

ПРИМЕНЕНИЕ ВАРИАЦИОННОГО МЕТОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ОДИНОЧНЫХ ДОНОРОВ И ДОНОРНЫХ ПАР В АНИЗОТРОПНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Л. Ф. МАКАРЕНКО (Минск, Беларусь)

Проведены расчеты энергетических уровней основного и наиболее низких возбужденных состояний одиночных доноров и донорных пар в анизотропном полупроводнике в однодолинном приближении с учетом анизотропии эффективной массы дна зоны проводимости кремния.

В соответствии с теорией эффективной массы волновая функция мелкого донора выбиралась в виде [1]

$$\psi(r) = N \sum_{k=0}^n c_k F_j(r) u(k_0, r).$$

Для описания характеристик одиночных доноров использовалось уравнение Шредингера для огибающей функции:

$$\left(-\Delta - (\gamma - 1) \frac{d^2}{dz^2} F(r) - 2r^{-1} \right) F(r) = EF(r).$$

Согласно [2] в качестве анзаца использовалась функция следующего вида:

$$F_{an} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M e^{-\alpha r} (\alpha r)^i P_{2j}(\cos(\theta)).$$

Для описания характеристик донорных пар уравнение Шредингера для огибающей функции имеет вид:

$$\left(-\Delta - (\gamma - 1) \frac{d^2}{dz^2} F(r) - 2r_a^{-1} - 2r_b^{-1} \right) F(r) = EF(r).$$

Для нахождения собственных значений энергии удобнее перейти к сферической системе координат [3]. В качестве анзаца использовалась функция следующего вида

$$F_{an} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^M e^{-\alpha \xi} (\alpha \xi)^i P_{2j}(\eta),$$

где η, ξ – сферические координаты. В результате расчетов получена зависимость энергий исследованных состояний от ориентации оси донорной пары. Оценена погрешность определения энергий в зависимости от числа слагаемых в анзаце.

Работа была выполнена при поддержке БРФФИ, Грант № Ф06-323.

Литература

1. Kohn W. Solid State Physics. Vol. 5. / Ed. by F. Seitz and D. Turabull. (N. Y., 1957). P. 257-320.
2. Faulkner R. A. // Phys. Rev. 1069. Vol. 184. № 3. P. 713-721.
3. Слэтер Дж. *Электронная структура молекул*. М., 1965.