

ЭЛЕКТРОНИКА

УДК 621.315.592

DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).47-57

ГРНТИ 29.19.31

Специальность ВАК 1.3.8; 2.2.2

Научная статья

ТЕОРИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ИЗОВАЛЕНТНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ

Захаров А. Ю., Захаров М. А., Казаков А. Е.

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия)

Аннотация Работа посвящена применению обобщенной модели Лифшица и теории деформационного потенциала к аналитическому исследованию энергетического спектра твёрдых растворов изовалентного замещения полупроводниковых соединений A^3B^5 . В теории учитываются отличие собственных потенциалов замещающего и замещаемого атомов, а также деформация кристаллической решётки, обусловленная различием атомных размеров примесных и замещаемых атомов. Рассмотрены основные деформационные эффекты в твёрдых растворах замещения и обсуждён выбор нулевого приближения (модель кристалла нулевого приближения). В рамках метода функции Грина представлен самосогласованный метод расчёта ширины запрещённой зоны раствора $Al_{c_1^{(1)}}Ga_{c_2^{(1)}}In_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}P_{c_1^{(2)}}As_{c_2^{(2)}}Sb_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$ в широком интервале составов, проведено численное моделирование энергетических зазоров и деформационных потенциалов. Рассмотрены перспективы дальнейшего развития теории.

Ключевые слова: запрещённая зона, функция Грина, изовалентные растворы, амплитуда рассеяния, примесный атом, деформационный потенциал

Для цитирования: Захаров А. Ю., Захаров М. А., Казаков А. Е. Теория электронной структуры полупроводниковых твердых растворов изовалентного замещения // Вестник НовГУ. 2023. 1(130). 47-57. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).47-57

Research Article

THEORY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF SEMICONDUCTOR SOLID SOLUTIONS OF ISOVALENT SUBSTITUTION

Zakharov A. Yu., Zakharov M. A., Kazakov A. E.

Yaroslav-the-Wise Novgorod State University (Veliky Novgorod, Russia)

Abstract The work is devoted to the application of the generalized Lifshitz model and the theory of deformation potential to the analytical study of the energy spectrum of solid solutions of isovalent substitution of A^3B^5 semiconductor compounds. The theory takes into account the difference between the intrinsic potentials of the substituting and substituted atoms, as well as the deformation of the crystal lattice due to the difference in the atomic sizes of the impurity and substituted atoms. The main deformation effects in substitutional solid solutions have been considered and the choice of the zero approximation (zero approximation crystal model) has been discussed. Within the framework of the Green function method, a self-consistent method for calculating the band gap of a solution $Al_{c_1^{(1)}}Ga_{c_2^{(1)}}In_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}P_{c_1^{(2)}}As_{c_2^{(2)}}Sb_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$ is presented in a wide range of compositions, numerical modeling of energy gaps and deformation potentials has been carried out. The prospects of further development of the theory have been considered.

Keywords: band gap, Green's function, isovalent solutions, scattering amplitude, impurity atom, deformation potential

For citation: Zakharov A. Yu., Zakharov M. A., Kazakov A. E. Theory of the electronic structure of semiconductor solid solutions of isovalent substitution // Vestnik NovSU. 2023. 1(130). 47-57. DOI: 10.34680/2076-8052.2023.1(130).47-57

Введение

Полупроводниковые растворы A^3B^5 , A^2B^6 и твёрдые растворы на их основе относятся к числу наиболее распространенных и важных в прикладном аспекте неупорядоченных систем. Исследование энергетического спектра подобных кристаллов представляет собой актуальную задачу физики полупроводников. При этом одним из наиболее эффективных методов расчёта является метод функции Грина (см., например, обзор И. М. Лифшица [1]). Следует отметить, что обычно взаимная растворимость твёрдых тел невелика, что позволяет использовать предел малой концентрации примеси. В этом случае каждый из электронов находится в поле не более чем одной примеси. Принципиально иная картина складывается в случае изовалентных (изоэлектронных) твёрдых растворов замещения, когда соединение образовано элементами, принадлежащими одной группе и подгруппе Периодической системы Д. И. Менделеева. Как следствие, в таких системах взаимная растворимость компонентов в твёрдом состоянии значительна и соответствующие твёрдые растворы существуют в широком интервале концентраций. В связи с этим для исследования энергетического спектра таких неупорядоченных систем необходимо использовать модели растворов с конечной концентрацией примеси. На сегодняшний день наиболее подробно исследованы модели Андерсона [2], Лифшица [1] и Ллойда [3].

Целью данной работы является применение обобщенной модели Лифшица и теории деформационного потенциала (см., например, [4, 5]) к исследованию энергетического спектра полупроводниковых соединений A^3B^5 , а также нахождение ширины запрещенной зоны раствора $Al_{c_1^{(1)}}Ga_{c_2^{(1)}}In_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}P_{c_1^{(2)}}As_{c_2^{(2)}}Sb_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$ в широком интервале составов.

Работа построена следующим образом. Во втором разделе кратко рассматриваются основные деформационные эффекты в твёрдых растворах замещения и обсуждается выбор нулевого приближения (модель кристалла нулевого приближения). Третий раздел посвящен самосогласованному методу расчёта ширины запрещенной зоны раствора. В заключении кратко сформулированы некоторые перспективы теории.

Деформационные эффекты в твёрдых растворах и выбор нулевого приближения

Как известно [6], введение в кристалл одиночной примеси замещения приводит к появлению дальнедействующего поля деформаций кристаллической решётки, убывающего на больших расстояниях по закону

$$|\delta R_n| \propto \frac{1}{|R_n|^2}, \quad (1)$$

(\mathbf{R}_n – расстояние n -го атома от примесного атома), причём поля деформаций обусловлены как различием атомных размеров компонентов, так и различиями межатомных потенциалов, а также перекрёстными (интерференционными) эффектами. При этом полный возмущающий потенциал примеси для электрона обусловлен тремя основными эффектами. Первый фактор – отличие собственных потенциалов замещающего и замещаемого атомов. Второй – деформация самой кристаллической решётки, связанная с различием атомных размеров примеси и замещаемого атома. Наконец, третий фактор – изменение собственных потенциалов атомов, окружающих примесь, вследствие её силового поля (интерференционные эффекты).

Таким образом, рассеивателем для электрона в примесном кристалле является комплекс «примесный атом плюс окружение примесного атома в кристалле».

Для расчёта энергетического спектра рассматриваемого кристалла определим одночастичную функцию Грина операторным соотношением:

$$G(\omega) = [\omega - H]^{-1}, \quad (2)$$

где ω – энергетический параметр, H – гамильтониан электрона и введем $g(\omega) = \langle G(\omega) \rangle$ – усреднённую функцию Грина. Здесь угловые скобки $\langle \dots \rangle$ обозначают усреднение по конфигурациям системы.

Введем массовый оператор $\Sigma(\omega)$

$$g(\omega) = [\omega - H_0 - \Sigma(\omega)]^{-1}, \quad (3)$$

где H_0 – гамильтониан электрона в идеальном кристалле.

В рамках одночастичного приближения знание одной из функций $g(\omega)$, $\Sigma(\omega)$ достаточно для расчёта равновесных свойств сплава, включая его электронную структуру.

В пределе малой концентрации примеси одного типа массовый оператор может быть записан в виде

$$\Sigma = c T, \quad (4)$$

где c – атомная концентрация примеси, T – амплитуда рассеяния (T -матрица) электрона на одиночной примеси, удовлетворяющая операторному уравнению Липпмана-Швингера [7]

$$T = V + V G_0 T, \quad (5)$$

где V – полный потенциал рассеивателя, $G_0(\omega) = [\omega - H_0]^{-1}$, H_0 – гамильтониан электрона в идеальном кристалле.

Если V состоит из нескольких вкладов

$$V = \sum_n V_n, \quad (6)$$

то каждому из V_n можно сопоставить амплитуду рассеяния t_n с помощью уравнения

$$t_n = V_n + V_n G_0 t_n. \quad (7)$$

Ясно, что $T \neq \sum_n t_n$. Определим t'_n -матрицы с помощью соотношения [7]

$$t'_n = V_n + V_n G_0 T. \quad (8)$$

Тогда

$$\sum_n t'_n = T. \quad (9)$$

Исключая V_n из уравнений (7,8), найдем

$$t'_n = t_n + t_n G_0 \sum_{m \neq n} t'_m. \quad (10)$$

Система уравнений (10) была получена Фаддеевым [8]. Она позволяет выразить полную амплитуду рассеяния электрона (9) при нескольких механизмах рассеяния через точные амплитуды рассеяния электрона t_n на отдельных вкладах V_n в полный потенциал V .

Согласно [9], при определённых условиях на основании уравнений Фаддеева можно получить точное аналитическое выражение для полной амплитуды рассеяния электрона на комплексе «примесный атом плюс поле искажений кристаллической решётки вокруг примеси».

Пусть

$$V = V_1 + V_2, \quad (11)$$

где V_1 – собственный возмущающий потенциал примесного атома, V_2 , – потенциал, связанный с деформацией кристаллической решётки в окрестности примесного атома.

В случае короткодействующего V_1 амплитуды рассеяния на собственно примесном атоме $t_1(\omega)$ имеют вид:

$$\langle \mathbf{p} | t_1 | \mathbf{p}' \rangle = V_0 [1 - G_0(\omega) V_0]^{-1} = t_1(\omega), \quad (12)$$

где

$$G_0(\omega) = \sum_{\mathbf{p}} [\omega - \varepsilon(\mathbf{p})]^{-1}, \quad (13)$$

здесь V_0 – «интенсивность» потенциала V_1 , суммирование по \mathbf{p} осуществляется в пределах первой зоны Бриллюэна, $\varepsilon(\mathbf{p})$ – «затравочный» спектр (т.е. спектр оператора H_0). Заметим, что как и в модели Лифшица, матричные элементы $\langle \mathbf{p} | t_1 | \mathbf{p}' \rangle$ не зависят от \mathbf{p}, \mathbf{p}' .

Для нахождения амплитуды рассеяния на поле искажений кристаллической решётки, обусловленном различием размеров замещающего и замещаемого атомов $\langle \mathbf{p} | V_2 | \mathbf{p}' \rangle$ необходимо знать явный вид потенциала, создаваемый полем деформации кристаллической решётки в окрестности примесного атома:

$$V_2(\mathbf{r}) = \sum_n [v_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) - v_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)] \cong \sum_n (\nabla v_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \cdot \delta \mathbf{R}_n), \quad (14)$$

(v_0 – атомные потенциалы), где [6]

$$\delta \mathbf{R}_n = \frac{\Delta v_1}{12\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\mathbf{R}_n^0}{|\mathbf{R}_n^0|^3}, \quad (15)$$

Δv_1 – изменение объема, обусловленное одним примесным атомом, ν – коэффициент Пуассона кристалла ($0 \leq \nu \leq 1/2$), примесный атом расположен в начале координат.

Тогда матричные элементы потенциала $V_2(\mathbf{r})$ имеет вид

$$\langle \mathbf{p} | V_2 | \mathbf{p}' \rangle = \frac{\Delta v_1}{3\Omega_0} \langle \mathbf{p} | v_0 | \mathbf{p}' \rangle \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\sin(|\mathbf{p}-\mathbf{p}'| a_0)}{|\mathbf{p}-\mathbf{p}'| a_0}, \quad (16)$$

где $\langle \mathbf{p} | v_0 | \mathbf{p}' \rangle$ – матричный элемент атомного потенциала кристалла, Ω_0 – объем элементарной ячейки кристалла, a_0 – постоянная решетки.

В формуле (14) сохранены только линейные по $\Delta v_1/\Omega_0$ члены, поэтому необходимо сохранить только линейные члены и в выражении для $\langle \mathbf{p} | V_2 | \mathbf{p}' \rangle$, т.е.

$$\langle \mathbf{p} | t_2 | \mathbf{p}' \rangle \cong \langle \mathbf{p} | V_2 | \mathbf{p}' \rangle. \quad (17)$$

Наконец, если примесь не образует связанного состояния электрона, то, как показано в [9], вклад интерференционного члена в полную амплитуду рассеяния электрона на комплексе «изоэлектронная примесь плюс деформация решётки вокруг этой примеси» относительно невелик и в дальнейшем учитываться не будет.

Таким образом, при малом значении величины $\Delta v_1/\Omega_0$ полная амплитуда рассеяния электрона на комплексе «примесный атом плюс поле искажений кристаллической решётки вокруг примеси» в рассматриваемой модели допускает представление в виде суммы двух слагаемых (12) и (16).

Для количественного расчёта электронной структуры изоэлектронных твёрдых растворов необходимо знать матричные элементы возмущающих потенциалов примесей. С этой целью рассмотрим твёрдый раствор изоэлектронного замещения, в котором часть атомов основного вещества А замещена на примесные атомы В. Гамильтониан электрона запишем в виде

$$H = H_0 + \sum_n V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + \sum_n \xi(\mathbf{R}_n) V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n), \quad (18)$$

где H_0 – гамильтониан свободного электрона, $V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ – потенциал взаимодействия электрона с j -м атомом основного вещества, $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)$ – возмущающий потенциал примесного атома, $\xi(\mathbf{R}_j)$ – согласно модели Лифшица, случайная переменная, равная единице, если в j -м узле находится атом примеси, и нулю в противном случае.

Заметим, что отличие атомных размеров компонентов раствора А и В приводит к макроскопическому изменению объёма кристалла. Как следствие, атомные потенциалы, содержащиеся в (18), вообще говоря, не могут быть разложены по степеням $\delta \mathbf{R}_n$.

Следуя [10, 11], в качестве нулевого приближения выберем идеальный кристалл исходного вещества, приведенный с помощью однородной деформации к объёму твёрдого раствора. Тогда

$$H = \tilde{H}_0 + \tilde{V}, \quad (19)$$

где

$$\tilde{H} = H_0 + \sum_n V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0), \quad (20)$$

$$\tilde{V} = \sum_n \xi(\mathbf{R}_n) V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + \sum_n [V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) - V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)], \quad (21)$$

\mathbf{R}_n^0 – узлы кристалла нулевого приближения (КНП).

Смещения атомов в растворе относительно узлов КНП малы, поэтому разложение по степеням $\delta\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n - \mathbf{R}_n^0$ допустимо. Все матричные элементы в дальнейшем должны вычисляться на собственных функциях электрона в КНП.

Зонная структура исходного идеального кристалла предполагается известной. На первом этапе требуется найти зонную структуру КНП. Поскольку последний получается из исходного кристалла с помощью однородной деформации, то расчёт его зонной структуры может быть осуществлен стандартными методами [4]. В частности, при обычно выполняющемся условии $\Delta\Omega/\Omega \ll 1$ поправку к спектру в какой-либо точке \mathbf{p} -пространства n -й зоны можно представить в виде

$$\Delta\varepsilon_n^a(\mathbf{p}) = \frac{\partial\varepsilon_n(\mathbf{p})}{\partial\ln\Omega} \frac{\Delta\Omega}{\Omega}. \quad (22)$$

Раскладывая полное возмущение (21) по степеням отклонений положений атомов в растворе от узлов КНП, имеем

$$\begin{aligned} \tilde{V} = & \sum_n \xi(\mathbf{R}_n) V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \\ & + [\sum_n \xi(\mathbf{R}_n) (\nabla_{\mathbf{r}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \cdot \delta\mathbf{R}_n) + \sum_n (\nabla_{\mathbf{r}} V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) \cdot \delta\mathbf{R}_n)] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{n,i,j} \{ \xi(\mathbf{R}_n) \frac{\partial^2 V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)}{\partial r_i \partial r_j} + \frac{\partial^2 V_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0)}{\partial r_i \partial r_j} \} \delta R_n^i \delta R_n^j, \end{aligned} \quad (23)$$

где индексы i, j нумеруют декартовы проекции векторов смещения $\delta\mathbf{R}_n$.

Как видно из разложения (23), основной вклад возмущения (21) определяется членами нулевого порядка по $\delta\mathbf{R}_n$. Линейный по степеням смещений член соответствует интерференционному вкладу в амплитуду рассеяния, которым, как было отмечено выше, можно пренебречь. Такое приближение соответствует учёту только однородной части деформации кристаллической решётки и пренебрежению связью между распределением примеси и искажениями решётки.

Наконец, оценка квадратичных поправок не представляет особого труда (см., например, [6]).

Схема расчёта ширины запрещенной зоны

Рассмотрим общую схему расчёта зависимости ширины запрещённой зоны твёрдых растворов применительно к сплавам изоэлектронного замещения A^3B^5

[12, 13], основанную на идеях, изложенных выше. В качестве примера рассмотрим систему $\text{Al}_{c_1^{(1)}}\text{Ga}_{c_2^{(1)}}\text{In}_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}\text{P}_{c_1^{(2)}}\text{As}_{c_2^{(2)}}\text{Sb}_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$.

Выберем в качестве нулевого приближения идеальный кристалл с постоянной решётки a_0 и зонной структурой, определяемой известным законом дисперсии $\varepsilon_n^0(\mathbf{p})$. Любой из полупроводников рассматриваемого семейства получается из него с помощью однородной деформации и введения примесных атомов двух типов в соответствующие подрешётки. Закон дисперсии в полупроводнике в n -й зоне связан со спектром $\varepsilon_n^0(\mathbf{p})$ соотношением

$$\varepsilon_n^{ij}(\mathbf{p}) = \varepsilon_n^0(\mathbf{p}) + \Delta\varepsilon_n^a(\mathbf{p}) + V_i^{(1)} + V_j^{(2)}, \quad (24)$$

где $\Delta\varepsilon_n^a(\mathbf{p})$ – деформационная поправка к спектру, $V_i^{(1)}$ и $V_j^{(2)}$ – матричные элементы возмущающих потенциалов атомов в катионной и анионной подрешётках, взятые на блоховских функциях соответствующей зоны исходного кристалла, приведённого к объёму полупроводника, индекс i нумерует компоненты катионной подрешётки, j – анионной.

Матричные элементы потенциалов $V_i^{(1)}$ и $V_j^{(2)}$ зависят от объёма элементарной ячейки полупроводника Ω_{ij} , причём в случае малого отличия Ω_{ij} от Ω_0 (Ω_0 — объём элементарной ячейки, соответствующей выбору нулевого приближения) положим

$$V_i^{(1)} = V_i^{(1)}(\Omega_0) + \varepsilon_{ij} w_i^{(1)}, \quad (25)$$

$$V_j^{(2)} = V_j^{(2)}(\Omega_0) + \varepsilon_{ij} w_j^{(2)}, \quad (26)$$

где

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\Omega_{ij} - \Omega_0}{\Omega_0}, \quad (27)$$

здесь Ω_{ij} – объём элементарной ячейки, катионная подрешётка которой состоит из i -го элемента III группы (Al, Ga, In), а анионная подрешётка – из j -го элемента V группы (P, As, Sb).

Тогда величина энергетического зазора между точками Γ_1^c и Γ_{15}^v определяется формулой

$$E_{ij} = E_0 + \left[\frac{\partial E_0}{\partial \ln \Omega} - w_i^{(1)} - w_j^{(2)} \right] \varepsilon_{ij} - \left[V_i^{(1)}(\Omega_0) + V_j^{(2)}(\Omega_0) \right], \quad (28)$$

где E_0 — величина соответствующего зазора в КНП, т.е. при $\Omega = \Omega_0$.

Заметим, что величины

$$\frac{\partial E_0}{\partial \ln \Omega} - w_i^{(1)} - w_j^{(2)} = A_{ij}, \quad (29)$$

входящие в систему (28), представляют собой деформационные потенциалы

$$A_{ij} = \frac{\partial}{\partial \ln \Omega} [E_{ij}(\Gamma_1^c) - E_{ij}(\Gamma_{15}^v)], \quad (30)$$

которые для многих полупроводников известны (см., например, [14, 15, 16]).

Пусть индексы i, j пробегает значения 1, 2, 3: для полупроводниковых соединений A^3B^5 $i = 1, 2, 3$ для элементов Al, Ga, In, а $j = 1, 2, 3$ – для элементов P, As, Sb соответственно. Тогда системы (28) и (29) содержат по девять уравнений, а суммарное число неизвестных равно 14 ($V_i^{(1)}(\Omega_0), V_j^{(2)}(\Omega_0), w_i^{(1)}, w_j^{(2)}, E_0, \partial E_0 / \partial \ln \Omega$). При этом состав твёрдого раствора соединений A^3B^5 описывается шестью переменными $c_i^{(1)}, c_j^{(2)}$ – концентрациями i -го и j -го компонентов в катионной и анионной подрешетках, причём

$$\sum_{i=1}^3 c_i^\alpha = 1, \quad (\alpha = 1, 2). \quad (31)$$

В итоге расчётная формула для зависимости ширины запрещённой зоны твёрдого раствора $Al_{c_1^{(1)}}Ga_{c_2^{(1)}}In_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}P_{c_1^{(2)}}As_{c_2^{(2)}}Sb_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$ от состава принимает вид [9]

$$E(c_1^{(1)}, c_2^{(1)}, c_1^{(2)}, c_2^{(2)}) = E_0 + \frac{\partial E_0}{\partial \ln \Omega} \varepsilon(\Omega) - \sum_{\alpha=1}^2 \int_0^\infty e^{-t} \frac{\sum_{k=1}^2 c_k^{(\alpha)} (V_k^{(\alpha)}) \exp(g V_k^{(\alpha)} t)}{1 - \sum_{k=1}^2 c_k^{(\alpha)} [1 - \exp(g V_k^{(\alpha)} t)]} dt, \quad (32)$$

где $V_i^{(\alpha)}, V_j^{(\alpha)}$ определяются из соотношений (25) и (26) соответственно. Соотношения для вычисления $E_0, \partial E_0 / \partial \ln \Omega$ представлены в обзоре [9]. Заметим, что величина g , содержащаяся в подынтегральной функции этого соотношения для ГЦК решёток, определяется по формуле

$$g \approx \frac{1.79}{E_b}, \quad (33)$$

в которой в качестве E_b подставляется значение ширины подзоны тяжёлых дырок кристалла нулевого приближения, зависящей от состава твёрдого раствора.

В результате численных расчётов были получены значения соответствующих энергетических зазоров соединений E_{ij} и величины ε_{ij}

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} 3.88 & 2.16 & 1.60 \\ 2.25 & 1.43 & 0.72 \\ 1.28 & 0.36 & 0.18 \end{pmatrix}, \quad (\text{эВ}) \quad (34)$$

$$\varepsilon_{ij} = \begin{pmatrix} -0.2057 & -0.1098 & 0.1291 \\ -0.2087 & -0.1168 & 0.1072 \\ -0.0119 & 0.0870 & 0.3296 \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Результаты расчётов деформационных потенциалов полупроводниковых соединений имеют вид

$$A_{ij} = \begin{pmatrix} -5.39 & -4.88 & -3.87 \\ -6.02 & -5.61 & -4.50 \\ -4.42 & -4.01 & -2.90 \end{pmatrix}. \quad (\text{эВ}) \quad (36)$$

Наконец, матричные элементы атомных потенциалов данных полупроводниковых соединений были также получены и здесь из-за своей громоздкости не приводятся.

На основе найденных параметров было проведен расчёт ширины запрещённой зоны твёрдого раствора $\text{Al}_{c_1^{(1)}}\text{Ga}_{c_2^{(1)}}\text{In}_{1-c_1^{(1)}-c_2^{(1)}}\text{P}_{c_1^{(2)}}\text{As}_{c_2^{(2)}}\text{Sb}_{1-c_1^{(2)}-c_2^{(2)}}$ в широком интервале составов. В качестве иллюстрации приведём один из примеров подобных расчётов.

При $c_1^{(1)} = 0.0$ и $c_1^{(2)} = 0.0$ имеем

0.180	0.089	0.063	0.064	0.081	0.110	0.148	0.193	0.244	0.300	0.360
0.229	0.173	0.162	0.172	0.195	0.230	0.272	0.320	0.375	0.434	
0.301	0.268	0.268	0.285	0.315	0.354	0.400	0.453	0.511		
0.388	0.372	0.381	0.405	0.440	0.484	0.534	0.590			
0.487	0.483	0.501	0.531	0.571	0.619	0.674				
0.596	0.603	0.627	0.664	0.709	0.761					(37)
0.714	0.730	0.761	0.803	0.853						
0.841	0.865	0.903	0.950							
0.977	1.009	1.053								
1.124	1.162									
1.281										

Здесь i -я строка и k -й столбец соответствуют $c_2^{(1)} = (i - 1)0.1$ и $c_2^{(2)} = (k - 1)0.1$. «Треугольный» вид таблиц обусловлен требованием $c_2^{(1)} + c_2^{(2)} \leq 1$.

Отметим, что предельные случаи ширины запрещённой зоны (37) хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными (см., например, [14-16]).

Заключение

В заключение сформулируем некоторые перспективы дальнейшего развития изложенной выше теории изовалентных растворов. Очевидно, что данный подход может быть использован для расчёта соединений не только A^3B^5 , но и A^2B^6 и A^4B^6 . Кроме того, представляет интерес многочастичные эффекты, которые в одноэлектронном приближении не проявляются. Наконец, важным является учёт тепловых колебаний решётки.

Список литературы

1. Лифшиц И. М. О структуре энергетического спектра и квантовых состояниях неупорядоченных конденсированных систем // Успехи физических наук. 1964. 83(8). 617-663. DOI: 10.3367/UFNr.0083.196408c.0617
2. Anderson P. W. Absence of diffusion in certain random lattice // Physical Review Online Archive (PROLA). 1958. 109(5). 1492-1505. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492
3. Lloyd P. Exactly solvable model of electronic states in three-dimensional disordered Hamiltonian: non-existence of localized states // Journal of Physics C. 1969. 2(10). 1717-1725. DOI: 10.1088/0022-3719/2/10/303
4. Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Москва, Наука, 1972. 584 с.
5. Blacha A., Presting H., Cardona M. Deformation potentials of $k=0$ states of tetrahedral semiconductors // Physics Status Solidi (B). 1984. 126(11). 11-36.
6. Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. Москва, Наука, 1967. 336 с.
7. Ньютон Р. Д. Теория рассеяния волн и частиц / перевод с англ. А. М. Кузнецова, А. А. Черненко. Москва, Мир, 1969. 607 с.
8. Фаддеев Л. Д. Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трёх частиц (Труды Математического института имени В. А. Стеклова / Академия наук СССР. Т. 69). Москва; Ленинград, Изд-во Акад. наук СССР [Ленингр. отделение], 1963. 122 с.
9. Захаров А. Ю. Теория электронной структуры полупроводниковых твёрдых растворов замещения. Аналитические подходы // Физика и техника полупроводников. 2015. 49(7). 865-886.
10. Захаров А. Ю. Изменение энергетического спектра электронов в полупроводниковых сплавах замещения // Физика и техника полупроводников. 1975. 9(3). 425-431.
11. Захаров А. Ю. Об энергетическом спектре твёрдых растворов // Физика твёрдого тела. 1975. 15(5). 1274-1279.
12. Захаров А. Ю., Мироненко Л. П. Прогноз связанных состояний электронов на изовалентных центрах в полупроводниках // Украинский физический журнал. 1989. 34(3). 421-425.
13. Захаров А. Ю., Мироненко Л. П. Примесные потенциалы в изовалентных твердых растворах полупроводников // Известия вузов. Физика. 1990. 33(3). 58-62.
14. Баранский П. И., Клочков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника: свойства материалов: справочник. Киев, Наукова думка, 1975. 704 с.
15. Физико-химические свойства полупроводниковых материалов: справочник / отв. ред. А. В. Новоселова, В. Б. Лазарев. Москва, Наука, 1978. 340 с.
16. Semiconductors and semimetals. Vol. 1-89. / ed. by R. K. Willardson, Albert C. Beer. New York etc., Academic Press, 1966-2013.

References

1. Lifshits I. M. O strukture energeticheskogo spektra i kvantovykh sostoyaniyakh neuporyadochennykh kondensirovannykh sistem [On the structure of the energy spectrum and quantum states of disordered condensed systems] // Advances in Physical Sciences. 1964. 83(8). 617-663. DOI: 10.3367/UFNr.0083.196408c.0617
2. Anderson P. W. Absence of diffusion in certain random lattice // Physical Review Online Archive (PROLA). 1958. 109(5). 1492-1505. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492

3. Lloyd P. Exactly solvable model of electronic states in three-dimensional disordered Hamiltonian: non-existence of localized states // *Journal of Physics C*. 1969. 2(10). 1717-1725. DOI: 10.1088/0022-3719/2/10/303
4. Bir G. L., Pikus G. E. *Simmetriya i deformatsionnyye efekty v poluprovodnikakh* [Symmetry and deformation effects in semiconductors. Moscow, Nauka Publ., 1972. 584 p.
5. Blacha A., Presting H., Cardona M. Deformation potentials of $k=0$ states of tetrahedral semiconductors // *Physics Status Solidi (B)*. 1984. 126(11). 11-36.
6. Krivoglaz M. A. *Teoriya rasseyaniya rentgenovskikh luchey i teplovykh neytronov real'nymi kristallami* [Theory of scattering of X-rays and thermal neutrons by real]. Moscow, Nauka Publ., 1967. 336 p.
7. Newton R. D. *Teoriya rasseyaniya voln i chastits* [Scattering Theory of Waves and Particles]. Moscow, Mir Publ., 1969. 607 p.
8. Faddeev L. D. Mathematical problems of quantum scattering theory for a system of three particles (Proceedings of the Steklov Mathematical Institute of the Academy of Sciences of the USSR, vol. 69). Moscow; Leningrad, Publishing House of the Academy of Sciences of the USSR, 1963. 122 p.
9. Zakharov A. Yu. *Teoriya elektronnoy struktury poluprovodnikovyykh tvordyykh rastvorov zameshcheniya. Analiticheskiye podkhody* [Theory of the electronic structure of semiconductor solid substitution solutions. Analytical approaches] // *Semiconductors*. 2015. 49(7). 865-886.
10. Zakharov A. Yu. *Izmeneniye energeticheskogo spektra elektronov v poluprovodnikovyykh splavakh zameshcheniya* [Change in the energy spectrum of electrons in semiconductor substitution alloys] // *Semiconductors*. 1975. 9(3). 425-431.
11. Zakharov A. Yu. *Ob energeticheskom spektre tvordyykh rastvorov* [On the energy spectrum of solid solutions] // *Physics of the Solid State*. 1975. 15(5). 1274-1279.
12. Zakharov A. Yu. *Prognoz svyazannykh sostoyaniy elektronov na izovalentnykh tsentrakh v poluprovodnikakh* [Prediction of bound states of electrons on isovalent centers in semiconductors] // *Ukrainian Journal of Physics*. 1989. 34(3). 421-425.
13. Zakharov A. Yu., Mironenko L. P. *Primesnyye potentsialy v izovalentnykh tverdykh rastvorakh poluprovodnikov* [Impurity potentials in isovalent solid solutions of semiconductors] // *Russian Physics Journal*. 1990. 33(3). 58-62.
14. Baransky P. I., Klochkov V. P., Potykevich I. V. *Poluprovodnikovaya elektronika: svoystva materialov: spravochnik* [Semiconductor electronics: properties of materials: Handbook]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1975. 704 p.
15. *Fiziko-khimicheskiye svoystva poluprovodnikovyykh materialov: spravochnik* [Physico-chemical properties of semiconductor materials: Handbook] / eds. A. V. Novoselova, V. B. Lazarev. Moscow, Nauka Publ., 1978. 340 p.
16. *Semiconductors and semimetals*. Vol. 1–89 / eds. R. K. Willardson, A. C. Beer. New York etc., Academic Press, 1966–2013.

Информация об авторах

Захаров Анатолий Юльевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-7850-0086, Anatoly.Zakharov@novsu.ru

Захаров Максим Анатольевич – доктор физико-математических наук, доцент, профессор, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0000-0002-9144-340X, Maxim.Zakharov@novsu.ru

Казakov Артем Евгеньевич – аспирант, Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого (Великий Новгород, Россия), ORCID: 0009-0004-2290-6572, Artem.Kazakov@novsu.ru