

Новый подход к анализу локальных состояний полупроводниковых кристаллов с учётом полного закона дисперсии носителей заряда в зонах

Г.Ф. Глинский, В.А. Смирнова

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Аннотация: В работе предлагается новый метод расчёта локальных (в том числе примесных) состояний в полупроводниковых кристаллах в рамках метода огибающих волновых функций. В его основе лежит учёт вклада в искомые локализованные состояния всех блоховских состояний в зоне Бриллюэна. В отличие от общепринятого подхода – метода эффективной массы, данный метод позволяет получить полную информацию об энергетическом спектре и огибающих волновых функциях во всей области энергий, включая состояния вблизи дна (доноры) и потолка (акцепторы) рассматриваемой зоны. Показана важность соблюдения условия периодичности в обратном пространстве матричных элементов эффективного гамильтониана в \mathbf{k} -представлении, что непосредственно следует из использования в нашем подходе в качестве базиса блоховских состояний. Представленный метод является универсальным, поскольку позволяет учесть все особенности зонной структуры рассматриваемого полупроводника, включая эффекты непараболичности, и может быть использован для анализа локализованных состояний при наличии произвольного вида плавного внешнего потенциала.

Ключевые слова: огибающие волновые функции, примеси в полупроводниках, метод эффективной массы, эффективный гамильтониан

1. Введение

В настоящее время наиболее распространённым приближённым методом расчёта энергетического спектра и волновых функций электрона в полупроводниковых кристаллах при наличии плавно изменяющегося в пространстве внешнего поля является метод огибающих волновых функций. В рамках данного подхода предполагается, что все величины, входящие в эффективный гамильтониан, зависящие от волнового вектора \mathbf{k} (Фурье-образ внешнего потенциала, огибающая волновая функция) локализованы в небольшой области \mathbf{k} -пространства вблизи экстремума рассматриваемой зоны так, что в этой области закон дисперсии может быть описан параболическим законом посредством введения эффективной массы [1,2]. Однако, данный метод позволяет рассчитать значения энергии и волновые функции лишь для нескольких нижних локальных состояний электронов и дырок. При этом, используемое в данном подходе приближение, не учитывает того факта, что разность волновых векторов $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, от которой зависит Фурье-образ примесного потенциала, выходит за пределы первой зоны Бриллюэна, что приводит к ошибкам при определении волновых функций носителей заряда и большой погрешности при расчёте энергий этих состояний.

В данной работе представлен новый подход к построению эффективного однозонного гамильтониана для расчёта электронных и дырочных примесных состояний в рамках метода огибающих волновых функций. Такой подход позволяет учесть все особенности закона дисперсии носителей заряда во всей зоне Бриллюэна, а также необходимое условие периодичности эффективного гамильтониана в обратном \mathbf{k} -пространстве.

2. Точное решение задачи при наличии плавного внешнего потенциала.

Запишем гамильтониан электрона в кристалле в присутствии плавного внешнего потенциала $V(\mathbf{x})$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U_{kp}(\hat{\mathbf{x}}) + V(\hat{\mathbf{x}}), \quad (1)$$

где: \hat{p} – оператор импульса, $\hat{\mathbf{x}}$ – оператор координаты, m_0 – масса свободного электрона. Второе слагаемое представляет собой оператор потенциальной энергии кристалла, третье – оператор внешнего потенциала. В качестве базиса представления гамильтониана будем использовать блоховские состояния $|\Psi_{n,\mathbf{k}}\rangle$ объёмного кристалла. Данный базис является полным, а также удовлетворяет требованиям ортонормированности. Решение уравнения Шредингера в блоховском базисе представляет собой задачу на поиск, собственных чисел и собственных столбцов матрицы гамильтониана, а само уравнение имеет вид:

$$\sum_{n',\mathbf{k}'} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle \langle \Psi_{n'\mathbf{k}'} | \Psi_l \rangle = E_l \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \Psi_l \rangle. \quad (2)$$

Матричные элементы гамильтониана в блоховском базисе определяются следующим образом:

$$\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = E_n(\mathbf{k}) \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{b},\mathbf{b}'} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') A_{\mathbf{b}'n'}(\mathbf{k}'), \quad (3)$$

где: \mathbf{b} – вектор обратной решётки кристалла, \mathbf{k} – волновой вектор электрона, $A_{\mathbf{b}n}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle$ – унитарная матрица преобразования, $V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ – Фурье-образ функции внешнего потенциала.

Блоховские состояния являются периодическими в \mathbf{k} -пространстве. Нетрудно показать, что условию периодичности также удовлетворяют матричные элементы, входящие в состав гамильтониана (3). К ним относятся матричные элементы нулевого приближения, содержащие закон дисперсии, а также матричные элементы внешнего примесного потенциала.

3. Метод огибающих волновых функций в рамках однозонной модели. (Общепринятый подход).

В рамках данного приближения точная дисперсионная зависимость $E_n(\mathbf{k})$ рассматриваемой зоны заменяется её квадратичным приближением:

$$E_n(\mathbf{k}) \approx E_n(0) + \frac{\partial E_n}{\partial k_i}(0) k_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j}(0) k_i k_j = \gamma_{i,j} k_i k_j. \quad (4)$$

Данное приближение хорошо описывает закон дисперсии только близи экстремумов зоны.

Кроме того предполагается, что примесный потенциал представляет собой плавную функцию, практически не изменяющуюся в пределах элементарной ячейки кристалла. В этом случае Фурье-образ не выходит за границы зоны Бриллюэна и может быть представлен как:

$$V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}. \quad (5)$$

Таким образом однозонный эффективный гамильтониан примесной задачи в

рамках общепринятого приближения имеет вид:

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^n = \gamma \mathbf{k}^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (6)$$

Отметим, что матричные элементы гамильтониана (6) не являются функциями периодическими функциями с периодом обратной решётки кристалла.

4. Метод огибающих волновых функций в рамках однозонной модели. (новый подход).

В рамках предлагаемого нами подхода для матричных элементов примесного потенциала вводится иное приближение. Поскольку внешний потенциал является плавным, то при вычислении его Фурье-образа можно сделать следующее приближение:

$$V(\mathbf{a} + \mathbf{y}) \approx V(\mathbf{a}), \quad (7)$$

где: \mathbf{a} – векторы прямой решётки кристалла, \mathbf{y} – векторы, принимающие непрерывный ряд значений внутри элементарной ячейки с номером \mathbf{a} . Данное приближение соответствует усреднению примесного потенциала внутри элементарной ячейки кристалла. Таким образом Фурье-образ принимает вид:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') &\approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} V(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{a}} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}')(\mathbf{a} + \mathbf{y})} = \\ &= \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \xi(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (8)$$

где:

$$\tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} V(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{a}} \quad (9)$$

– Фурье-образ функции дискретной переменной $V(\mathbf{a})$, который в общем случае не совпадает Фурье-образом функции $V(\mathbf{x})$. Нетрудно видеть, что данный Фурье-образ обладает периодичностью в \mathbf{k} -пространстве. Численные расчёты показывают, что в блоховском базисе функция $\xi(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ практически равна единице при всех значениях аргументов. Таким образом эффективный гамильтониан в нашем подходе принимает вид:

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = E(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (10)$$

Разность волновых векторов $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, вопреки устоявшемуся мнению [1], выходит за пределы зоны Бриллюэна. Таким образом, учёт периодичности матричного элемента $\tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ имеет принципиальное значение. Оба слагаемых, включая закон дисперсии, в гамильтониане (10) обладают периодичностью в обратном пространстве.

5. Сравнение полученных результатов.

Сравним точный результат с результатами, рассчитанными приближёнными методами. В качестве примера рассмотрим одномерный кристалл с включёнными донорным и акцепторным центрами, разделёнными в пространстве (рисунок 2). Амплитуда примесного потенциала на рисунке 2 несколько увеличена для большей наглядности.

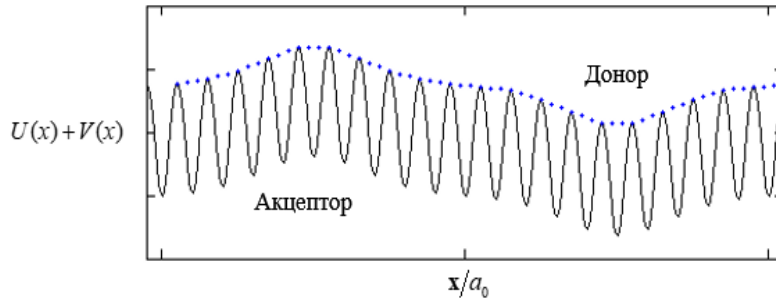


Рисунок 1. Кристаллический потенциал с включёнными донорным и акцепторным центрами, разделёнными в пространстве.

На рисунке 2 представлено сравнение точного энергетического спектра электрона с результатами расчёта приближёнными методами при различных значениях ширины внешнего потенциала ($d_w = d_{\min} + \Delta d \cdot w$, $d_{\min} = 2 \cdot a_0$ и $\Delta d = 0,2 \cdot a_0$, a_0 – период кристаллической решётки). На графике точками обозначен точный результат, кружками – результат, полученный в рамках приближённых методов, выделенная область указывает на ширину энергетической зоны объёмного кристалла.

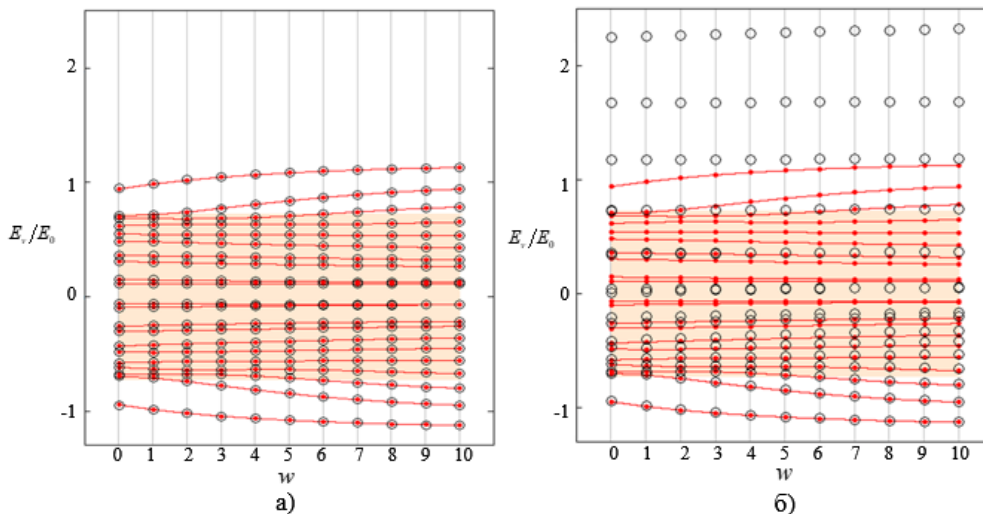


Рисунок 2. Сравнение точного энергетического спектра электрона с расчётом приближёнными методами: а) – наш подход, б) – общепринятый подход.

Как видно из графиков, предложенный метод позволяет с высокой точностью рассчитать энергетический спектр электронов и дырок во всей рассматриваемой области энергий, даже в случае узкого (единицы элементарных ячеек) внешнего потенциала. Общепринятый метод позволяет получить приемлемый результат только для нижних уровней энергии, т.к. в нем не учитываются эффекты непараболичности закона дисперсии зоны.

На рисунке 3 представлены результаты сравнения волновых функций, полученных нашим и общепринятым методами с точным результатом. Как следует из этих данных, предлагаемое нами приближение даёт отличное совпадение волновых функций электрона для всех рассматриваемых энергетических состояний. В тоже время общепринятый метод, в котором не учитываются эффекты непараболичности закона дисперсии и периодичность эффективного гамильтониана в обратном пространстве, позволят рассчитать лишь несколько нижних состояний,

сформированных блоховскими состояниями вблизи экстремума зоны.

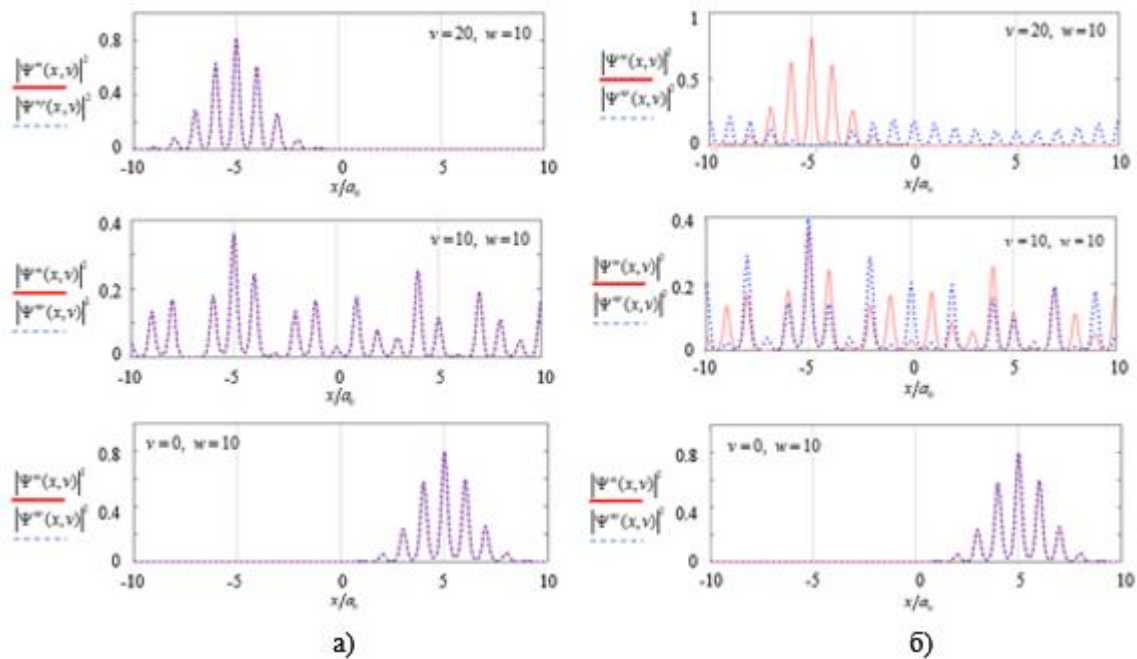


Рисунок 3. Сравнение точного энергетического спектра электрона с расчётами приближёнными методами: а) – наш подход, б) – общепринятый подход.

6. Заключение

В работе представлен новый метод определения эффективного гамильтониана электрона в полупроводниковом кристалле при наличии плавного внешнего поля. Данный метод позволяет с единых позиций исследовать энергетический спектр и волновые функции носителей заряда во всём рассматриваемом диапазоне энергий. В основе метода лежат учёт периодичности эффективного гамильтониана в \mathbf{k} -пространстве, а также полный учёт дисперсии носителей заряда в объёмном полупроводниковом кристалле. Показано, что данный эффективный гамильтониан позволяет рассчитать энергетический спектр и волновые функции электронов и дырок, практически совпадающие с точными результатами численных расчётов.

Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2025-0007 (государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00003-25-00 от 25.12.2024).

Список литературы

1. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // Physical Review. 1955. Vol. 97, no. 4. P. 869–883. doi: 10.1103/physrev.97.869
2. Бир Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.