

УДК 517:957

Дисперсионные спектры кристаллической решетки с псевдопериодическими дефектами¹

А. И. Шевченко, А. С. Мазинов, В. А. Лукьяненко,
В. Б. Орленсон

Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского,
Симферополь. *E-mail*: art-inf@yandex.ru

Аннотация. Рассмотрена возможность применения теории возмущения для построения зонных диаграмм кристаллической решетки, имеющей дефектную составляющую. Предложенная модель расчета зонной структуры для равномерно легированных полупроводников или полупроводников с периодически встречающимися дефектами основана на введении изменяющейся амплитуды прямоугольных барьеров и соответствующей модификации функции Блоха. Получены дифференциальные уравнения и их решения, позволяющие определить волновую функцию как параметрический функционал, зависящий от соотношения дефектных и основных атомов решетки. Подстановкой параметров реальных полупроводниковых материалов в выведенное трансцендентное уравнение показано изменение дисперсионной картины при внесении заданного количества примесных атомов.

Ключевые слова: дефектная кристаллическая решетка, аналитический подход, блоховская волновая функция, дифференциальные уравнения, квантовая яма, потенциальный барьер, характеристическое уравнение, дисперсионная картина, зонная диаграмма.

Dispersion spectra of a crystal lattice with pseudoperiodic defects

A. I. Shevchenko, A. S. Mazinov, V. A. Lukianenko, V. B. Orlenson

V. I. Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol 295007.

Abstract. The ability to use perturbation theory for the description of the band diagram construction for the crystal lattice, which has a defective component, has been considered. A model for calculation of band structure for uniformly doped semiconductors or semiconductors with periodic defects has been proposed by the introducing of varying amplitude of rectangular barriers and the corresponding modification of the Bloch function. The differential equations and their solutions, allowing to determine the form of the wave function as a function of the parameters, depending on the ratio of defective and fundamental lattice atoms, have been obtained. We have derived a transcendental equation, on the basis of which by substituting the actual parameters of semiconductor materials the change in the dispersion pattern has been shown when a predetermined number of impurity atoms was inserted.

¹Статья подготовлена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности, выполняемого Научно-образовательным центром ноосферологии и устойчивого ноосферного развития ФГАОУ ВО «КФУ им. В. И. Вернадского» (№ гос. регистрации: 115052150083).

Keywords: defective crystal lattice, analytical approach, wavefunctions of Bloch wavefunction of electrons, differential equations, quantum well, potential barrier, characteristic equation, dispersion pattern, band diagram

MSC 2010: 35K55

1. Общие соображения и предпосылки

Шагнув за порог нанометрового предела, современная прикладная физика конденсированного состояния как никогда ранее нуждается в точных математических моделях, позволяющих описывать атомную структуру материала. Теория возмущения является мощным инструментом, дающим возможность глубокого понимания процессов, происходящих в твердотельной системе [1], [2], и рассмотрения с различных позиций существующей квантовой картины [3]. Однако первой сложностью при составлении модельного представления реальных структур является наличие границ раздела или переходов, нарушающих монопериодичность [4]. Значительное усложнение базовых дифференциальных уравнений [5] при этом требует применения специализированных преобразований Фурье, громоздких трансфер-матриц [6], [7] и т. д. А наличие кластеров, дефектов или даже легирующих примесей [8], [9] существенно осложняет решения уравнения Шредингера [10]–[12], за которыми сложно увидеть реальные объекты.

Поиск оптимальных упрощений постановки задачи сводится к формулировке ряда допущений, которые позволяют посредством теории возмущения получить красивые и стройные дисперсионные картины атомного мира твердотельной системы [13], определить фундаментальные свойства материалов, дающие возможность выстраивать энергетические спектры многослойных приборов [14].

2. Описание неоднородности

Исходя из вышеприведенных предпосылок, в данной работе, с учетом сопоставления модельных представлений с экспериментальными результатами, представлена попытка расчета дисперсионных спектров материалов, атомная симметрия которых отлична от монокристаллической [15]. Сложность построения неупорядоченных конденсированных систем предлагается описывать пошаговым подходом, в котором за базу берется классический самосопряженный оператор одноатомной цепочки с дополнительным членом, вносящим отклонение от периодической симметрии, как например в [16]. Само возмущение упрощается до прямоугольных барьеров (ям) [13], [17]–[19], но без предельного представления в виде δ -образных функций [13], [17].

В качестве физических допущений принято предположение о периодичности дефектов. Естественно, в реальных немонокристаллических материалах подобное возмущение носит определенный хаотический характер, однако с некоторой точностью можно утверждать о наличии псевдопериодичности поликристаллов, равномерно легированных полупроводников, CVD пленок и т. п. Такое предположение дает возможность считать, что атомное возмущение от встроенного чужеродного элемента плавно спадает симметрично относительно его координаты.

Следовательно, дефектное возмущение представляется периодически возрастающей и убывающей зависимостью, которая в случае однотипных дефектов транслируется по бесконечной цепочке базовой решетки. Наиболее простым видом подобной функции является косинусоидальное или синусоидальное изменение амплитуды потенциала. Описать в общем виде такое изменение можно посредством внесения дополнительных членов в уравнение движения квантовой частицы, например в [20], [21], но с учетом линейности одномерного пространства. То есть взамен постоянному потенциалу V_0 стандартной теории вводится периодический член $V_0 \cos(nkx)$. Уравнение взаимодействия для движущегося электрона в этом случае можно записать как:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V \cos(nkx)) \psi = 0.$$

Стандартное решение в невозмущенной области также следует искать как падающую и отраженную волны [22], [23]. Можно предположить, что периодическое возмущение системы будет влиять на движущийся электрон. То есть его волновая функция отчасти будет повторять геометрию поля, вдоль которого он движется. Следовательно, перенос функциональной зависимости потенциала на электронный волновой пакет позволит представить его как стандартную блоховскую функцию с дополнительным множителем (1). Последний должен отвечать за медленное изменение амплитуды, только теперь электронной волны, которая записывается как произведение трех сомножителей. Первые два — традиционные для классической модели, третий сомножитель отвечает за медленный спад и нарастание в системе [24]:

$$\psi = U(x) \exp(ikx) \cos(nkx). \quad (1)$$

При этом медленное и слабое изменение возмущения атомных остовов можно считать незначительным.

Полагая, что концентрация примеси намного меньше основных атомов решетки, то есть $n \ll 1$, можно принять, что амплитуда потенциала в пределах одного периода решетки постоянна, а, следовательно, на границе раздела барьер-яма справедливо условие равенства потенциалов $V(a) = V(-b)$.

В силу того, что потенциал имеет вид чередующихся ям и барьеров, формируем дифференциальные уравнения отдельно для электрона, находящегося в яме и отдельно для электрона, движущегося через барьер. Справедливы утверждения.

Утверждение 1. В случае потенциальной ямы $V = 0$, $0 < x < a$ получаем дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} \cos(nkx) \frac{d^2U(x)}{dx^2} + 2k [i \cos(nkx) - n \sin(nkx)] \frac{dU(x)}{dx} - [k^2 (\cos(nkx) + \\ + 2in \sin(nkx) + n^2 \cos(nkx)) - \alpha^2 \cos(nkx)] U(x) = 0, \end{aligned}$$

где $\alpha^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$ (m_e — масса электрона, E — энергия, \hbar — постоянная Дирака).

Решением данного уравнения будет функция вида

$$U_1(x) = \frac{A \exp(i(\alpha - k)x)}{\cos(nkx)} + \frac{B \exp(-i(\alpha + k)x)}{\cos(nkx)}, \quad (2)$$

где A, B — произвольные постоянные.

Утверждение 2. Для потенциального барьера, $V = V_0$, $-b < x < 0$, справедливо дифференциальное уравнение

$$\cos(nkx) \frac{d^2U(x)}{dx^2} + 2k [i \cos(nkx) - n \sin(nkx)] \frac{dU(x)}{dx} - [k^2 (\cos(nkx) + 2in \sin(nkx) + n^2 \cos(nkx)) + \beta^2 \cos(nkx)] U(x) = 0,$$

где $\beta^2 = \frac{2m_e(V_0 - E)}{\hbar^2}$.

Решением данного уравнения будет функция вида

$$U_2(x) = \frac{C \exp((\beta - ik)x)}{\cos(nkx)} + \frac{D \exp(-(\beta + ik)x)}{\cos(nkx)}, \quad (3)$$

где C, D — произвольные постоянные.

Действительно, справедливость дифференциальных уравнений следует из подстановки волновой функции в уравнение Шредингера [25]–[29] и выражений для первой производной

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= \exp(ikx) \left(\frac{dU}{dx} + ikU \right) \cos(nkx) - U \exp(ikx) \cdot n \cdot k \cdot \sin(nkx) = \exp(ikx) \cdot \\ &\cdot \left[\cos(nkx) \left(\frac{dU}{dx} + ikU \right) - nk \sin(nkx) U \right] \end{aligned}$$

и второй производной волновой функции

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{dx^2} &= ik \exp(ikx) \left[\cos(nkx) \left(\frac{dU}{dx} + ikU \right) - nk \sin(nkx) U \right] + \\ &+ \exp(ikx) \left[\frac{d^2U}{dx^2} \cos(nkx) + \frac{dU}{dx} \cdot (-2nk \sin(nkx) + ik \cos(nkx)) - \right. \\ &\quad \left. - Unk^2 (i \sin(nkx) + n \cos(nkx)) \right] = \\ &= \exp(ikx) \left[i \cos(nkx) \frac{dU}{dx} - k^2 \cos(nkx) U - ink^2 \sin(nkx) U + \right. \\ &\quad + \frac{d^2U}{dx^2} \cos(nkx) - 2nk \sin(nkx) \frac{dU}{dx} + ik \cos(nkx) \frac{dU}{dx} - \\ &\quad \left. - ink^2 \sin(nkx) U - n^2 k^2 \cos(nkx) U \right] = \end{aligned}$$

$$= \exp(ikx) \left[\frac{d^2U}{dx^2} \cos(nkx) + 2k(i \cos(nkx) - n \sin(nkx)) \frac{dU}{dx} - k^2 (\cos(nkx) + 2in \sin(nkx) + n^2 \cos(nkx)) U \right].$$

Воспользовавшись принятым упрощением, что амплитуда возмущения изменяется намного медленнее прямоугольного потенциала, допускаем равенство амплитуд соседних потенциалов. Следовательно, как и в классическом случае применяются следующие условия сшивки для функций $U_1(x)$ (2) и $U_2(x)$ (3):

$$U_1(0) = U_2(0); U'_1(0) = U'_2(0); U_1(a) = U_2(-b); U'_1(a) = U'_2(-b).$$

Из вида первых производных функций $U_1(x)$ и $U_2(x)$

$$U'_1(x) = \frac{iA(\alpha - k) \exp(i(\alpha - k)x)}{\cos(nkx)} + \frac{Ank \exp(i(\alpha - k)x) \sin(nkx)}{\cos^2(nkx)} - \frac{iB(\alpha + k) \exp(-i(\alpha + k)x)}{\cos(nkx)} + \frac{Bnk \exp(-i(\alpha + k)x) \sin(nkx)}{\cos^2(nkx)},$$

$$U'_2(x) = \frac{C(\beta - ik) \exp((\beta - ik)x)}{\cos(nkx)} + \frac{Cnk \exp((\beta - ik)x) \sin(nkx)}{\cos^2(nkx)} + \frac{D(-\beta - ik) \exp(-(\beta + ik)x)}{\cos(nkx)} + \frac{Dnk \exp(-(\beta + ik)x) \sin(nkx)}{\cos^2(nkx)},$$

находим при $x = 0$:

$$U_1(0) = \frac{A \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{B \exp(0)}{\cos(0)} = A + B,$$

$$U_2(0) = \frac{C \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{D \exp(0)}{\cos(0)} = C + D,$$

$$U'_1(0) = \frac{iA(\alpha - k) \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{Ank \exp(0) \sin(0)}{\cos^2(0)} - \frac{iB(\alpha + k) \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{Bnk \exp(0) \sin(0)}{\cos^2(0)} = iA(\alpha - k) - iB(\alpha + k),$$

$$U'_2(0) = \frac{C(\beta - ik) \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{Cnk \exp(0) \sin(0)}{\cos^2(0)} + \frac{D(-\beta - ik) \exp(0)}{\cos(0)} + \frac{Dnk \exp(0) \sin(0)}{\cos^2(0)} = C(\beta - ik) + D(-\beta - ik).$$

При $x = a$:

$$U_1(a) = \frac{A \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)} + \frac{B \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)},$$

$$U_1'(a) = \frac{iA(\alpha - k) \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)} + \frac{Ank \exp(i(\alpha - k)a) \sin(nka)}{\cos^2(nka)} - \\ - \frac{iB(\alpha + k) \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)} + \frac{Bnk \exp(-i(\alpha + k)a) \sin(nka)}{\cos^2(nka)}.$$

При $x = -b$:

$$U_2(-b) = \frac{C \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)} + \frac{D \exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)}, \\ U_2'(-b) = \frac{C(\beta - ik) \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)} - \frac{Cnk \exp(-(\beta - ik)b) \sin(nkb)}{\cos^2(nkb)} + \\ + \frac{D(-\beta - ik) \exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)} - \frac{Dnk \exp((\beta + ik)b) \sin(nkb)}{\cos^2(nkb)}.$$

Подставляем полученные выражения в условия сшивки, получаем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно A, B, C, D :

$$A + B - C - D = 0,$$

$$iA(\alpha - k) - iB(\alpha + k) - C(\beta - ik) - D(-\beta - ik) = 0, \\ \frac{A \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)} + \frac{B \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)} - \frac{C \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)} - \frac{D \exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)} = 0, \\ \frac{iA(\alpha - k) \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)} + \frac{Ank \exp(i(\alpha - k)a) \sin(nka)}{\cos^2(nka)} - \\ - \frac{iB(\alpha + k) \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)} + \frac{Bnk \exp(-i(\alpha + k)a) \sin(nka)}{\cos^2(nka)} - \\ - \frac{C(\beta - ik) \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)} + \frac{Cnk \exp(-(\beta - ik)b) \sin(nkb)}{\cos^2(nkb)} - \\ - \frac{D(-\beta - ik) \exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)} + \frac{Dnk \exp((\beta + ik)b) \sin(nkb)}{\cos^2(nkb)} = 0.$$

В операторном виде $MX = 0$, где $X = (A, B, C, D)^T$.

Элементы матрицы M обозначим m_{ij} , $i, j = \overline{1, 4}$, они будут равны:

$$m_{11} = m_{12} = 1, m_{13} = m_{14} = -1, \\ m_{21} = i(\alpha - k), m_{22} = -i(\alpha + k), m_{23} = -\beta + ik, m_{24} = \beta + ik, \\ m_{31} = \frac{\exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)}, m_{32} = \frac{\exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)}, \\ m_{33} = -\frac{\exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)}, m_{34} = -\frac{\exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)},$$

$$\begin{aligned}
m_{41} &= \frac{i(\alpha - k) \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos(nka)} + \frac{nk \sin(nka) \exp(i(\alpha - k)a)}{\cos^2(nka)}, \\
m_{42} &= -\frac{i(\alpha + k) \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos(nka)} + \frac{nk \sin(nka) \exp(-i(\alpha + k)a)}{\cos^2(nka)}, \\
m_{43} &= -\frac{(\beta - ik) \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos(nkb)} + \frac{nk \sin(nkb) \exp(-(\beta - ik)b)}{\cos^2(nkb)}, \\
m_{44} &= \frac{(\beta + ik) \exp((\beta + ik)b)}{\cos(nkb)} + \frac{nk \sin(nkb) \exp((\beta + ik)b)}{\cos^2(nkb)}.
\end{aligned}$$

Разрешимость СЛАУ определяется равенством нулю определителя $\Delta = \det M = 0$.

Определитель матрицы M , найденный с использованием ППП «Maple», в виду его громоздкости приводить не будем. После ряда упрощений и дополнительного использования ППП «Mathematica» определитель принимает следующую форму:

$$\begin{aligned}
\Delta &= -4i \exp(-2ika) (\alpha\beta (\exp(2i(a+b)k) \cos^2(nka) + \cos^2(nkb)) + \\
&\quad + \exp(i(a+b)k) [-\beta \cosh(\beta b) \cdot (2\alpha \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) + \\
&\quad + nk \sin(nk(a+b)) \sin(\alpha a)) + (-nk\alpha \cos(\alpha a) \sin(nk(a+b)) + \\
&\quad + (\alpha - \beta)(\alpha + \beta) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a)) \sinh(\beta b)]).
\end{aligned}$$

После дальнейших упрощений и приравнивания детерминанта нулю получим характеристическое уравнение:

$$\begin{aligned}
&\alpha\beta [\exp(2i(a+b)k) \cos^2(nka) + \cos^2(nkb)] + \\
&+ \exp(i(a+b)k) [-\beta \cosh(\beta b) (2\alpha \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) + nk \sin(nk(a+b)) \sin(\alpha a)) + \\
&+ (-nk\alpha \sin(nk(a+b)) \cos(\alpha a) + (\alpha^2 - \beta^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a)) \sinh(\beta b)] = 0.
\end{aligned}$$

Поделив на $\exp(i(a+b)k)$, получим:

$$\begin{aligned}
&\alpha\beta [\exp(i(a+b)k) \cos^2(nka) + \exp(-i(a+b)k) \cos^2(nkb)] - \\
&\quad - 2\alpha\beta \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) - \\
&\quad - nk\beta \sin(nk(a+b)) \sin(\alpha a) \cosh(\beta b) - nk\alpha \sin(nk(a+b)) \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) - \\
&\quad - (\beta^2 - \alpha^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) = 0.
\end{aligned}$$

Сформируем левую и правую часть с учетом стандартной модели. В правую часть переносим слагаемые, содержащие лишь k и не зависящие от энергии, умноженные на $\alpha\beta$:

$$\begin{aligned}
&2\alpha\beta \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk\beta \sin(nk(a+b)) \sin(\alpha a) \cosh(\beta b) + \\
&+ nk\alpha \sin(nk(a+b)) \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + (\beta^2 - \alpha^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) =
\end{aligned}$$

$$= \alpha\beta \left[\exp(i(a+b)k) \cos^2(nka) + \exp(-i(a+b)k) \cos^2(nkb) \right].$$

Далее вынесем синус произведения $nk(a+b)$ и множитель nk за общие скобки и упрощаем равенство до:

$$\begin{aligned} & 2\alpha\beta \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk \sin(nk(a+b)) \cdot \\ & \quad \cdot (\alpha \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + \beta \sin(\alpha a) \cosh(\beta b)) + \\ & \quad + (\beta^2 - \alpha^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) = \\ & = \alpha\beta \left[\exp(i(a+b)k) \cos^2(nka) + \exp(-i(a+b)k) \cos^2(nkb) \right]. \end{aligned}$$

Для реальной части последнего уравнения (мнимая часть не дает зависимость $E(k)$) получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} & 2\alpha\beta \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk \sin(nk(a+b)) \cdot \\ & \quad \cdot (\alpha \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + \beta \sin(\alpha a) \cosh(\beta b)) + \\ & \quad + (\beta^2 - \alpha^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) = \\ & = \alpha\beta \cos(k(a+b)) (\cos^2(nka) + \cos^2(nkb)). \end{aligned}$$

Это выражение упростим путём раскрытия синуса суммы:

$$\begin{aligned} & 2\alpha\beta \cos(nka) \cos(nkb) \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk(\sin(nka) \cos(nkb) + \cos(nka) \sin(nkb)) \cdot \\ & \cdot (\alpha \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + \beta \sin(\alpha a) \cosh(\beta b)) + (\beta^2 - \alpha^2) \cos(nka) \cos(nkb) \sin(\alpha a) \sinh(\beta b) = \\ & = \alpha\beta \cos(k(a+b)) (\cos^2(nka) + \cos^2(nkb)) \end{aligned}$$

и делением на произведение косинусов $\cos(nka) \cos(nkb)$:

$$\begin{aligned} & 2\alpha\beta \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk (\tan(nka) + \tan(nkb)) \cdot \\ & \quad \cdot (\alpha \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + \beta \sin(\alpha a) \cosh(\beta b)) + \\ & \quad + (\beta^2 - \alpha^2) \sin(\alpha a) \cdot \sinh(\beta b) = \alpha\beta \cos(k(a+b)) \left(\frac{\cos(nka)}{\cos(nkb)} + \frac{\cos(nkb)}{\cos(nka)} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Для большей наглядности разделим левую и правую части данной зависимости на произведение $\alpha\beta$, получим характеристическое уравнение вида:

$$\begin{aligned} & 2 \cos(\alpha a) \cosh(\beta b) + nk (\tan(nka) + \tan(nkb)) \cdot \\ & \quad \cdot \left(\frac{1}{\beta} \cos(\alpha a) \sinh(\beta b) + \frac{1}{\alpha} \sin(\alpha a) \cosh(\beta b) \right) + \\ & \quad + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{\alpha\beta} \sin(\alpha a) \cdot \sinh(\beta b) = \cos(k(a+b)) \left(\frac{\cos(nka)}{\cos(nkb)} + \frac{\cos(nkb)}{\cos(nka)} \right), \end{aligned} \quad (5)$$

которое легко в предельном случае при нулевом значении количества примесных центров (подстановка $n = 0$) преобразуется в трансцендентное уравнение модели Кронига-Пенни.

3. Проверка истинности или прикладные аспекты

Дальнейшие упрощения (4) или (5) не приводят к изящной наглядной аналитической зависимости собственных значений от волнового числа. Однако современные математические пакеты (использовалась «Mathematica») позволяют построить параметрические зависимости правой и левой частей выражения характеристического уравнения (5) и решить его графически.

Вследствие исходных предположений наличие параметра n в (2), показывающего количественное описание дефектности, нарушает трансляционную симметрию и дает возможность отслеживать изменение энергетических зон в достаточно большом количестве обратных решеток. Характеристическое уравнение (2) позволяет, в отличие от полупериодных классических подходов, выстроить зонные диаграммы практически на всей протяженности наноструктурированного функционала, ограничиваясь лишь вычислительными мощностями. Поэтому первичной проверкой и физической интерпретацией применимости (5) является зануление параметра n . Построения энергетического спектра идеальных кристаллов, т. е. $n = 0$, дало периодичность параболических зон с прямолинейной интерполяцией энергетической щели E_g (рис. 1а).

Количественная проверка была осуществлена на основе кристаллического кремния, структура которого хорошо исследована, а сам материал является базовым в нанoeлектронике. К сожалению, нам не удалось найти прямых ссылок на расчетные энергетические параметры кремния, соответствующие представлениям квантовомеханического подхода. Поэтому в качестве исходных физических параметров взяты справочные данные и электронные ресурсы ведущих институтов, основные из которых — [30–33].

Следующим и довольно-таки неоднозначным стал вопрос определения реальных геометрических размеров квантовых ям и барьеров. К тому же необходимо учесть, что кремний, являясь полупроводником, имеет как чисто электронную природу проводимости, так и дырочную кинетику, которая по сути своей является движением связанных электронов и требует определения своих констант. За основу взята кубическая составляющая решетки кремния с периодом $5,43 \text{ \AA}$ [31], барьерное и межбарьерное расстояние задавались подбором размеров ионов от Si^{4+} , равного $0,78 \text{ \AA}$, до диаметра в $5,42 \text{ \AA}$ [33].

Также неоднозначным явился выбор потенциала, который в максимальном значении определяется энергией ионизации последнего электрона, равной $206,15 \text{ eV}$ [33]. Однако в расчетах подобная амплитуда барьеров приводит к сплошной запрещенной зоне, и рассуждения о какой-либо дисперсионной картине априори отпадают. По этой же причине были просчитаны и отброшены энергии ионизации всех электронных оболочек, за исключением $3s$ и $3p$ -орбиталей. Разумный предел

амплитуд возмущений в рассматриваемом случае определялся промежутком от 8,15 eV (энергия ионизации первого атома [28]) до 1,12 eV (ширина щели кремния [32]). Особое внимание уделялось энергиям сродства электрона 4,05 eV [31] и его работы выхода 4,85 eV [30]. Диапазон рабочих масс лежал от $1,46 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ (лёгкие дырки) до $8,93 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ (продольные электроны) [31].

Таким образом, при нулевом значении дефектности в кристалле ($n = 0$) построение трансцендентного уравнения (2) во всем диапазоне энергий, волновых чисел и геометрий атомной решетки кремния давало хорошее совпадение с классическим представлением модели Кронига-Пенни. Как пример, для высоты барьера в $7,4 \cdot 10^{-19} \text{ J}$, то есть 4,6 eV, и геометрии барьера и ямы $b = l/7$, $a = l - b$ при периоде решетки $l = 5,43 \text{ \AA}$ ширина запрещенной зоны — константа в $1,72 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ (рис. 1а). То есть значение энергетической щели в 1,08 eV имеет порядок, сравнимый с экспериментально подтвержденным значением в 1,12 eV [31], [18], [15]. Разницу в 0,04 eV стоит отнести к ошибке, вносимой неточностью задания формы потенциала и допущений в граничных условиях.

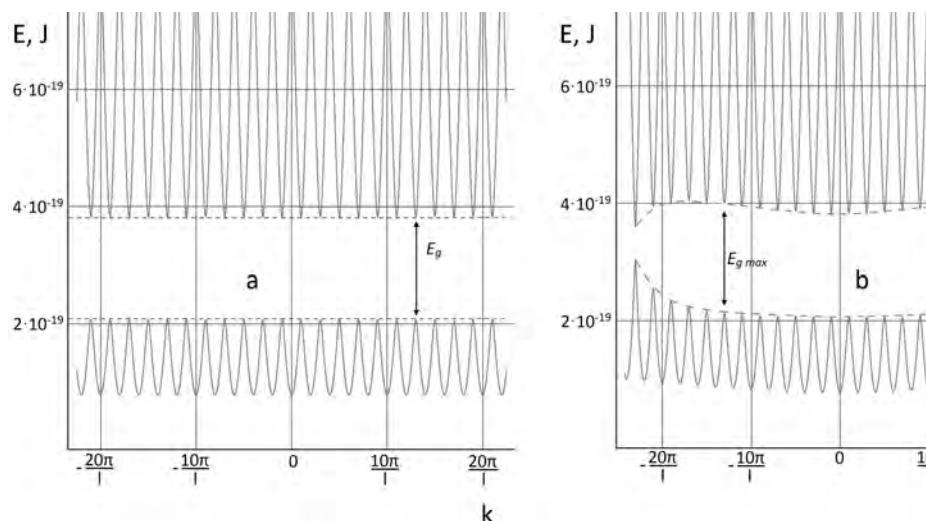


Рис. 1. Дисперсионная картина (а) бездефектного монокристалла. Изменение запрещенной зоны при внесении в кристалл дефектов (б).

Введение дефектов в монокристалл, т. е. возрастание параметра n до 0,02, дает заметное изменение запрещенной зоны для различных k (рис. 1б). При этом минимальное значение энергетической щели для Si , равное 0,30 eV, можно интерпретировать как энергию активации, определяемую измерениями высокотемпературной проводимости аморфного или нанокристаллического кремния. Максимальное значение, остающееся на прежнем уровне, может быть сопоставлено с оптической шириной запрещенной зоны все того же кремния. Дальнейшее увеличение количественной составляющей неоднородности в основной симметрии и возрастание n до 0,06 приводит к более быстрому изменению геометрии запрещенной зоны (рис. 2а).

Подобное представление неидеальности кристалла явно показывает, что с увеличением количества неоднородностей меняется зависимость энергии от волнового числа не только для одного атома, но также и для его ближайших соседей (рис. 2b).

В предельном случае, когда количество атомов примеси становится сопоставимым с атомами основной решётки, т. е. $n = 0, 5$, наблюдается практически полное слипание зон — проводимости и валентной, что в свою очередь может быть сопоставимо с эффектом высоколегированных полупроводников, удельное сопротивление которых приближается к металлическому. Это также коррелируется с экспериментальными результатами изменения проводимости, размытия и смещения спектров поглощения полупроводников при введении примесных или дефектных центров [5], [15].

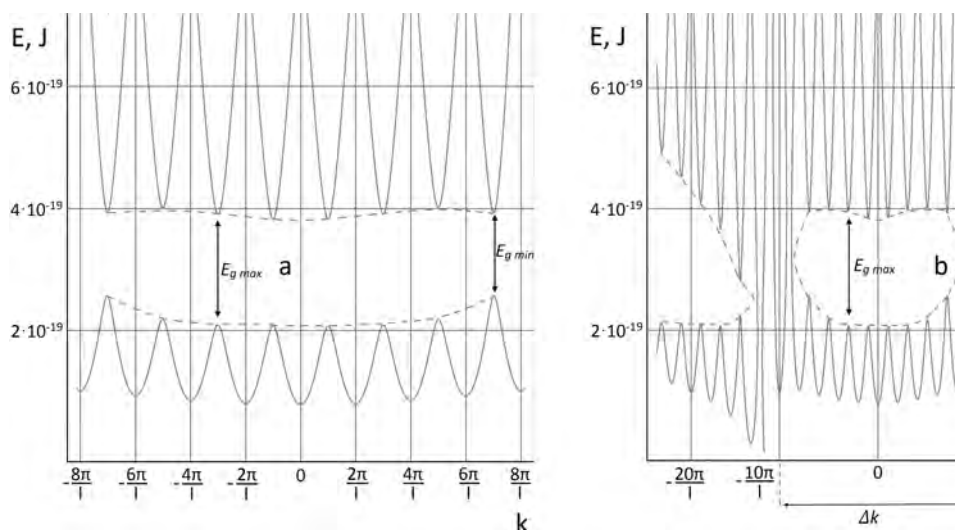


Рис. 2. Увеличение концентрации дефектов — (а,б) и слипание зон в области дефектов (б).

Отдельного внимания заслуживает слипание энергетических зон при рассмотрении нескольких периодов псевдопериодичности (рис. 2). Их частота зависит от отношения количества неоднородностей к количеству атомов основной решетки и поэтому соответствующие k могут быть интерпретированы как координаты дефектов. Хотя нашей целью было только получение отдельного локального уровня энергии, значение которого могло характеризовать конкретный дефектный центр.

4. Заключение

Установленная корреляция с экспериментальными данными подтверждает возможность модельного представления неидеальности кристаллической решетки посредством введения встроенной подсимметрии. Это предположение позволяет описать изменения, вводимые чужеродными атомами, блоховской функцией с медленно меняющейся амплитудой. Введение количественного параметра n позволяет

проанализировать изменение дисперсионной картины в зависимости от увеличения количества дефектных атомов.

Особенностью подобного представления является возможность выстроить дисперсионную картину практически для любой бесконечной атомной решетки с наглядным представлением изменения энергии запрещенной зоны.

Список цитируемых источников

1. *Ансельм А. И.* Введение в теорию полупроводников. — М.: Наука, 1978.
Anselm A. I. Introduction to the Theory of Semiconductors. Nauka, Moscow, 1978. (in Russian)
2. *Сысоев В. М.* Теория возмущений и уравнение состояния плотных конденсированных сред // ТМФ. — т. 55, № 2 (1983). — С. 305-312.
Sysoev V. M. Perturbation theory and equation of state for dense condensed medium. Theoret. and Math. Phys., vol. 55, iss. 2 (1983), P. 518-523.
3. *Шевченко А. И.* Модель Кронига-Пенни для описания нанокристаллических полупроводниковых материалов / А. И. Шевченко, А. С. Мазинов, В. Б. Орленсон, А. А. Шадрин, Р. А. Потапов // 25-я Международная Крымская конференция «СВЧ-техника и телекоммуникационные технологии» (КрыМиКо'2015). — Севастополь, 2015. — С. 701-702.
Shevchenko A. I. The Kronig-Penney model for the description of nanocrystalline semiconductor materials / A. I. Shevchenko, A. S. Mazinov, V. B. Orlenon, A. A. Shadrin, R. A. Potapov // 25th Int. Crimean Conference «Microwave & Telecommunication Technology» (CriMiCo'2015). — Sevastopol, 2015. — P. 701-702. (in Russian)
4. *Behera S. N., Gayen S., Ravi Prasad G. V., Bose S. M.* Electronic properties of ordered and disordered linear clusters of atoms and molecules. Physica B, vol. 390, iss. 1-2 (2007), P. 124-133.
5. *Kong C., Hai K., Tan J., Chen H., Hai W.* A novel exact solution to transmission problem of electron wave in a nonlinear Kronig-Penney superlattice. Superlattice Microst., vol. 91 (2016), P. 129-137.
6. *Hernandez-Herrejon J. C., Izrailev F. M., Tessieri L.* Anomalous properties of the Kronig-Penney model with compositional and structural disorder. Physica E, vol. 40, iss. 10 (2008), P. 3137-3140.
7. *Hernandez-Herrejon J. C., Izrailev F. M., Tessieri L.* Electronic states and transport properties in the Kronig-Penney model with correlated compositional and structural disorder. Physica E., vol. 42, iss. 9 (2010), P. 2203-2210.
8. *Mazinov A.* The influence of defects on the energetic spectrum of noncrystalline semiconductors / A. S. Mazinov, A. I. Shevchenko, E. I. Terukov // JNO. — 2015. — Vol. 9, no. 6. — P. 778-782.
9. *Maksymowicz A. Z., Woloszyn M.* Density of states in structurally disordered 1D chains of atoms. J. Non-cryst. Solids, vol. 352, iss. 40-41 (2006), P. 4200-4205.
10. *Васин М. Г.* О некоторых деталях описания неупорядоченной конденсированной системы с помощью теории дефектных состояний ориентационного порядка. // ТМФ. — т. 161, № 2 (2009) — С. 267-277.

- Vasin M. G. Some details of the description of a disordered condensed system using the theory of defect states of orientational order // *Theoret. and Math. Phys.*, vol. 161, iss. 2 (2009), P. 1549-1557. (in Russian)
11. Tkachuk V., Voznyak O. Quasi-exactly solvable periodic and random potentials. *Phys. Lett. A*, vol. 301, iss. 3-4, (2002), P. 177-183.
 12. Ковалевский М. Ю. Квазисредние в решении задачи классификации состояний равновесия конденсированных сред со спонтанно нарушенной симметрией // *ТМФ*. — т. 160, № 2 (2009). — С. 290-303.
Kovalevskii M. Yu. Quasi-averages in the solution of the classification problem for equilibria of condensed media with a spontaneously broken symmetry. *Theoret. and Math. Phys.*, vol. 160, iss. 2 (2009), P. 1113-1123.
 13. Kronig R. de L., Penney W. G. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Proceedings of the Royal Society A. Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 130, iss. 814 (1931), P. 499-513.
 14. Alferov Z. I. Nobel Lecture: The double heterostructure concept and its applications in physics, electronics, and technology. *Rev. Mod. Phys.*, vol. 73 (2001), P. 767-782.
 15. Mazinov A. The offset of the quantum interband transitions in non-crystalline semiconductors / A. Mazinov, A. Shevchenko // *Opt. Quant. Electron.* — 2015. — Vol. 47, no. 7. — P. 1659-1669.
 16. Филатова Т. А., Шафаревич А. И. Квазиклассические спектральные серии оператора Шредингера с дельта-потенциалом на прямой и на сфере // *ТМФ*. — 164:2 (2010). — С. 279-298.
Filatova T. A., Shafarevich A. I. Semiclassical spectral series of the Schrodinger operator with a delta potential on a straight line and on a sphere. *Theoret. and Math. Phys.*, vol. 164, iss. 2 (2010), P. 1064-1080.
 17. Davison S. G., Steslicka M. *Basic Theory of Surface States*, Clarendon Press, Oxford, 1992.
 18. Manasreh O. *Semiconductor heterojunctions and nanostructures*, McGraw-Hill, New York, 2005.
 19. Delyon F., Simon B., Souillard B. From power pure point to continuous spectrum in disordered systems. *Ann. I. H. Poincare A*, vol. 42, iss. 3 (1985), P. 283-309.
 20. Белоцкий Е. Д., Лев Б. И. Кластерообразование в конденсированных средах // *ТМФ*. — т. 60, № 1 (1984). — С. 120-132.
Belotskii E. D., Lev B. I. Clustering in condensed media. *Theoret. and Math. Phys.*, vol. 60, iss. 1 (1984), P. 711-719.
 21. Jones H. F. The energy spectrum of complex periodic potentials of the Kronig-Penney type. *Phys. Lett. A*, vol. 262, iss. 2-3, (1999), P. 242-244.
 22. Hughes R. J. Generalized Kronig-Penney Hamiltonians. *J. Math. Anal. Appl.*, vol. 222, iss. 1 (1998), P. 151-166.
 23. Ашкрофт Н., Мермин Н. *Физика твёрдого тела*. — М.: Мир. — Т. 1.— 1979.
Ashcroft N. W., Mermin N. D. *Solid State Physics*, Saunders College Publishers, Fort Worth, 1976.

24. *Шевченко А.* Модель Кронига-Пенни с потенциалом периодически изменяющейся амплитуды / А. Шевченко, В. Б. Орленсон, В. А. Лукьяненко // XXVI Крымская Осенняя Математическая Школа-симпозиум по спектральным и эволюционным задачам (КРОМШ-2015): Международная конференция: сб. тез. докл. — Симферополь: ООО ФОРМА, 2015. — С. 28.
Shevchenko A. The Kronig-Penney model with the potential of periodically varying amplitude / A. I. Shevchenko, V. A. Lukyanenko, V. B. Orleson // XXVI Crimean Autumn Mathematical School-Symposium on Spectral and Evolutionary Problems (KROMSH-2015). Simferopol, 2015, P. 28. (in Russian)
25. *Shockley W.* Electrons and Holes in Semiconductors, van Nostrand, New York, 1959.
26. *Gerasimov O. I., Khudyntsev N. N.* Tamm resonances and minibands in the models of atomic chains and superlattices. *Condens. Matter Phys.*, vol. 3, no. 1 (21) (2000), P. 175-182.
27. *Harrison W. A.* Solid State Theory, McGraw-Hill, New York, 1970.
28. *Kittel C.* Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 2004.
29. *Эфрос А. Л.* Локализация электронов в неупорядоченных системах (переход Андерсона) // УФН. — т. 126, вып. 1 (1978). — С. 41-65.
Efros A. L. The localization of electrons in disordered systems (the Anderson transition) *Uspehi fizicheskikh nauk.* — Vol. 126, iss. 1 (1978), P. 41-65. (in Russian)
30. *Бабичев А. П., Бабушкина Н. А., Братковский А. М. и др.* Физические величины / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. — Энергоатомиздат, М., 1991.
Babichev A. P., Babushkina N. A., Bratkovskiy A. M. et al. Physical quantities / Ed. by I. S. Grigoriev, Ye. Z. Meylihov. — Moscow: Energoatomizdat, 1991. (in Russian)
31. *Basic Parameters of Silicon [Электронный ресурс], New Semiconductor Materials. Biology systems. Characteristics and Properties [Официальный сайт].* — URL: http://www.matprop.ru/Si_basic
32. *NSM Archive – Band structure and carrier concentration of Silicon (Si), New Semiconductor Materials. Biology systems. Characteristics and Properties [Официальный сайт].* — URL: http://www.matprop.ru/Si_bandstr/Pressure
33. *Лурье Ю. Ю.* Справочник по аналитической химии // Химия. — М., 1971.

Получена 12.12.2016