие вычисления удобно проводить в базисе (3). Преобразуем обе части уравнения (42) к этому базису с помощью обратного преобразования:

$$\hat{H}_{0h}\varphi^{\pm 3/2}(\mathbf{r}) = E_A\varphi^{\pm 3/2}(\mathbf{r}), \tag{45}$$

где $\hat{H}_{0h} = \hat{D}\hat{\tilde{H}}_0\hat{D}^+ - \hat{V}_c$ и

$$\varphi^{3/2}(\mathbf{r}) = \hat{D}\varphi^{3/2\prime}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{3}}{3}(1+i) \\ \frac{\sqrt{3}}{3}i \\ 0 \end{bmatrix} \frac{\varphi(\mathbf{r})}{\sqrt{2}},$$

$$\varphi^{-3/2}(\mathbf{r}) = \hat{D}\varphi^{-3/2\prime}(\mathbf{r}) = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{3}i \\ -\frac{\sqrt{3}}{3}(1-i) \\ 1 \end{bmatrix} \frac{\varphi(\mathbf{r})}{\sqrt{2}}, \tag{46}$$

$\varphi(\mathbf{r})$ определена в (15), а

$$\hat{D}\hat{\tilde{H}}_0\hat{D}^+ = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \times \\ \times \begin{bmatrix} \hat{q} & \frac{\sqrt{3}}{3}(1-i)\hat{g} & -\frac{\sqrt{3}}{3}i\hat{g} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{3}(1+i)\hat{g} & \hat{q} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{3}i\hat{g} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3}i\hat{g} & 0 & \hat{q} & -\frac{\sqrt{3}}{3}(1-i)\hat{g} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3}i\hat{g} & -\frac{\sqrt{3}}{3}(1+i)\hat{g} & \hat{q} \end{bmatrix}, \tag{47}$$

где

$$\hat{q} = \frac{\hat{\tilde{a}}_+ + \hat{\tilde{a}}_-}{2}, \qquad \hat{g} = \frac{\hat{\tilde{a}}_+ - \hat{\tilde{a}}_-}{2}. \tag{48}$$

Добавим к гамильтониану (6) и вычтем из него слагаемое $\hat{D}\hat{\tilde{H}}_0\hat{D}^+$, тогда полный гамильтониан $\hat{H}$ можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_{0h} + \hat{U}_h, \tag{49}$$

где

$$\hat{U}_h = \hat{H}_L + \hat{H}_\varepsilon - \hat{D}\hat{\tilde{H}}_0\hat{D}^+ \tag{50}$$

— гамильтониан возмущения для локальных состояний под дном подзоны тяжелых дырок.

Как и в случае сжатия вдоль направления [001], в качестве начального приближения для волновых функций подзоны легких дырок, выберем решения уравнения Шредингера со свободным гамильтонианом Латтинжера с учетом деформации: $\hat{H}_L + \hat{H}_\varepsilon$.

Процедура, полностью аналогичная случаю сжатия вдоль направления [001], снова приводит к выражениям (59), (60) для сдвига положения локального состояния и его уширения, однако при вычислении матричных элементов $W_\mathbf{k}$ и $V_\mathbf{k}$ компоненты вектора $\mathbf{k}$ в выражениях (53) связаны с системой координат, в которой ось z направлена вдоль оси [111]. Соответственно, в выражениях (44) для $a_+(\mathbf{k})$ и $a_-(\mathbf{k})$ и в законе дисперсии зоны легких дырок $\varepsilon_\mathbf{k}$ компоненты волнового вектора должны быть приведены к этому же координатному базису с помощью линейного преобразования T (40). В результате выражения для $a_+(\mathbf{k})$, $a_-(\mathbf{k})$ и $\varepsilon_\mathbf{k}$, используемые при вычислении интегралов в (59) и (60), теперь принимают вид

$$\begin{aligned} \tilde{a_+}(\mathbf{k}) &= -(\gamma_1-2\gamma_3)k_z^2-(\gamma_1+\gamma_3)(k_x^2+k_y^2)-\zeta, \\ \tilde{a_-}(\mathbf{k}) &= -(\gamma_1+2\gamma_3)k_z^2-(\gamma_1-\gamma_3)(k_x^2+k_y^2)+\zeta, \\ \varepsilon_\mathbf{k} &= \frac{\hbar^2}{2m_0}\Big[\gamma_1(k_\perp^2+k_z^2)-\big(\zeta^2+2\gamma_3\zeta(k_\perp^2-2k_z^2)+ \\ &\quad + (\gamma_2^2+3\gamma_3^2)k_\perp^4+8\gamma_2^2k_\perp^2k_z^2+4\gamma_3^2k_z^4\big)^{1/2}\Big]. \end{aligned} \tag{51}$$

Приведенное выражение для $\varepsilon_\mathbf{k}$ соответствует цилиндрическому приближению для спектра в подзоне легких дырок относительно направления [111]. На рис. 2, 3 приведены результаты расчета положения резонанса и его полуширины при давлении вдоль направления [111]. Видно, что характер зависимости $\Gamma(E_0)$ в этом случае остается практически тем же, что и при деформации вдоль [001].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод конфигурационного взаимодействия для рассмотрения параметров резонансных состояний, возникающих в легированном полупроводнике p-типа при одноосной деформации. Конкретные вычисления положения низшего резонансного уровня, времени жизни в этом резонансном состоянии, вероятностей упругого рассеяния и захвата на него выполнены для случая p-Ge при одноосном сжатии вдоль направлений [001] и [111].

Показано, что упругое рассеяние на резонансных состояниях, наводимых мелкими акцепторами в одноосно-деформированном p-Ge, оказывается резко анизотропным. Таким же свойством обладают и коэффициенты захвата в резонансные состояния. Эта анизотропия существенно сказывается на зависимости заселенности резонансного состояния от электрического поля и температуры и влияет на условия возникновения инверсной заселенности резонансных состояний по отношению к локальным (см. [9]).

Полученные результаты позволяют создать компьютерную модель ТГц-лазера на резонансных состояниях в одноосно-деформированном p-Ge.

Отметим, что разработанный метод может быть использован для рассмотрения кинетики при наличии также других типов резонансных состояний, возникающих в полупроводниках и полупроводниковых наноструктурах. В частности, этот метод позволяет изучать особенности кинетики горячих двумерных носителей за счет захвата и выброса в резонансные состояния, наводимые примесями в барьерах наноструктур [18].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 01-02-16265, 00-15-96768, 00-02-17429) и NorFA. И. Н. Яссиевич благодарит также STINT Fellowships Programme (contract №99/527(00)) за финансовую помощь, а А. А. Прокофьев — Swedish Institute за предоставление гранта по программе The New Visby Programme.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Выражения для матричных элементов

$$\begin{aligned} A_{\mathbf{k}}^{1/2,3/2} &= \left[V_{\mathbf{k}} \frac{b(\mathbf{k})}{N_l(\mathbf{k})} - \frac{1}{V} \times \right. \\ &\left. \times \sum_{\mathbf{k}'} \frac{b(\mathbf{k}')\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{1/2,1/2} + c(\mathbf{k}')\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{-1/2,1/2}}{N_l(\mathbf{k}')} W_{\mathbf{k}'} \right], \\ A_{\mathbf{k}}^{1/2,-3/2} &= \left[V_{\mathbf{k}} \frac{c^*(\mathbf{k})}{N_l(\mathbf{k})} - \frac{1}{V} \times \right. \\ &\left. \times \sum_{\mathbf{k}'} \frac{c^*(\mathbf{k}')\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{1/2,1/2} - b^*(\mathbf{k}')\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{1/2,-1/2}}{N_l(\mathbf{k}')} W_{\mathbf{k}'} \right]; \end{aligned} \tag{52}$$

$$W_{\mathbf{k}} = \langle \varphi(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle = \frac{8\sqrt{\pi a^2 b}}{\left[1 + (k_z b)^2 + (k_\perp a)^2\right]^2}, \tag{53}$$

$$V_{\mathbf{k}} = \langle \varphi(\mathbf{r}) | \hat{V}_c(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle = \frac{4\sqrt{\pi a^2 b} e^2}{\kappa a} V_1(\mathbf{k}), \tag{54}$$

$$V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} | \hat{V}_c(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rangle = \frac{4\pi e^2}{\kappa \left|\mathbf{k}' - \mathbf{k}\right|^2}. \tag{55}$$

$$\tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{-1/2,1/2} = V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{b(\mathbf{k})c^*(\mathbf{k}') - b(\mathbf{k}')c^*(\mathbf{k})}{N_l(\mathbf{k}')N_l(\mathbf{k})}, \tag{56}$$

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}^{1/2,1/2} &= \\ &= V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \frac{b(\mathbf{k})b^*(\mathbf{k}') + c^*(\mathbf{k})c(\mathbf{k}') + d(\mathbf{k})d(\mathbf{k}')}{N_l(\mathbf{k}')N_l(\mathbf{k})}, \end{aligned} \tag{57}$$

$$V_1(\mathbf{k}) = \int\limits_0^{+\infty} r e^{-r} dr \int\limits_0^1 \frac{\cos(b k_z r t) J_0\left(a k_\perp r \sqrt{1-t^2}\right)}{\sqrt{1 - t^2\left(1 - b^2/a^2\right)}} dt, \tag{58}$$

J_0 — функция Бесселя нулевого порядка.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Выражения для Γ и ΔE

$$\frac{\Gamma}{2} = -\frac{1}{8\pi^2} \int d^3k' \frac{\left(\frac{\hbar^2}{2m_0} a_+(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_0\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m_0} a_-(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'}\right)}{\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(a_+(\mathbf{k}') + a_-(\mathbf{k}')\right) + 2\varepsilon_{\mathbf{k}'}} W_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}), \tag{59}$$

$$\Delta E = -\frac{1}{8\pi^2}\int d^3k' \frac{\left(\dfrac{\hbar^2}{2m_0}a_+(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_0\right)\left(\dfrac{\hbar^2}{2m_0}a_-(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'}\right)}{\dfrac{\hbar^2}{2m_0}(a_+(\mathbf{k}') + a_-(\mathbf{k}')) + 2\varepsilon_{\mathbf{k}'}} {W_{\mathbf{k}'}}^2 - \frac{1}{8\pi^2}P \times$$
$$\times \int d^3k' \frac{\left(\dfrac{\hbar^2}{2m_0}a_+(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + E_0\right)\left(\dfrac{\hbar^2}{2m_0}a_-(\mathbf{k}') + \varepsilon_{\mathbf{k}'}\right)}{\dfrac{\hbar^2}{2m_0}(a_+(\mathbf{k}') + a_-(\mathbf{k}')) + 2\varepsilon_{\mathbf{k}'}} \frac{W_{\mathbf{k}'}V_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}}. \quad (60)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Немов, Ю. И. Равич, УФН **168**, 817 (1998).
2. М. И. Дьяконов, Б. Л. Гельмонт, ЖЭТФ **62**, 713 (1972).
3. М. В. Вергелис, И. А. Меркулов, ФТП **26**, 1784 (1992).
4. И. В. Алтухов, Е. Г. Чиркова, М. С. Каган и др., ЖЭТФ **74**, 404 (1992).
5. И. В. Алтухов, Е. Г. Чиркова, М. С. Каган и др., ЖЭТФ **88**, 51 (1999).
6. Yu. P. Gousev, I. V. Altukhov, K. A. Korolev et al., Appl. Phys. Lett. **75**, 757 (1999).
7. G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain Effects in Semiconductors*, Wiley, New York (1974).
8. M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, M. S. Kagan et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 644 (1999).
9. M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, M. S. Kagan et al., Phys. Rev. B **62**, 15291 (2000).
10. М. А. Одноблюдов, В. М. Чистяков, И. Н. Яссиевич, ФТП **31**, 1180 (1997).
11. M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, V. M. Chistyakov et al., Phys. Rev. B **62**, 2486 (2000).
12. V. Ya. Aleshkin, B. A. Andreev, V. I. Gavrilenko et al., Nanotechnology **11**, 348 (2000).
13. P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed., Clarendon, Oxford (1981).
14. U. Fano, Phys. Rev. B **124**, 1866 (1961).
15. M. A. Odnoblyudov and V. M. Chistyakov, Semiconductors **32**, 799 (1998).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
17. А. А. Прокофьев, М. А. Одноблюдов, И. Н. Яссиевич, ФТП **35**, 586 (2001).
18. I. N. Yassievich, A. Blom, A. A. Prokofiev, M. A. Odnoblyudov, and K. A. Chao, submitted to Physica B.