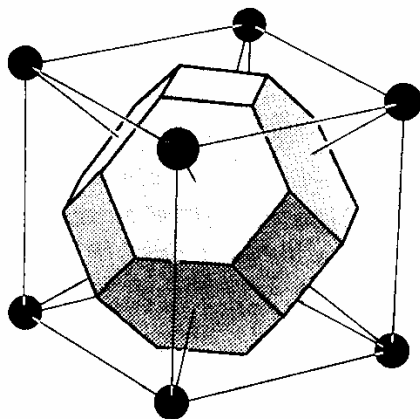


Н.М. Богатов, Э.Н. Хабаров

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТРУКТУРНЫХ
КОМПОНЕНТОВ
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ
РАСТВОРАХ**



Краснодар 2001

Министерство образования
Российской Федерации
Кубанский государственный университет

Н.М. Богатов, Э.Н. Хабаров

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТРУКТУРНЫХ
КОМПОНЕНТОВ
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ
РАСТВОРАХ**

Краснодар 2001

УДК 621.315.592

ББК 31.233

Б 732

Рецензенты:

Кафедра физики Кубанского государственного
технологического университета

Доктор физико-математических наук, профессор Кубанского
государственного аграрного университета

В.В. Фомин

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Кубанского государственного университета

Богатов Н.М., Хабаров Э.Н.

Б 732 Взаимодействие структурных компонентов в полупроводниковых твердых растворах. Краснодар: Кубанский госуниверситет, 2001. – 112 с.
ISBN 5–8209–0119–3

Рассматриваются механизмы взаимодействия структурных компонентов, образованных примесными атомами, в твердых растворах полупроводников. На примере системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ изучено образование примесных и собственных комплексов атома замещения с атомами собственной решетки, формирующих фазы упорядочения при двух значениях концентрации одного из компонентов. В твердых растворах полупроводников типа $\text{A}^3\text{B}^5_{(1-x)}\text{B}^6_x$ исследовано образование фазы упорядочения в виде сверхрешетки доноров.

Предназначено для студентов физических и технических факультетов университетов, аспирантов, а также широкого круга научных и инженерно-технических работников, специализирующихся в области физики, технологии и материаловедения полупроводников.

УДК 621.315.592

ББК 31.233

ISBN 5–8209–0119–3

© Кубанский государственный
университет, 2001

ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие структурных компонентов в процессе выращивания полупроводниковых материалов обуславливает формирование кристаллической структуры. Например, в результате взаимодействия примесных и собственных атомов решетки образуются комплексы, формируются фазы упорядочения, возникает поликристаллическая структура, происходит распад твердых растворов полупроводников.

Твердые растворы полупроводников (ТРП) представляют интерес как системы с плавно изменяемыми свойствами, как материалы, которые в перспективе можно получить с наперед заданными физическими параметрами [1, 2]. Исследования подтвердили реальность синтеза таких систем, но практически полученные сплавы не оправдали надежд, поскольку с потерей сингулярности состава была утеряна самостабилизация роста, обеспечиваемая постоянством температуры кристаллизации, и материалы росли негомогенными по составу.

Изобретение работающих при комнатных температурах гетеролазеров, структура которых сформирована слоями твердых растворов, выдвинуло проблему синтеза систем с переменным составом в число наиболее актуальных задач. Экспериментальный материал по лазерным системам $\text{GaAs-Ga}_x\text{AsAl}_{1-x}$, $\text{GaAs-GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ открывает новый уровень задач детального взаимодействия, комплексообразования и фазовых превращений, которые наблюдаются в пределах ранее установленной области гомогенности, т.е. возникают факты новых типов взаимодействия в системах, до сих пор не исследованные полностью.

В сложившейся ситуации отказаться от использования твердых растворов и заменить их материалами с сингулярными фазами не представляется возможным, поэтому возникает необходимость детального изучения свойств ТРП. С этой точки зрения система Ge-Si интересна не только сама по себе, но и как модельный материал для изучения фундаментальных механизмов взаимодействия примесей и их комплексов.

В работе рассматриваются механизмы взаимодействия структурных компонентов, образованных примесными атомами, определяющих микро- и макроскопическую неоднородность материалов. На примере твердых растворов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ построена феноменологическая модель образования примесных и собственных комплексов атома замещения с атомами собственной решетки, формирующих фазы упорядочения при двух значениях концентрации одного из компонентов. В ТРП типа $\text{A}^3\text{B}_{(1-x)}^5\text{B}_x^6$ в результате взаимодействия примесных комплексов возможно образование фазы упорядочения в виде сверхрешетки доноров. Изучается применение методов квантовой теории поля и квантовой статистики на примере расчета изменения зонной структуры ТРП, обусловленного сверхрешеткой донорных атомов.

1. ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ КОМПОНЕНТОВ И ИХ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ Ge-Si

Изучение твердых растворов полупроводников началось с работы Г. Шгора и В. Клемма [3], которые синтезировали систему Ge-Si и показали ее непрерывность во всей области составов. Интерес к этой системе обусловлен наибольшей распространенностью исходных компонентов в качестве материалов электронной техники и ее элементарностью, что считалось достаточно очевидным.

Несмотря на многочисленные попытки, вырастить монокристаллы системы в широкой области составов удалось лишь уникальными методами. Например, в работе [4] для этого использовалась нестандартная методика кристаллизации из раствора-расплава при температурах значительно более низких, чем температура солидуса собственной системы. Тем не менее исследования продолжались, их обзор достаточно полно представлен в монографиях [5, 6]. Однако в них не нашли отражения представления о примесном состоянии комплексов кремния в германии, об их конфигурационном взаимодействии и о структурных фазовых превращениях в пределах составов, входящих

в область “непрерывных твердых растворов”, т.е. большинство фактов, не укладывающихся в классические представления.

В разделе 1 дан обзор работ по системе Ge-Si, в которых выявлены процессы взаимодействия структурных компонентов, на основе экспериментальных и теоретических данных построена модель образования примесных и собственных комплексов Si в решетке Ge [7]. Взаимодействие примесных комплексов обуславливает фазу упорядочения при критической концентрации $x_1 = 0,1$ ат. % Si, а взаимодействие собственных комплексов обуславливает фазу с высокой степенью порядка при концентрации $x_2 = 12,5$ ат. % Si. Сформулирован критерий образования примесных комплексов в ТРП.

1.1. ПОИСК ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПОЛУЧЕНИЯ ГОМОГЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ge_{1-x}Si_x$

При выращивании твердых растворов полупроводников в условиях, близких к равновесным, методом нормальной кристаллизации получают материалы, содержащие когерентные и некогерентные включения, которые проявляются как закономерности нарушения структуры вследствие флуктуаций сплавов по составу. В работах [8, 9] такие флуктуации наблюдались в расплаве при температурах, близких к температуре кристаллизации. Отмеченный факт – следствие комплексообразования.

Концентрационная неоднородность в кристаллах $Ge_{1-x}Si_x$ вызывает микронапряжения, которые становятся источниками дислокаций [10]. Плотность дислокаций в монокристаллах возрастает с увеличением концентрации кремния от 0,5 до 2,5 ат. %, кроме того кристаллы с 2,5 ат. % Si содержат по границам дислокации равномерно распределенные микросегрегационные области с повышенным содержанием Si [11].

При концентрации кремния 8 ат. % $< x < 94$ ат. % наблюдалось двойникование и образование поликристаллов [12]. Эти явления могут быть обусловлены существованием макроскопических неоднородностей распределения компонентов в плоско-

сти фронта кристаллизации, имеющих асимметричный радиальный профиль [13] или мозаичную структуру [14].

В кристаллах, выращенных по методу Чохральского, с помощью рентгенографических исследований была обнаружена слоистая неоднородность вдоль оси роста и зональная неоднородность в виде концентрических колец [10, 15, 16]. Такая картина может отражать наложение процессов образования новых комплексов, расслаивания растворов и сегрегационных явлений на фронте кристаллизации. Некогерентная кристаллизация и рост поликристаллических слитков наблюдались, начиная с 2÷4 ат. %. Микроструктура таких слитков имеет специфическое блочное строение. Концентрационная неоднородность этих образцов вносит больше нарушений в кристаллическую решетку, чем дислокации [10].

Слоистая неоднородность твердых растворов полупроводников Ge-Si, выращенных в космосе по методу Чохральского, уменьшается, но развивается мозаичная структура, что связано с отсутствием конвективного перемешивания [17]. В кристаллах, полученных на околоземной орбите методом Бриджмена, содержащих до 2 ат. % Si, макро- и микронеоднородность распределения кремния значительно выше, чем в кристаллах, полученных в земных условиях [18]. Неоднородность расплава у границы раздела фаз в начальный момент связана с условиями кристаллизации, например, с направлением роста и направлением силы тяжести при выращивании кристаллов в земных условиях. Авторы работы [18] пришли к выводу, что аномальное распределение кремния в кристаллах, полученных на околоземной орбите, нельзя объяснить исходя из существующих теорий массопереноса и кристаллизации. Образование слоистой неоднородности также не укладывается в теоретические модели распределения компонентов вдоль слитка [19, 20].

Однородные по составу поликристаллы были выращены для всей системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ [21–25]. Монокристаллические образцы получались со стороны германия до 4 ат. % Si [25] и со стороны кремния до 15 ат. % Ge [22, 23].

Иные результаты получены при реализации неравновесных процессов выращивания кристаллов. Используя факт роста коэффициента сегрегации с увеличением переохлаждения расплава, авторы работы [26] показали принципиальную возможность получения однородных кристаллов.

Методом газотранспортных реакций реализованы условия для зарождения и дендритного роста небольших нитевидных и игольчатых монокристаллов [27–29]. Таким образом, были получены игольчатые монокристаллы во всей области составов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, параметры кристаллической решетки которых строго следуют закону Вегарда.

Исследование твердых полупроводников $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, полученных из газовой фазы методом химических транспортных реакций в закрытой системе в космосе и в земных условиях, приведено в работе [30]. Выращенные в земных условиях кристаллы имели низкую концентрацию дефектов, равномерное распределение кремния в концентрационном интервале до 1,5 ат. % и практически не содержали макронапряжений. Для всех кристаллов, полученных в условиях невесомости, характерны более совершенная огранка, “коленообразные” выросты, значительные макронапряжения. В некоторых из них наблюдалась микронеоднородность. Анализ процесса кристаллизации твердых растворов Ge-Si методом химических транспортных реакций показал, что значительный вклад в общий массоперенос в земных условиях дает конвективная составляющая, а в условиях невесомости – диффузионный механизм.

Методом молекулярно-лучевой эпитаксии были получены совершенные монокристаллические слои $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ n-типа толщиной 3÷5 мкм на ориентированных подложках из Si и Ge в области концентраций $x = 0,65 \div 0,98$ [31].

Рассмотренный экспериментальный материал указывает на сложную связь условий кристаллизации с микроструктурой и однородностью выращиваемых сплавов, причем явно прослеживается зависимость от концентрации компонента. Последнее может быть связано с образованием в расплаве комплексов и

кластеров, структура и свойства которых определяются составом расплава.

1.2. ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ КОМПОНЕНТОВ В РАСПЛАВЕ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ge_{1-x}Si_x$

Анализ системы $Ge_{1-x}Si_x$ как двухкомпонентной не позволяет объяснить особенности кристаллизации сплавов, рассмотренные ранее. Систематические исследования свойств твердых растворов в интервале концентраций от 0 до 16 ат. % Si [32], выращенных в виде совершенных монокристаллов [4], позволяют сделать предположение о существовании фаз упорядочения структурных компонентов, которые образуются в расплаве и могут рассматриваться как новые собственные компоненты системы $Ge_{1-x}Si_x$ [33, 34], т.е. система практически реализуется как многокомпонентная.

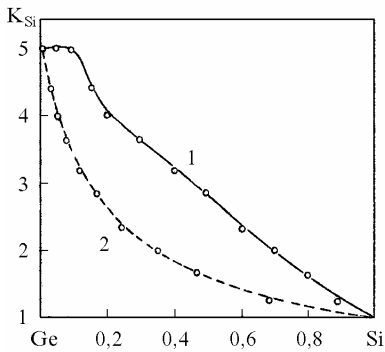
При кристаллизации беспримесных ковалентных кристаллов в качестве структурных единиц можно рассматривать многоатомные кластеры из собственных атомов – надмолекулы [35]. Структурные компоненты, формирующие твердую фазу, образуются в расплаве и при температуре, близкой к температуре кристаллизации, достигают значимых концентраций [36, 37]. В системе $Ge_{1-x}Si_x$ наиболее вероятно образование двухатомных комплексов GeGe, GeSi, SiSi с возбужденными sp^3 -состояниями валентных электронов, которые реализуют устойчивые σ -связи только после насыщения оставшихся шести свободных связей, т.е. после образования ближнего порядка в твердой фазе, поэтому на предкристаллизационном этапе двухатомные комплексы объединяются в кластеры. Взаимодействие компонентов в конкретных условиях кристаллизации определяет состав и строение кластеров [37].

Характеристикой процесса кристаллизации твердых растворов служит диаграмма состояний системы. Экспериментальные кривые ликвидуса и солидуса твердых растворов полупроводников Ge-Si получены в работах [3, 38]. Вопросы, связанные

с расчетом диаграмм состояния, рассмотрены авторами публикаций [39–43].

Суть традиционного подхода заключается в том, что структурными элементами системы считаются атомы Ge и Si, образующие между собой идеальные или почти идеальные твердые растворы, при этом не учитываются фазовые переходы в твердом состоянии [44]. Сравнение экспериментальных и теоретических диаграмм показывает, что отклонения реального ликвидуса от идеального невелики, однако отклонение ликвидуса значительно больше погрешности измерений для всех составов. Изменение кривизны ликвидуса при макроскопических концентрациях компонентов – следствие структурных перестроек в расплаве [45–47]. При концентрациях, соответствующих изменению структуры расплава, меняется наклон кривых для зависимости от состава коэффициентов распределения и диффузии, плотности расплавов, наблюдаются экстремумы на температурных зависимостях декремента затухания и кинематической вязкости.

Коэффициент распределения кремния $K_{Si} = C_S/C_L$ в зависимости от состава (C_S) и в жидкой (C_L) фазе, экспериментальным данным работы [1] $K_{Si}(C_S)$ наблюдается увеличение, этому значению $K_{Si} \approx 0,125$ соответствует изменение состава, или структурная перестройка. Так как твердые растворы образуются через двухатомные комплексы типа сфалерита, то при составе $x_{Si} = 0,125$ каждая ячейка содержит один атом кремния, а ячейка состоит из четырех атомов германия. $e1GeSi$ и является одним из возможных компонентов системы. При образовании кристалла только из элементарных ячеек типа $3GeGe1GeSi$ возможно упорядочение, и тогда комплексы $GeSi$ оказываются в центре полиэдров, состоящих из комплексов $GeGe$. Такая структура соот-



ветствует одной из двух форм плотнейшей упаковки шаров и обладает повышенной устойчивостью.

Рис. 1. Зависимость коэффициента распределения кремния K_{Si} от содержания Si в твердой (C_S) и в жидкой (C_L) фазе:

1 – $K_{Si}(C_S)$; 2 – $K_{Si}(C_L)$

Отсутствие экспериментальных данных не позволяет судить о поведении коэффициента распределения при малых концентрациях германия, поэтому вопрос об упорядочении с ячейкой $3SiSi1GeSi$ остается открытым.

При изменении состава твердых растворов полупроводников будет изменяться вероятность образования двухатомных комплексов, которые в пределах элементарной ячейки для двухкомпонентной системы могут реализовать 5 структур [33, 49–52]. Для системы Ge-Si с тремя комплексами ($GeGe$, $GeSi$, $SiSi$) с учетом перегруппировок типа $2GeGe2GeSi \rightarrow 3GeGe1SiSi$ возможно образование пятнадцати типов структур, из которых упорядочение с образованием однородного полиэдра реализуется только в случаях: $3GeGe1GeSi$, $3GeGe1SiSi$, $1GeGe3GeSi$, $1SiSi3GeSi$, $3SiSi1GeGe$, $3SiSi1GeSi$. Составы $3GeGe1GeSi$ и $3GeGe1SiSi$ обнаружены и частично исследованы экспериментально [3, 32, 33]. Естественно, что реализация той или иной структуры будет зависеть от соотношения энергий образования структурных комплексов и конфигурационной энергии образования кластеров с приведенной ранее структурой упорядочения. Вполне возможно, что некоторые из них будут неустойчивы и при синтезе сплавов могут не наблюдаться. Прямым указанием на структурные превращения служит неоднородность получаемых твердых растворов полупроводников, отмечаемая практически во всех работах.

Рентгеновские исследования расплавов Ge-Si [53] показывают, что существуют группировки со статистическим распределением атомов разного сорта и группировки, обогащенные атомами Si. Последние являются источниками для образования кластеров в твердой фазе. При малых концентрациях Si образуются комплексы $GeSi$, а при больших за счет большего взаимодействия $Si \rightarrow Si$ в сравнении с $Si \rightarrow Ge$ преобладают комплексы $SiSi$. Поэтому в приведенном структурном ряду, характеризующем

мом ростом концентрации Si, вначале будут преобладать структуры с комплексами GeSi, например 3GeGe1GeSi , затем вероятность образования 2GeGe2GeSi сдвигается к 3GeGe1SiSi , 1GeGe3GeSi – к 2GeGe1GeSi1SiSi , 4GeSi – к 2GeGe2SiSi и т.д.

Концентрационное изменение различных кластеров определяет свойства расплавов. Исследования вязкости, плотности, скорости ультразвука, эффекта Холла, прямые структурные исследования показали, что при плавлении таких полупроводников, как Ge, Si, $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$, $\text{Mg}_2\text{B}^{\text{IV}}$ и др., в расплаве выше точки плавления сохраняются кластеры со структурой, близкой к строению кристалла [54]. На основе анализа данных по вязкости и плотности авторы этой работы определили долю кластеров в расплаве вблизи точки плавления (она достигает 10÷15 %) и интервалы температур, в которых расплавы полупроводников содержат кластеры. Исследование расплавов твердых растворов полупроводников $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ согласно методике [54] позволило бы определить изменение состава кластеров и потенциала парного взаимодействия при различных концентрациях.

Взаимодействие компонентов системы Ge-Si на этапе кристаллизации определяет структуру кристаллов. Компоненты могут реализовать сверхструктуру при условии, что температура ее образования достаточно близка к температуре кристаллизации. Для получения упорядочения разница энергий беспорядка и порядка должна быть несколько больше тепловой энергии атома. С уменьшением концентрации Si температура кристаллизации снижается. Однако быстрое уменьшение активности самодиффузии препятствует получению кристаллов высокой степени гомогенности в равновесных условиях, что приводит к флуктуации состава и образованию неупорядоченных фаз. Поэтому для получения твердых растворов с высокой степенью упорядочения требуется специальная технология, в частности, низкотемпературная кристаллизация из раствора расплава [34].

1.3. КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$

В твердых растворах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ атомы Si и Ge являются изо-валентными примесями замещения [55]. Они не вводят локальные состояния в запрещенную зону, а участвуют в формировании разрешенных энергетических зон [56–58], являясь изо-валентными примесями второго рода в соответствии с определением, принятым в [59]. Концентрационные зависимости ряда параметров твердых растворов полупроводников $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ имеют аномалии, которые мы рассмотрим с точки зрения взаимодействующих примесных компонентов.

Для доказательства идеальности системы актуальна справедливость линейной аппроксимации изменения физических свойств кристаллов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ в зависимости от состава и условий роста. Концентрационное изменение периода решетки, полученное различными авторами [3, 24, 27, 60–62], анализируется в работе [33]. Максимальное отклонение от прямой Вегарда наблюдается при $x = 0,5$ на образцах, полученных методом зонной плавки [24, 61, 62]. При использовании синтеза [3] и медленного охлаждения из расплава [60] наибольшее отклонение обнаружено для составов $x = 0,25$ и $0,75$. Для всех образцов отклонение от линейной зависимости происходит в меньшую сторону. Только период решетки кристаллов, полученных газотранспортным методом при явно выраженном дендритном механизме роста, подчинялся закону Вегарда [27]. Таким образом, структура кристаллов и период решетки, характеризующий ее, существенно зависят от условий выращивания.

С помощью метода диффузного рассеяния рентгеновского излучения в [63] найдена энергия смешения твердых растворов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ и определено изменение упругих констант для составов с $x = 0,28; 0,54; 0,64$. Показано, что значения упругих констант хорошо согласуются с уменьшением периода по сравнению с законом Вегарда, величина энергии смешения равна $2,5 \pm 0,2$ ккал/моль. Такое поведение решетки приводит к увеличению жесткости и отклонению объемного модуля сжатия в большую сторону относительно линейной аппроксимации [54].

Отклонение от прямолинейной концентрационной зависимости характерно и для других величин. Нелинейная зависи-

мость микротвердости с разрывом при составе около 10 ат. % Si наблюдалась на образцах, полученных методом направленной кристаллизации [65]. Авторами работы [66] нелинейность микротвердости не обнаружена. Неоднозначность результатов [65, 66], по-видимому, связана с условиями изготовления образцов и точностью определения состава. Микротвердость неравновесных образцов, полученных быстрым охлаждением, имеет зависимость от состава, характерную для неупорядоченных твердых растворов и повторяющую ход кривой энтропии с максимумом при 45÷50 ат. % Si [67]. Двумя прямыми линиями с изломом около 10÷15 ат. % Si аппроксимируется изменение коэффициента теплового расширения при 200 и 500° С, полученное для кристаллов, выращенных методом направленной кристаллизации [68]. Значения этой величины лежат ниже прямой Vegарда. В этой же области концентраций обнаружен излом для температуры Дебая как функции состава [69].

Об изменении структуры твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$ свидетельствует также изменение оптических свойств. Для образцов, выращенных при нормальной направленной кристаллизации, определены значения ширины запрещенной зоны E_g по результатам измерения края собственного поглощения [70]. Зависимость ширины запрещенной зоны от состава имеет ярко выраженный излом около 15 ат. % Si и отклоняется от закона Vegарда в большую сторону. Результаты измерения E_g при температуре около 1000 К для образцов, содержащих 50 и 70 ат. % Si [71], находятся в хорошем согласии с данными [70]. Параметры зонной структуры, исследованные фотоэлектрическим методом в [72], имеют параболическую зависимость от состава.

С ростом концентрации нейтральной примеси рассеяние импульса на ней преобладает по сравнению с рассеянием на фононах и определяет коэффициент оптического поглощения при непрямых переходах [73]. Этот вывод согласуется с результатами исследования люминесценции. Так, в работе [74] показано, что вероятность бесфононных переходов превышает вероятность переходов с участием фононов при концентрации кремния более 2 ат. %. Следует также отметить корреляцию между

концентрационным изменением запрещенной зоны [70] и результатами исследования фотопроводимости монокристаллов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, выращенных методом вытягивания из расплава с подпиткой [75].

Наличие излома на концентрационной зависимости E_g и связанных с ней величин объясняется изменением зонной структуры $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ и переходом минимума зоны проводимости, находящегося в направлении $\langle 111 \rangle$ для чистого Ge, в направлении $\langle 100 \rangle$, характерное для чистого Si, при концентрации кремния $12 \div 13$ ат. % [76]. Подробное исследование прямых оптических переходов методом электроотражения показало, что энергия пиков изменяется с концентрацией приблизительно линейно [77]. Однако в [78] обнаружены аномалии в спектрах отражения германия, соответствующих переходам в направлении $\Lambda-L$, на образцах с $x < 0,2$ ат. % Si. Полученный результат не укладывается в схему идеальных твердых растворов полупроводников, но слабое разрешение спектров отражения не позволяет сделать количественные оценки. Анализ переходов X_4-X_1 по спектрам электроотражения свидетельствует о переходе в седловую точку типа M_1 [79]. Спектры термоотражения измерены для монокристаллов Ge, Si и $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0,24; 0,55; 0,8$ [80]. Аномалии физических свойств для данных составов не обнаружены. В работе [81] установлена зависимость параметров зоны от состояния кристаллической решетки. В результате деформации, возникающей из-за несовместимости решетки сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с ориентированной подложкой, ширина запрещенной зоны значительно уменьшается, достигая при $x = 0,6$ значения, соответствующего чистому Ge.

Информацию о структурных изменениях системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ можно получить на основе анализа спектров решеточного поглощения. Исследование таких спектров во всем концентрационном интервале [82] показало, что германиевые и кремниевые полосы, образованные (TO+TA)-фононами, не смешиваются, их положение слабо зависит от концентрации. На основании этого сделан вывод, что твердые растворы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ содержат кластеры из одноименных атомов. Была обнаружена также примесная

полоса, ее температурная зависимость соответствовала двум колебательным модам. Анализ спектров комбинационного рассеяния показал следующее: интенсивность полосы, обусловленной колебанием двухатомных комплексов GeSi, нарастает при увеличении концентрации Si до 15 ат. %, затем резко падает, после чего медленно растет интенсивность полосы, обусловленной комплексами SiSi [83, 84].

Фонный спектр поглощения монокристаллов Si-Ge с содержанием Ge от 0 до 22 ат. %, исследованный при 300 К [85], аналогичен спектру чистого Si. Моды, соответствующие комплексам GeSi или GeGe, не выделены. С увеличением концентрации Ge сначала происходит уширение, а затем смещение пиков в область меньших энергий.

Образование кластеров из двухатомных комплексов в расплаве, формирующих твердую фазу, – ключевой момент в понимании свойств твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$. На основе теоретического анализа температурной зависимости подвижности образцов $Ge_{1-x}Si_x$ p-типа с одинаковым примесным составом и $0,004 \leq x \leq 0,08$ выявлено, что Si входит в решетку Ge кластерами по 30÷150 атомов [86]. При этом конкретное число атомов в кластере определяется технологическими условиями. Аналогичное исследование в области составов со стороны Si показало, что атомы Ge входят в решетку не в виде кластеров, а отдельными атомами [87]. Авторы работы [87] отмечают, что образование кластеров из Si в решетке Ge, возможно, связано с более высокой температурой затвердевания кремния и с образованием кремниевых микрочастиц в расплаве. Подобные выводы сделаны в работах [88, 89].

Флуктуации распределения кремния в образцах $Ge_{1-x}Si_x$ с концентрацией $0,04 \leq x \leq 0,08$, легированных галлием и мышьяком, были обнаружены при изучении межпримесной излучательной рекомбинации [90]. В этом случае неравновесные носители заряда локализуются не на донорах, а в потенциальных ямах, созданных кластерами с ~50 атомами кремния.

Возможность сегрегации атомов Ge в обогащенных кремнием сплавах отмечена при исследовании энергии активации

фосфора [91]. Однако анализ спектров ИК-поглощения фосфора и бора [92], а также кислорода [93] в кремнии с примесью германия свидетельствует о некоррелированном распределении второго компонента. Спектры полос фотолюминесценции экситонов, связанных на атомах фосфора, твердых растворов Ge-Si, обогащенных как германием, так и кремнием, свидетельствуют о хаотическом распределении изовалентной примеси в области концентрации до 10^{21} см^{-3} [94]. Данные по распределению неосновных атомов, полученные различными авторами [91–94], противоречивы, поскольку исследовались кристаллы, выращенные различными методами. Возможна также неоднозначность в интерпретации экспериментальных результатов, несущих косвенную информацию о структуре кристаллов.

Непосредственное изучение структурного несовершенства монокристаллов Si с различной концентрацией Ge проведено методом дифракции монохроматических γ -квантов ($\lambda = 0,03 \text{ \AA}$) в работе [95]. Показано, что степень несовершенства кристаллической структуры меняется с составом. Атомы Ge распределены статистически и не создают сильных упругих напряжений при концентрации $C_{\text{Ge}} < C_{\text{кр}} = 1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Неоднородные упругие поля, окружающие примесные атомы, начинают перекрываться при критической концентрации $C_{\text{кр}}$, и в кристалле образуется усредненное однородное поле. В случае $C_{\text{Ge}} > C_{\text{кр}}$ образуются комплексы дефектов, создающие высокие локальные напряжения в кристаллической решетке. Возникшие напряжения генерируют дислокации в области $C_{\text{Ge}} \geq 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. С ростом концентрации дефекты кластеризуются, накопленная при этом упругая энергия компенсируется за счет разворота областей кристаллизации относительно друг друга с образованием малоугловых границ. Одиночные атомы Ge вызывают смещения в решетке Si, определяемые величиной деформационного заряда $(1,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-25} \text{ см}^3$ [96].

Таким образом, структурными компонентами твердых растворов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ являются не атомы Ge и Si, а их комплексы и кластеры. Этот факт требует нового подхода к расчетам зонной структуры. Использование традиционных методов дает сле-

дующие результаты. Полная энергия и период решетки кристаллов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ рассчитаны на основе теории псевдопотенциала и приближения виртуального кристалла в [97]. При всех концентрациях рассчитанный период решетки полностью неупорядоченных твердых растворов превышает значения, соответствующие закону Вегарда. Для состава $\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}$ структура типа цинковой обманки оказывается энергетически невыгодной по отношению к неупорядоченной структуре. При низких температурах смесь двух фаз $\text{Ge}_{1-x}+\text{Si}_x$ более стабильна, чем неупорядоченный твердый раствор.

Теоретические зависимости коэффициента линейного расширения и параметра Грюнайзена от состава не линейны, положения экстремумов зависят от температуры [98]. Зонная структура идеального кристалла $\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}$ рассчитана с помощью метода локализованных орбиталей в [99, 100]. Показано, что электроны валентной зоны можно описать, используя короткодействующий потенциал, заимствованный из расчета совершенных кристаллов. Для электронов зоны проводимости существенны эффекты дальнего действия. Результаты расчетов зонной структуры твердых растворов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с использованием кр-метода и линейной аппроксимации концентрационных зависимостей параметров решетки и основных параметров зонной структуры в предположении симметрии решетки группы O_h^7 приведены в работе [101]. Рассчитанное изменение ширины запрещенной зоны содержит излом в области концентраций $x = 0,25$. Для состава $\text{Ge}_{0,5}\text{Si}_{0,5}$ обнаружено 2 минимума зоны проводимости с равной энергией в направлениях $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$.

Экспериментальные результаты, полученные разными авторами, во многом обусловлены способом получения кристаллов. Однако общие тенденции зависимости свойств кристаллов от состава позволяют ввести структурные компоненты, взаимодействие которых различным образом реализуется в соответствии с условиями кристаллизации. Модель взаимодействующих структурных компонентов должна основываться на результатах исследований монокристаллов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с небольшим ин-

тервалом в изменении концентрации, выращенных в одних условиях.

1.4. ПРИМЕСНЫЕ КОМПЛЕКСЫ КРЕМНИЯ В РЕШЕТКЕ ГЕРМАНИЯ

Исследование свойств твердых растворов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ при концентрации кремния $0 \leq x \leq 0,0025$ проведено на образцах, выращенных по Чохральскому, с концентрацией электронов 10^{15} см^{-3} . Образцы имели высокую степень гомогенности, состав определялся с помощью спектрального анализа. Малый интервал в изменении состава позволил обнаружить существование экстремумов в изменении ряда физических параметров.

В [102] были выполнены измерения ширины запрещенной зоны, ее температурного коэффициента и микротвердости. Зависимости ширины запрещенной зоны и её температурного коэффициента от состава имеют разрыв при $x \approx 0,1$ ат. % Si, в изменении микротвердости обнаружен минимум при концентрации кремния 0,1 ат. % (рис. 2).

Наблюдаемые аномалии коррелируют с результатами измерения спин-орбитального расщепления, приведенными в [103, 104]. Измерения спектров электроотражения проводились в интервале энергии 1,8÷2,8 эВ, включающем переходы электронов в направлении $\Lambda-\Lambda$, [103]. Величина спин-орбитального расщепления определялась по расстоянию между пиками E_1 и $E_1+\Delta_1$ спектра электроотражения. На рис. 3 показаны зависимости относительной ширины пиков электроотражения E_1 и $E_1+\Delta_1$ и спин-орбитального расщепления Δ_1 от содержания Si в твердом растворе. Ширина пика измерялась на половине его высоты [104]. Эти зависимости также имеют экстремум при составе $x \approx 0,1$ ат. % Si. Причину появления таких эффектов следует искать в изменении механизмов взаимодействия комплексов. Модель взаимодействующих примесных комплексов построена в [104, 105].

Рассмотрим механизм возмущения валентных связей, приводящий к формированию поляризованных сфер деформации радиуса r_0 . В общем случае двух электронную волновую функцию σ -связи атомов p и q можно представить в виде

$$\Psi_{pq}(1, 2) = \{ \bar{A}_p \bar{\Psi}_{pq}(1) \bar{\Psi}_{pq}(2) + \bar{A}_q \Psi_{qp}(1) \Psi_{qp}(2) + \bar{B} [\bar{\Psi}_{pq}(1) \Psi_{qp}(2) + \bar{\Psi}_{pq}(2) \Psi_{qp}(1)] \} \chi_a(\sigma_1, \sigma_2), \quad (1)$$

$$\bar{A}_p^2 + \bar{A}_q^2 + 2\bar{B} = 1, \quad (2)$$

где \bar{A}_p , \bar{A}_q , \bar{B} – вариационные параметры, определяемые из процедуры минимизации полного гамильтониана системы; $\bar{\Psi}_{pq}(i)$ ($i = 1, 2$) – линейная комбинация невозмущенных sp^3 орбиталей атома p , ориентированная на атом q , ортогонализованная $\Psi_{qp}(i)$; $\Psi_{qp}(i)$ – линейная комбинация невозмущенных sp^3 орбиталей атома q , ориентированная на атом p .

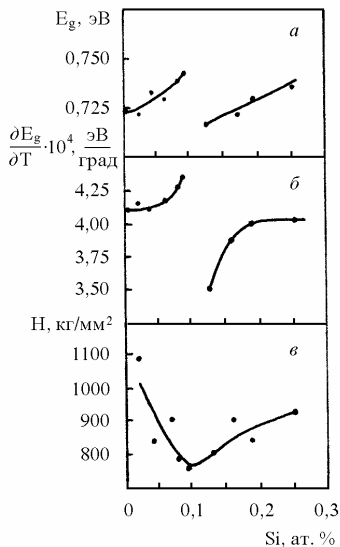


Рис. 2. Зависимость параметров

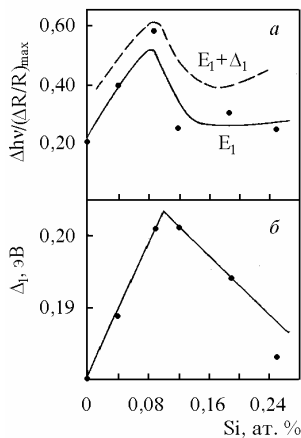


Рис. 3. Концентрационная зави-

твердого раствора $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ от состава [102]: а – ширины запрещенной зоны, $T = 100 \text{ K}$; б – температурного коэффициента ширины запрещенной зоны, $T = 300\text{-}400 \text{ K}$; в – микротвердости, $T = 300 \text{ K}$

симось относительной ширины пиков электроотражения, измеренной на половине высоты $1/2(\Delta R/R)_{\text{max}}$, (а) и спин-орбитального расщепления (б) системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ от состава при $T = 77 \text{ K}$ [104]

Значения параметров \bar{A}_p и \bar{A}_q определяют плотность распределения валентных электронов в окрестности атомов р и q соответственно. Однако отличие этой плотности от плотности электронов соответствующих изолированных атомов эквивалентно тому, что σ -связь образована из $\bar{\Psi}'_{pq}(i)$ и $\Psi'_{qp}(i)$ комбинаций деформированных sp^3 орбиталей. Волновую функцию σ -связи можно записать через $\bar{\Psi}'_{pq}(i)$, $\Psi'_{qp}(i)$ в виде

$$\Psi'_{pq}(1, 2) = \bar{B}' \left[\bar{\Psi}'_{pq}(1) \Psi'_{qp}(2) + \bar{\Psi}'_{pq}(2) \Psi'_{qp}(1) \right] \chi_a(\sigma_1, \sigma_2), \quad (3)$$

$$\bar{\Psi}'_{pq} = \left(1 + \frac{\bar{A}_q^2}{|\bar{B}''|^2} \right)^{-1/2} \left(\bar{\Psi}_{pq} + \frac{\bar{A}_q}{\bar{B}''} \Psi_{qp} \right), \quad (4)$$

$$\Psi'_{qp} = \left(1 + \frac{\bar{A}_p^2}{|\bar{B}''|^2} \right)^{-1/2} \left(\Psi_{qp} + \frac{\bar{A}_p}{\bar{B}''} \Psi_{pq} \right), \quad (5)$$

$$\bar{B}'' = \bar{B} \left(1 + \left(1 - \frac{\bar{A}_p \bar{A}_q}{\bar{B}^2} \right)^{1/2} \right), \quad \bar{B}' = \frac{\left(|\bar{B}''|^2 + \bar{A}_q^2 \right)^{1/2} \left(|\bar{B}''|^2 + \bar{A}_p^2 \right)^{1/2}}{2\bar{B}''}. \quad (6)$$

В случае идеального кристалла параметры \bar{A}_p , \bar{A}_q , \bar{B} одинаковы для каждой связи. Возмущение σ -связи $\Psi'_{pq}(1, 2)$ примесным атомом и изменение эффективных зарядов атомов р и q должны приводить к распространению возмущения в области r_0 . Радиус сферы деформации r_0 определяется степенью возмущения $\Psi'_{pq}(1, 2)$, т.е. изменением параметров \bar{A}_p , \bar{A}_q , \bar{B} и, следовательно, степенью деформации функций $\bar{\Psi}'_{pq}$, Ψ'_{qp} (4, 5), а также

смещением остовов атомов. Энергия ионизации валентных электронов атома Si больше, чем атомов Ge. Радиус локализации невозмущенных $4sp^3$ волновых функций Ge больше, чем $3sp^3$ волновых функций Si. Для образования σ -связи атомы Ge из первой координационной сферы (положение q) примесного атома Si (положение p) смещаются, а их волновые функции вытягиваются в сторону атома Si. В результате примесный атом Si в решетке Ge приобретает отрицательный эффективный заряд, что выражается в увеличении $|\bar{A}_p|$. Поэтому, как следует из (5), образование σ -связи требует значительно большей деформации волновой функции Ψ'_{qp} в сторону атома p в сравнении с соответствующей волновой функцией чистого кристалла Ge. Тогда атомы Ge первой координационной сферы приобретают положительный эффективный заряд. В силу тетраэдрической симметрии валентных связей (следствие их взаимодействия) атомы Ge второй координационной сферы могут приобрести отрицательный эффективный заряд. Этот процесс продолжается вплоть до затухания в пределах деформационной сферы, которая оказывается поляризованной. В пределах этой сферы кристалл становится сфалеритоподобным, и поэтому для его описания целесообразно ввести комплексы GeGe, SiGe, SiSi, а систему записать в виде $(GeGe)_{1-x}(SiGe)_x$.

При выращивании кристалла из расплава ближний порядок и, следовательно, поляризованные сферы r_0 возникают раньше, чем дальний порядок. В силу электронейтральности сферы деформации в целом примесные атомы, находясь на расстоянии $r_{ij} > r_0$, не взаимодействуют. При $r_{ij} < r_0$ энергия их взаимодействия будет отвечать условию генерации сил отталкивания, так как область перекрытия сфер возмущения будет иметь большую величину внутренней энергии. При некоторой концентрации $x = x_1$, когда $r_{ij} = r_0$, наступит концентрационное упорядочение примесных атомов, что соответственно скажется на процессах взаимодействия. Таким образом, взаимодействие поляризованных сфер деформации может приводить к упорядоченному распределению Si в матрице кристалла Ge при малых концентра-

ях Si, что и было отмечено в работах [102–104] при $x \approx 0,001$ ат. ед. Введение поляризованных сфер деформации также позволяет понять возникновение второй фазы упорядочения при $x \approx 0,125$ ат. ед. [33]: это наибольшее значение концентрации, при которой каждый примесный комплекс SiGe окружен только комплексами GeGe.

Предложенная схема образования поляризованной сферы деформации не реализуется, когда атомы Ge являются примесью замещения в кристалле Si. Атомы Si из первой координационной сферы Ge приобретают отрицательный эффективный заряд, но поскольку радиус локализации валентных электронов Ge превышает радиус локализации валентных электронов Si, устойчивая σ -связь образуется без существенной деформации волновых функций $\Psi'_{\text{сп}}$ Si. В этом случае можно считать, что деформация затухает в пределах первой координационной сферы и примесные атомы Ge входят в решетку Si некоррелированно в широком интервале концентраций. Этот факт был отмечен в работе [87]. Расчеты [106] показывают, что при малом содержании Si ($x \leq 0,1$ ат. %) главную роль в рассеянии, обусловленном легированием, играет различие атомных псевдопотенциалов, а роль деформации решетки второстепенна.

На рис. 3,а видно, что при увеличении содержания кремния от 0 до 0,09 ат. % относительная ширина пика электроотражения возрастает, что в первом приближении, согласно соотношению $\Delta E \tau \sim \hbar$, соответствует уменьшению времени релаксации свободных электронов τ . Это логично, так как концентрация рассеивающих центров растет адекватно составу. При $x \approx 0,12$ % ширина пиков становится вновь небольшой и с увеличением концентрации кремния до 0,25 % практически не меняется или слабо возрастает. Такое скачкообразное изменение времени релаксации при монотонном увеличении концентрации примесных состояний атомов кремния можно объяснить только упорядоченным распределением последних при концентрации $x = 0,1$ %.

На рис. 3,б наблюдается заметный рост величины спин-орбитального расщепления, что можно связать с возникновением градиента внутрикристаллического потенциала за счет поляризации решетки примесями. Величина спин-орбитального расщепления может быть представлена выражением [107]

$$\Delta_1 = \frac{2}{3} \left(\frac{3\hbar i}{4m^2 c^2} \right) \left\langle \Lambda_3^{(x)} \left| \frac{\partial V}{\partial X} \hat{P}_Y - \frac{\partial V}{\partial X} \hat{P}_X \right| \Lambda_3^{(y)} \right\rangle, \quad (7)$$

где $\Lambda_3^{(x)}$ и $\Lambda_3^{(y)}$ – волновые функции, определяющие представление. Пренебрегая деформацией исходной матрицы, запишем кристаллический потенциал в виде

$$V(\vec{r}) = V_0(\vec{r}) + \sum_{\vec{p}} \int \frac{Q(\vec{r}' - \vec{p})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' + \sum_{\vec{q}} \int \frac{Q(\vec{r}' - \vec{q})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r', \quad (8)$$

где $V_0(\vec{r})$ – невозмущенный кристаллический потенциал; $Q(\vec{r}' - \vec{p})$ и $Q(\vec{r}' - \vec{q})$ – дополнительная плотность, возникшая вокруг атомов за счет поляризации связей, \vec{p} и \vec{q} – радиус-векторы атомов, несущих соответственно отрицательный и положительный эффективный заряды.

Подставив (8) в (7), выделив слагаемые, содержащие производные от дополнительных вкладов в кристаллический потенциал (8), и пренебрегая слагаемыми второго порядка малости, обусловленными деформацией волновых функций, из величины спин-орбитального расщепления можно выделить часть, соответствующую вкладам атомов с несимметричным распределением дополнительной плотности заряда. Если интересующие нас атомы составляют $P(x)$ -часть от всех атомов кристалла, то спин-орбитальное расщепление системы можно представить в виде

$$\Delta_1 = \Delta_{01} + \delta\Delta_1 P(x), \quad (9)$$

где Δ_{01} – спин-орбитальное расщепление чистого кристалла германия; $\delta\Delta_1$ – усредненный дополнительный вклад от атомов из $P(x)$. При малых концентрациях $x \leq x_m$ сферы поляризации занимают часть объема $P(x) = 4/3\pi r_0^3 N \cdot x$ (N – концентрация атомов в решетке Ge). При упорядочении, если исключить из этого случая перекрытие сфер поляризации, $P(x_1) = 4/3\pi r_0^3 N \cdot x_1$. В слу-

чае концентраций $x > x_m$ градиент потенциала поляризации уменьшается в областях перекрытия, тогда, исключая их, для $x > x_m$ получим

$$P(x) = 4/3\pi r_0^3 N \cdot x_1 - \Delta V \cdot N \cdot (x - x_1). \quad (10)$$

Линейная зависимость Δ_1 от x при $x \leq x_1$ (9) и при $x > x_1$ (10) указывает на существование экстремума, который наблюдается на рис. 3б. При значениях параметров $\delta\Delta_1 \approx 4,45 \cdot 10^{-2}$ эВ и $\Delta V = (2a)^3$ (где a – период кристаллической решетки сплава) рассчитанные кривые удовлетворительно аппроксимируют экспериментальные результаты, а состав фазы упорядочения $x_1 = 0,1$ ат. % позволяет оценить величину $r_0 = 2,5a$, что для периода решетки упорядочения $2r_0 = 5a$ дает значение, выражаемое через целое число периодов матрицы кристалла.

Традиционные методы расчета электронной структуры тетраэдрических полупроводников с изовалентными примесями при рассмотрении поляризации атомов, окружающих примесь, не учитывают всех особенностей этого явления. Анализ 9 упорядоченных состояний ТПП $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с использованием методов функционала плотности и псевдопотенциала показал, что среди них нет термодинамически стабильных, ионность связи Si-Ge очень мала и не зависит от концентрации и химического окружения [108]. В методе расчета узельных центров, разработанном в работе [109], плотность электронов на связях в пределах как первой, так и второй координационных сфер смещена в сторону примесного атома Si, что может быть следствием приближенного подхода к вычислению взаимодействия между валентными связями. В работе [110] для моделирования структуры ТПП $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ использована элементарная ячейка типа цинковой обманки. Показано, что длины связей отличаются от полученных в приближении виртуального кристалла и зависят от атомного состава, но не от конфигурации атомов; на деформационную энергию влияет атомная конфигурация, ее уменьшению способствует чередующееся расположение атомов Si и Ge.

Исходя из рассмотренного ранее примера образования ковалентных связей в системе Ge-Si, можно сформулировать условия образования примесных состояний, включающих поляри-

зованную сферу деформаций, и возникновения фазы упорядочения примесных комплексов, обусловленной их взаимодействием [7, 105].

Примесный комплекс образуется атомом замещения в окружении только из атомов исходного кристалла. При этом если энергия и радиус локализации валентных электронов замещающего атома меньше энергии и радиуса локализации валентных электронов собственных атомов, возмущение валентных связей выходит за пределы координационной сферы примесного атома, в результате образуется поляризованная сфера деформации радиусом r_0 , охватывающая несколько ближайших соседей. Размеры деформированной области можно оценить, полагая, что увеличение энергии кристалла вследствие деформации поляризованной области компенсирует ее уменьшение, обусловленное разностью энергий валентных электронов замещающего и замещаемого атомов. Это означает, что примесные комплексы не вызывают увеличения термодинамического потенциала, т.е. находятся в равновесии с кристаллической решеткой.

В общем случае вектор смещений, созданных сферически симметричным дефектом в упругой среде, определяется выражением [111]

$$\bar{u}(\bar{r}) = C_1 \frac{\bar{r}}{r^3} + C_2 \bar{r}. \quad (11)$$

На больших расстояниях от сферического дефекта тензор упругой деформации убывает по степенному закону $e_{ij}(\mathbf{r}) \sim r^{-3}$, а на малых расстояниях от центра – $e_{ij}(\mathbf{r}) \sim \text{const}$. В пределах поляризованной сферы деформации подразумеваются малые расстояния, тогда

$$e_{ij} = \delta_{ij} \frac{(r_n - r_c)}{r_0} \quad \text{при } r < r_0, \quad (12)$$

где r_n и r_c – радиусы локализации валентных электронов замещающего и замещаемого атомов соответственно. Плотность энергии упругой деформации

$$u_e = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1,6} C_{ij} e_i e_j, \quad (13)$$

где C_{ij} – упругие постоянные кристалла; e_i – элементы переобораченной матрицы тензора деформации [112]. Проинтегрируем $u_e(r)$ по объему сферы деформации:

$$U_{0e} = 2\pi(C_{11} + 2C_{12})(r_n - r_c)^2 r_0. \quad (14)$$

Приравняем U_{0e} разности энергий потенциалов ионизации замещающего и замещаемого атомов $V_n - V_c$, найдем радиус сферы деформации:

$$r_0 = \frac{V_n - V_c}{2\pi(C_{11} + 2C_{12})(r_n - r_c)^2}. \quad (15)$$

Используя значения упругих состояний $C_{11} = 12,85 \text{ дин}\cdot\text{см}^{-2}$, $C_{12} = 4,82 \text{ дин}\cdot\text{см}^{-2}$ и периода решетки Ge $a = 5,657 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ [113], значения потенциалов ионизации $V_n = 8,149 \text{ эВ}$, $V_c = 7,88 \text{ эВ}$ и атомных радиусов $r_n = 1,18 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $r_c = 1,22 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ [114], по формуле (15) получим для комплексов, образованных кремнием SiGe в системе $(\text{GeGe})_{1-x}(\text{SiGe})_x$, $r_0 = 2,2a$.

Примечание [n1]:

Примечание [n2]:

Граница поляризованной сферы деформации может быть размыта, чтобы учесть этот факт в [105] предполагался экспоненциальный спад тензора деформации:

$$e_{ij} = \delta_{ij} \frac{(r_n - r_c)}{r_0} \exp\left\{-\frac{r}{r_0}\right\}, \quad (16)$$

Интегрируя $u_e(r)$ (13) с e_i (16) по всему объему и приравнивая результат к величине $V_n - V_c$, получим

$$r_0 = \frac{V_n - V_c}{\frac{\pi}{2}(3C_{11} + 6C_{12})(r_n - r_c)^2}. \quad (17)$$

Расчет по формуле (17) дает $r_0 = 2,87a$.

Найденная величина r_0 разумно согласуется с оценкой $r_0 = 2,5a$, полученной с помощью значения концентрации Si в фазе упорядочения $x_1 = 0,1 \text{ ат. \%}$. В работе [105] по формуле (17) рассчитаны значения радиусов деформации примесных комплексов InCd в ТПИ $(\text{InAs})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ и $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$, ко-

торые находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными периодами упорядочения примесных комплексов в рассмотренных системах.

При составах, больших x_1 , поляризованные сферы g_0 перекрываются существенно, примесные комплексы непосредственно взаимодействуют друг с другом. Таким образом, наблюдаемый критический состав 0,1 ат. % Si разделяет два состояния вещества с примесями, не взаимодействующими друг с другом (область слабых примесных растворов), и со взаимодействующими примесями.

В областях перекрытия сфер деформации потенциальная энергия кристалла увеличивается. С ростом концентрации возрастает вероятность попадания атома Si в поляризованную область, образованную соседним с ним атомом Si. В этом случае энергетически выгодным оказывается формирование новых комплексов, образующих кластеры, которые проявляют себя как новые компоненты системы.

Иная ситуация наблюдается в кристаллах Si с изовалентной примесью Ge. Термодинамический потенциал в окрестности такого дефекта возрастает вследствие увеличения энергии валентных электронов и энергии деформации решетки, поэтому примесные комплексы со специфическими свойствами в данном случае не образуются. Атомы Ge взаимодействуют друг с другом за счет перекрытия создаваемых ими полей напряжения [95]. При концентрации $C_{Ge} = 1,2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ или 0,24 ат. % Ge возможно упорядочение примесей. Однако эта фаза не является равновесной, так как не обеспечивает минимума термодинамического потенциала. Поэтому атомы Ge активно взаимодействуют со структурными дефектами, компенсирующими напряжение в кристалле.

Процессы, связанные со взаимодействием германия с дефектами в кислородсодержащем кремнии, исследовались в работах [115 – 128] с целью улучшения рекомбинационных и электрофизических характеристик материала, а также снижения степени деградации полупроводниковых приборов в процессе эксплуатации. Неоднородность состава твердых растворов

кремния с германием порождает атомные перестройки [129]. Влияние Ge на энергетические состояния акцепторов в Si изучалось в работах [130, 131], а доноров – в [132 – 134].

Фазовые переходы наблюдались в кристаллах кремния, например, магнитное упорядочение кислородсодержащих термодоноров [135], структурные перестройки при повышении температуры [136].

1.5. СОБСТВЕННЫЕ КОМПЛЕКСЫ КРЕМНИЯ В РЕШЕТКЕ ГЕРМАНИЯ

В области гомогенности твердых растворов не рассматриваются кластеры, образованные двухатомными комплексами SiSi, поскольку при некогерентном взаимодействии это означало бы выделение фазы кремния. Объединение двухатомных комплексов GeSi в кластер с расстоянием между атомами кремния $a/\sqrt{2}$ соответствует образованию неустойчивого соединения $Ge_{0,5}Si_{0,5}$. Следующее возможное расстояние между атомами Si в решетке равно a . При этом элементарная ячейка имеет структуру 3GeGe1GeSi. Подобную структуру следует рассматривать как упорядоченный твердый раствор компонентов GeGe и GeSi. Структурный компонент 3GeGe1GeSi, формирующий собственную фазу упорядочения, проявляющуюся как сингулярность свойств системы Ge-Si, назовем собственным комплексом.

Собственные комплексы, образующие кластеры, в твердом растворе $Ge_{1-x}Si_x$ представляют выделение новой фазы, т.е. система оказывается гетерогенной. Для расчета изменения термодинамического потенциала при образовании кластера из N собственных комплексов в работе [7] использовалась модель сферического выделения в приближении изотропного континуума [137]:

$$\Delta\Phi = -\Delta U \cdot N + U_c + A. \quad (18)$$

Слагаемые, входящие в уравнение (18), соответствуют изменению энергии валентных электронов, вкладу упругой энергии, поверхностной энергии при образовании гетерограницы.

Найдем энергию упругой деформации, создаваемую кластером в кристалле. Относительное изменение периода решетки в изолированном кластере (ядро деформации)

$$\delta_1 = 1/8(a_{Si} - a_{Ge})/a_{Ge},$$

при этом не учитывается отклонение от прямой Вегарда. Используя выражение (11) и условия равновесия на поверхности совмещения и внешней поверхности (рис. 4), радиальные смещения можно представить в виде [137]

$$u_2(r) = A_2 r \quad \text{при } r \leq R_2, \quad u_{1r}(r) = A_1 r + B_1/r^2 \quad \text{при } R_1 \leq r \leq R_0, \quad (19)$$

$$A_1 = \frac{2R_1^3(R_2 - R_1)(1 - 2\nu)}{Q(1 + \nu)}, \quad (20)$$

$$A_2 = \frac{2(R_0^3 - R_1^3)(R_1 - R_2)(1 - 2\nu)}{Q(1 + \nu)}, \quad (21)$$

$$B_1 = \frac{2R_0^3R_1^3(R_2 - R_1)}{Q}, \quad (22)$$

$$Q = R_0^3R_1 + 2\frac{(1 - 2\nu)}{(1 + \nu)}[(R_1 - R_2)R_1^3 + R_0^3R_2], \quad (23)$$

где $\nu = C_{12}/(C_{11} + C_{12})$ – коэффициент Пуассона. Для кластера в бесконечной среде предельный переход $R_0 \rightarrow \infty$ в формулах (20 – 23) дает $A_1 = 0$,

$$A_2 = -\frac{2B_1(1 - 2\nu)}{R_1^3(1 + \nu)}, \quad (24)$$

$$B_1 = \frac{R_1^3(R_2 - R_1)}{R_1 + \frac{2(1 - 2\nu)}{(1 + \nu)}R_2}. \quad (25)$$

С помощью (19, 24, 25) смещения относительно беспримесного кристалла Ge с точностью до величин порядка δ_1 запишем в виде

$$\bar{u}_2(\vec{r}) = (\delta_1 + A_2)\vec{r} \quad \text{при } r \leq R_1, \quad (26)$$

$$\bar{u}_1(\vec{r}) = B_1 \frac{\vec{r}}{r^3} \quad \text{при } R_1 \leq r. \quad (27)$$

Используя (13, 26, 27), получим энергию упругой деформации:

$$U_e = [3/2 - (C_{11} - C_{12})/C_{11}] \cdot (C_{11} + 2C_{12}) a^3 \cdot \delta_1^2 \cdot N. \quad (28)$$

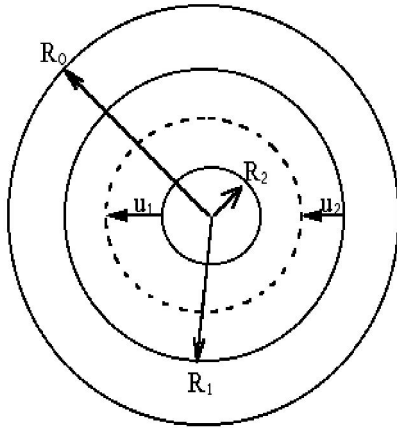


Рис. 4. Схема совмещения поверхностей для сферического дефекта: R_0 – радиус внешней границы среды; R_1 – радиус поры; R_2 – радиус ядра; u_0 – радиальное смещение поверхности ядра; u_2 – радиальное смещение внутренней поверхности оболочки

элементарной ячейки в кластере равно ΔU . Тогда средняя сила, действующая со стороны объема на поверхностную элементарную ячейку кластера, $F \sim \Delta U/a$, а коэффициент поверхностного натяжения – $\alpha \sim F/a$. В этом случае поверхностная энергия кластера с радиусом R

$$A \approx \alpha 4\pi R^2 \approx \Delta U (4\pi)^{1/3} (3N)^{2/3}. \quad (29)$$

Кластер будет устойчивым, если выполняется условие $\partial \Delta \Phi / \partial N < 0$. Критическое число атомов в зародыше кластера N_k определяется из уравнения

$$\left. \frac{\partial \Delta \Phi}{\partial N} \right|_{N_k} = 0. \quad (30)$$

Используя выражения (17, 28–30), для твердого раствора $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ получим $N_k \approx 39$. Таким образом, кластер устойчив при $N \geq 39$. Однако если $\Delta \Phi < 0$, атомы Ge диффундируют в область с меньшим термодинамическим потенциалом и кластер распадается на более мелкие кластеры. Уравнение $\Delta \Phi = 0$ дает равновесное значение $N_p = 132$. Следовательно, кластеры могут держать от 39 до 132 атомов Si [7].

Увеличение концентрации кремния приводит к образованию и росту рассматриваемых кластеров. При концентрации кремния $x = 12,5$ ат. % фаза собственных комплексов заполняет весь объем, образуется гомогенная фаза с составом $3\text{GeGe}_1\text{GeSi}_1$, соответствующая упорядочению собственных комплексов. Она разрушается при концентрации $x > 12,5$ ат. % Si. При этом следует ожидать образования комплексов SiSi_1 .

Для образования как собственных, так и примесных комплексов существенно, что энергия валентных электронов атомов кремния меньше, чем атомов германия, и в равновесии изменение термодинамического потенциала $\Delta\Phi = 0$. Подобные структурные компоненты не образуются в твердых растворах со стороны кремния, кристаллы при малой концентрации Ge оказываются однородными, с увеличением содержания Ge возрастает несовершенство структуры.

Теория процессов кластеризации развивалась авторами работ [138–142]. Наноразмерные атомные кластеры в полупроводниках открывают новые возможности для формирования свойств материалов [143].

Для получения монокристаллов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ высокой степени гомогенности с концентрацией Si до 16 ат. % была использована низкотемпературная методика [4], исключая взаимодействие при температуре выше солидуса равновесной фазовой диаграммы. Образцы выращивали из слоя расплава, постоянно подпитываемого транспортом вещества через газовую фазу от предварительно синтезированного поликристаллического слитка сплава заданной концентрации. Процесс роста образца и транспорт вещества контролировали скоростью движения ампулы ($0,2 \div 0,8$ мм/ч).

На этих образцах проведены разнообразные исследования [32], результаты которых представлены на рис. 5–7. Измерения периода решетки проводились методом асимметричной съемки на медном K_α -излучении. Все рентгенограммы имели четкие линии и низкий уровень фона диффузного рассеяния, что свидетельствует о высокой степени гомогенности кристаллов. Концентрационная зависимость периода кристаллической решетки

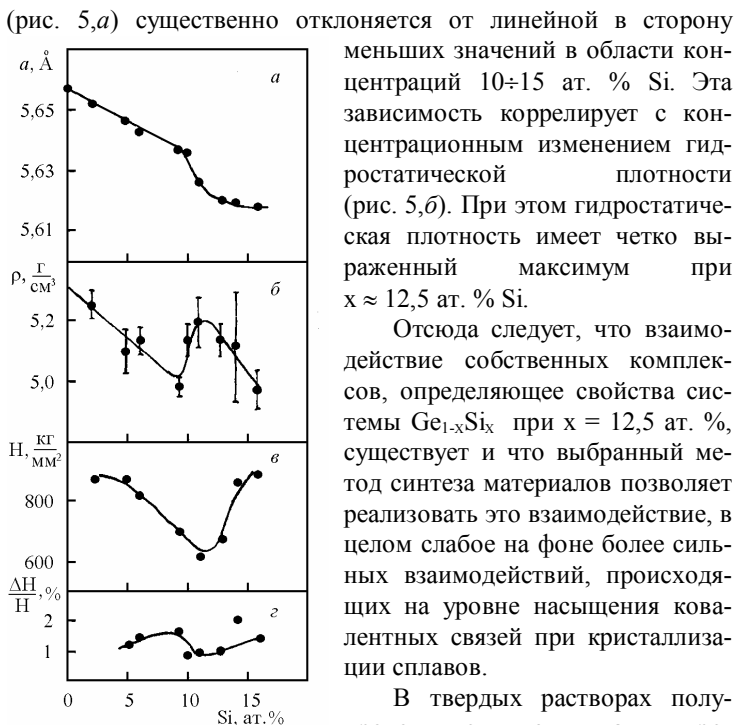


Рис. 5. Зависимость параметров твердого раствора $Ge_{1-x}Si_x$ от состава, $T = 300$ К: *a* – период кристаллической решетки; *б* – гидростатическая плотность; *в* – микротвердость; *г* – погрешность микротвердости

Чувствительным параметром, характеризующим силы химической связи и совершенство кристаллической структуры, является микротвердость, измеренная по площади отпечатка, оставляемого четырехгранной алмазной пирамидой, внедрен-

ной в материал под действием заданной нагрузки. При этом разрушение связей происходит по площадям граней внедренной пирамиды, а объем вещества вытесняется путем пластической деформации кристалла, зависящей от упорядочения внутренней структуры, от примесей и дислокаций в кристалле. В идеальной структуре скольжение дислокаций происходит при наличии минимального возмущения. Любой посторонний дефект, “рекомбинируя” с дислокацией, создает препятствие для ее дальнейшего перемещения. Поэтому при прочих равных условиях образцы, в которых внутренняя структура более упорядочена, будут иметь меньшую микротвердость.

Измерения микротвердости проводились на тех же образцах, на которых измерялся период кристаллической решетки. Эксперимент проведен дважды и дал воспроизводимые результаты. Погрешность измерений, рассчитанная по Корнфельду, не превышала 2 %. Малое значение погрешности – еще одно следствие оригинальной методики получения гомогенных образцов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, разработанной в работе [4].

Исходя из сказанного, ход зависимости микротвердости (рис. 5,в) свидетельствует о существовании упорядочения при критической концентрации $x = 12,5$ ат. % Si. Погрешность, оцененная по разбросу значений микротвердости (рис. 5,г), оказалась наименьшей для образцов с составом, близким к фазе упорядочения. Таким образом, гомогенность упорядоченных образцов выше.

Сделанный вывод подтверждают изменения полос решеточного поглощения системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с составом (рис. 6). Интенсивность полосы поглощения фоновых колебаний комплекса GeSi по отношению к интенсивности фоновой полосы LO + LA германия растет до концентрации фазового перехода $x_2 \approx 12,5$ ат. % Si и затем медленно снижается. Разностные кривые поглощения “исследуемый твердый раствор – чистый германий” свидетельствуют о том, что в материалах с содержанием кремния 13 ат. % и более имеется одна слабая полоса поглощения с максимумом около 590 см^{-1} , которая, вероятно, связана со сложными агрегатами.

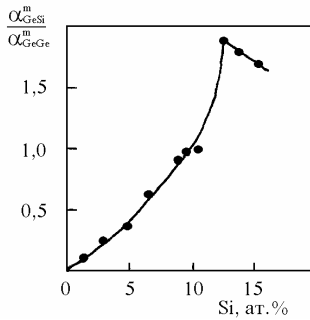


Рис. 6. Отношение интенсивности полосы поглощения колебаний изолированных атомов кремния в решетке к фоновой полосе

свойств идеальных твердых растворов Ge-Si. Поэтому расчеты, основанные на использовании псевдопотенциалов идеальных кристаллов германия и кремния, описывают структуру реальных кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$ не полностью.

В твердых растворах $Ge_{1-x}Si_x$ атомы замещения кремния образуют примесные и собственные комплексы с атомами германия.

Рассмотренные примесные комплексы атомов Si в решетке Ge являются не точечными, а объемными дефектами. Поляризация сферы деформации обусловлена возмущением валентных связей и образованием разноименных эффективных зарядов на атомах Ge, поэтому в пределах данной сферы решетка частично приобретает свойства структуры сфалерита. Поляризация и упругая деформация взаимосвязаны и быстро затухают на расстояниях $r > r_0$. Существенное влияние на энергетическую структуру при малых концентрациях примеси области упругой деформации, образующейся вследствие различия тетраэдрических радиусов акцепторов и замещаемых ими атомов в кристалле Si, убедительно показано в работе [144]. Полученные оценки ра-

Существование фазы упорядочения собственных комплексов должно проявляться и в изменении зонных параметров. На рис. 7 приведены энергии межзонных переходов, измеренные по спектрам пропускания и электроотражения. Аномалии зависимостей проявляются в надлинейном увеличении энергии в области упорядочения.

Примесные и собственные комплексы являются новыми структурными компонентами. Их электронные свойства существенно отличаются от

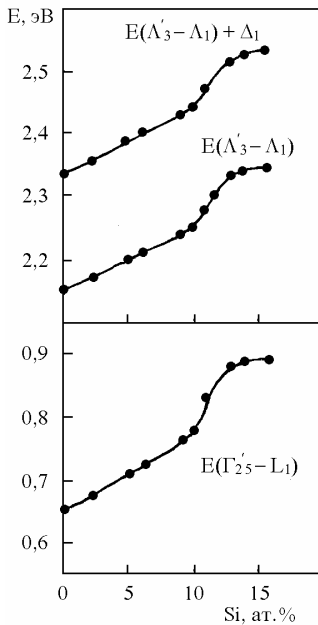


Рис. 7. Зависимость энергий межзонных переходов от состава твердого раствора $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, $T = 300 \text{ K}$

диуса упругой деформации $r_e > 10 \div 30 \text{ \AA}$ согласуются со значением $r_0 \approx 2,87 a = 16 \text{ \AA}$. Объем, заключенный в сфере радиуса r_0 , составляет $1,7 \cdot 10^{-20} \text{ см}^3$, что коррелирует с объемом деформации ряда изovalентных примесей [145].

Конфигурационное взаимодействие примесных комплексов обуславливает фазу упорядочения при критической концентрации $x_1 = 0,1 \text{ ат. \% Si}$, которая разделяет области не взаимодействующих при $x < x_1$ и взаимодействующих при $x > x_1$ примесных состояний.

Поляризация, появившаяся в примесном комплексе, наследуется собственными комплексами и становится более равномерной в пределах кластера из собственных комплексов. Найденное число атомов Si в кластере $39 \leq N \leq 132$ соответствует вы-

водам работы [86], где структура кластера не рассматривалась. При критической концентрации $x_2 = 12,5 \text{ ат. \% Si}$, соответствующей фазе упорядочения собственных комплексов, весь объем кристалла оказывается поляризованным. Поляризация может иметь непрерывный или доменный характер, что соответствует полному упорядочению или образованию ряда областей упорядочения. Изучение эффекта поляризации и влияние его на свойства некоторых твердых растворов полупроводников с изovalентным замещением – актуальная проблема физики полупроводников. Влияние упругого взаимодействия изovalентных

примесей замещения и точечных структурных дефектов на формирование свойств кристаллов рассмотрено в работе [145]. Взаимодействие поляризованных областей деформации и точечных структурных дефектов – сложный эффект, принципиально меняющий структуру поляризованной области. Так, при концентрации вакансий $N_v > V^{-1} = 5,8 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ следует ожидать перераспределения эффективных зарядов и нарушения поляризации примесных комплексов. Это явление требует теоретического и экспериментального изучения.

Взаимодействие примесей приводит к образованию собственных комплексов, которые участвуют во взаимодействии как новый компонент системы. Поэтому получению устойчивых процессов кристаллизации препятствует наличие новых степеней свободы в процессе роста. Только с помощью низкотемпературной методики удалось получить гомогенные кристаллы и реализовать взаимодействие собственных комплексов, которые образуют фазу с высокой степенью порядка при концентрации $x_2 = 12,5 \text{ ат. \% Si}$. При концентрации $x > x_2$, по-видимому, происходит образование компонентов SiSi. Таким образом, очевидно, что фазовые превращения, вызываемые образованием новых компонентов, сопровождаются формированием когерентных и некогерентных границ. Первые представляют собой плавные переходы структурно- и связеподобных областей без разрыва ковалентных связей, т.е. принципиально не нарушают структуры и монокристалличности. Вторые за счет большей разницы связей создают потенциал возмущения, который приводит к разрывам связей и формированию межкристаллитной границы.

В твердых растворах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, в первом приближении непрерывных во всей области составов, некогерентные фазы приводят к распаду сплавов, но эта область равновесия находится при составах, когда концентрация кремния $x > 0,5$ и температура солидуса выше температуры раслаивания. Поэтому при непрерывной кристаллизации образуются квазиравновесные системы непрерывных твердых растворов. При равновесной кристаллизации появляется возможность реализации дополнительного взаимодействия структурных компонентов системы (реализация

взаимодействия комплексов в матрице кристалла) и возникновения гетерогенных границ, которые разделяют фазы упорядочения компонентов, формируют микроструктуру поликристаллических слитков или, по крайней мере, стимулируют некогерентные зародыши – источники поликристаллической структуры.

Схемы, в которых процесс роста может происходить при существенно более низких температурах, чем температура солидуса, по-видимому, способны реализовать и слабое межатомное взаимодействие. В области примесного конфигурационного взаимодействия эти процессы протекают при кристаллизации из расплава, поскольку германий является относительно низкотемпературным элементом. Собственные комплексы вида GeSi взаимодействуют друг с другом в матрице кристалла с образованием собственной фазы 3GeGe1GeSi при температуре более низкой, чем солидус системы (при необходимом росте концентрации кремния температура солидуса возрастает). Комплексы SiSi, вероятность образования которых меньше, чем комплексов GeSi, обладают энергией связи с температурой активации равной или большей, чем солидус при данном составе. По-видимому, кластеры таких комплексов и будут источниками некогерентной кристаллизации сплавов.

Наличие атомного упорядочения в эпитаксиальных монокристаллических пленках сплавов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с $0,2 < x < 0,5$ толщиной 1 мкм подтверждено методом ПЭМ [146]. Упорядочение заключалось в удвоении вектора трансляции в направлении $\langle 111 \rangle$, что связано со слабо выраженным правильным чередованием атомов Si и Ge в этом направлении. Расчеты энергетических характеристик образования Si-Ge сверхрешеток в эпитаксиальных пленках выполнены с использованием метода псевдопотенциала в [147].

Рассмотренные взаимодействия в системе Ge-Si с образованием примесных и собственных структурных компонентов носят фундаментальный характер, так как аналогичные эффекты наблюдались в сильно легированных полупроводниковых соединениях типа A^3B^5 [148 – 150], A^2B^6 [151], в твердых раство-

рах $A^3V^5-A^2V^6$ [34, 52, 103, 152, 153] и в полупроводниковых системах, составляющих структуру гетеролазеров. Взаимодействие изовалентных примесей в соединениях A^3V^5 создает предпосылки снижения плотности дислокаций [154].

В бинарных соединениях с различным парциальным давлением компонентов образуются равновесные вакансии, которые наряду с комплексами соединения, например A^3V^5 , образуют комплексы типа $A^3V_B^5$. При легировании атомами, замещающими позиции V^5 (например V^6), будут стимулироваться условия генерации комплексов $V_A^3V^5$. Таким образом, система твердых растворов легирования, традиционно рассматриваемая по разрезу $A^3V^5 + V^6$ или $A^3V^5 + A^3V^6$ как бинарная система, будет иметь значительно большее число собственных компонентов, которые образуются при взаимодействии комплексов: A^3V^5 , $V_A^3V^5$, $A^3V_B^5$, A^3V^6 [155]. Например, в арсениде галлия может возникать взаимодействие, приводящее к упорядочению типа $3GaV^61V_{Ga}As$. Комплексы такой фазы упорядочения тоже должны рассматриваться как компоненты системы. Аналогичные процессы могут происходить и в других соединениях. Так, в монокристаллах $Gd_{0,8}Se$ экспериментально обнаружено упорядочение вакансий, занимающих узлы Gd [156].

Сложность детального взаимодействия при переходе к системам $A^3V^5-A^2V^6$ еще более возрастает, но принцип конфигурационного взаимодействия и образования фаз упорядочения сохраняется и позволяет уверенно интерпретировать большинство из наблюдаемых свойств концентрационных зависимостей твердых растворов [34, 52]. Однако имеющиеся материалы по рассматриваемым взаимодействиям в системах типа $A^3V^5-A^3V^6$, $A^3V^5-A^2V^6$ содержат достаточно особенностей и фактов, понимание которых неоднозначно. Систематизация этого материала поможет определить задачи дальнейших исследований проблемы взаимодействия, приводящего к упорядочению структурных компонентов.

Для объяснения образования последовательности упорядоченных и разупорядоченных структур в процессе кристаллизации предложена теория равновесной сомоорганизации [157].

Важность предложенного подхода заключается в возможности его применения при анализе взаимодействия в системах соединений другого класса, в частности, кислородсодержащих соединений. В работах [158, 159] рассмотрены некоторые системы, содержащие фазы со структурой силленитов ($\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-ZnO}$, с типичной силленитной фазой $\text{Bi}_{12}\text{ZnO}_{20}$), и обнаружены силленитоподобные фазы, возникающие при составах компонентов, образующих отношение комплексов 1:3 и 3:1, при которых формируются однородные полиэдры фазы конфигурационного упорядочения. С этой точки зрения целесообразно рассмотреть и другие кислородсодержащие системы типа гранатов, перовскитов и т. д., что актуально в связи с их широким практическим использованием.

2. ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ТИПА $A^3B^5-B^6$ СО СВЕРХРЕШЕТКОЙ ИЗ ДОНОРНЫХ АТОМОВ

Под сверхрешетками в различных соединениях подразумевают структуры, содержащие неоднородности следующих типов: слоистопериодические структуры, сплавы с пространственным упорядочением атомов, зарядовоупорядоченные системы. Обзор современного состояния физики сверхрешеток, образованных периодически расположенными гетероструктурами с квантовыми ямами, проведен в работе [160]. Электронные свойства таких структур с периодом, во много раз превышающим период решетки, определяются расщеплением зоны проводимости в одномерном потенциале, в сверхтонких квантовых ямах электроны образуют двумерную квантовую систему. В соединениях, характеризующихся наличием узкой энергетической зоны проводимости, при определенных условиях реализуются зарядовоупорядоченные состояния. Такими веществами являются диалкогениды металлов, интерметаллические соединения, квазиодномерные органические комплексы переменной валентности, соединения редкоземельных металлов и др. [161]. Теория электронных фазовых переходов в зарядовоупорядоченных системах развита в работах [162 – 164]. Влияние ближнего и дальнего упорядочений на энергетический спектр и электропроводность металлических сплавов исследовано теоретически [165]. С помощью метода, основанного на кластерном перерасложении бесконечного ряда для Т-матрицы рассеяния электрона, показано, что поведение электропроводности сплава при упорядочении существенно зависит от положения уровня Ферми по отношению к щели в энергетическом спектре электронов, возникающей при установлении дальнего порядка. В [165] дан обзор результатов теоретических исследований влияния упорядочения на свойства металлических сплавов, полученных с помощью приближения когерентного потенциала. Полупроводники с упорядоченными примесными центрами, являющимися резонансными

нансными донорами с энергией электронного уровня выше дна зоны проводимости, рассмотрены в [166]. В таких системах ряд переходит с центра на центр за счет конечной ширины резонансного уровня, а расположение ионизированных примесей оказывается коррелированным в пространстве из-за кулоновского отталкивания между ними. При этом заряды стремятся образовать вигнеровскую решетку на отрицательном фоне электронов. Данная ситуация реализуется в твердых растворах HgFeSe, где роль резонансных доноров играют примесные центры железа.

В разделе 2 рассматриваются сверхрешетки в сильно легированных полупроводниках, образованные донорами, создающими мелкие энергетические уровни в запрещенной зоне. Фазы упорядочения доноров в системах $A^3B^5-B^6$ обнаружены и исследованы в работах [149, 150, 155]. В этом случае к валентному и упругому взаимодействиям примесных атомов добавляется кулоновское. Изменение зонной структуры вследствие образования сверхрешетки “мелких” доноров в твердых растворах полупроводников типа $A^3B^5_{(1-x)}B^6_x$ рассчитано с помощью методов квантовой теории поля и квантовой статистики в [167].

Применению квантовополевых и квантостатистических методов в теории твердого тела посвящены монографии [168–170]. Квантово-электродинамическая теория твердого тела развита в работах [171, 172], она использовалась для расчета параметров ОЦК кристаллов лития.

2.1. ФУНКЦИИ ГРИНА

Рассмотрим полупроводниковые твердые растворы типа $A^3B^5-B^6$ при условии сильного легирования $n^{1/3}a_B \gg 1$ (n – концентрация компонента B^6 , a_B – эффективный боровский радиус). Донорные атомы, являющиеся примесями замещения, образуют сверхрешетку в матрице кристалла. Выделим систему взаимодействующих электронов, не образующих валентные связи, и остовов донорных атомов. Опишем данную электронную

систему, используя методы квантовой теории поля и квантовой статистики [168]. Оператор Гамильтона электронной подсистемы представим в следующем виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{x} a_{\alpha}^{+}(\vec{x}) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + U_L(\vec{x}) + U_0(\vec{x}) \right\} a_{\alpha}(\vec{x}) + \\ & + \frac{1}{2} \int d\vec{x} d\vec{x}' a_{\beta}^{+}(\vec{x}) a_{\alpha}^{+}(\vec{x}') V_c(\vec{x} - \vec{x}') a_{\alpha}(\vec{x}') a_{\beta}(\vec{x}), \end{aligned} \quad (31)$$

где $a_{\alpha}^{+}(\vec{x})$, $a_{\alpha}(\vec{x})$ – операторы рождения и уничтожения электронов в спиновом состоянии α соответственно; $U_L(\vec{x})$ – потенциальная энергия электрона в идеальном кристалле; $U_0(\vec{x})$ – потенциальная энергия возмущения, созданная остовами примесных атомов; $V_c(\vec{x} - \vec{x}')$ – кулоновская энергия взаимодействия двух электронов. По повторяющимся индексам α , β выполняется суммирование. Если пределы интегрирования не указаны, то подразумевается интегрирование по всей области определения переменной интегрирования. Оператор числа частиц имеет вид

$$\hat{N} = \int d\vec{x} a_{\alpha}^{+}(\vec{x}) a_{\alpha}(\vec{x}). \quad (32)$$

Перейдем к представлению Гейзенберга для операторов рождения и уничтожения с помощью соотношения

$$\hat{f}(t) = \exp\left\{\frac{i\hat{H}'t}{\hbar}\right\} \hat{f} \exp\left\{-\frac{i\hat{H}'t}{\hbar}\right\}, \quad (33)$$

$$\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}, \quad (34)$$

где μ – химический потенциал. Операторы рождения и уничтожения в представлении Гейзенберга подчиняются антикоммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [a_{\alpha}^{+}(\vec{x}, t) a_{\beta}(\vec{x}', t)]_{+} &= \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad [a_{\alpha}^{+}(\vec{x}, t) a_{\beta}^{+}(\vec{x}', t)]_{+} = 0, \\ [a_{\alpha}(\vec{x}, t) a_{\beta}(\vec{x}', t)]_{+} &= 0 \end{aligned} \quad (35)$$

и изменяются во времени согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{f}(\vec{x}, t) = [\hat{f}(\vec{x}, t), \hat{H}']_{-}. \quad (36)$$

Усреднение операторов по состояниям квантовой системы

$$\langle \hat{f} \rangle = \text{Sp}(\hat{\rho} \hat{f}) \quad (37)$$

проводится с помощью матрицы плотности, оператор которой имеет вид

$$\hat{\rho} = \exp\{\beta(\Omega - \hat{H}')\}, \quad (38)$$

где Sp берется по состояниям с различными значениями энергии и числа частиц; $\beta = 1/kT$; Ω – термодинамический потенциал. Квантовые состояния многочастичной системы $|m\rangle, |n\rangle$ являются собственными функциями оператора \hat{H}' .

Среднее число частиц $N(t)$ выражается через плотность частиц $\rho(t)$:

$$N(t) = \langle \hat{N}(t) \rangle = \int d\bar{x} \langle a_{\alpha}^{+}(\bar{x}, t) a_{\alpha}(\bar{x}, t) \rangle = \int d\bar{x} \rho(\bar{x}, t). \quad (39)$$

Из соотношений (31, 32, 34) следует, что

$$[\hat{N}, \hat{H}'] = 0. \quad (40)$$

Тогда из уравнения (36) получим $\frac{\partial}{\partial t} \hat{N}(t) = 0$, поэтому $N = \text{const}$.

Запаздывающая, опережающая и причинная функции Грина для электронов определяются следующим образом:

$$G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}', t - t') = i\theta(t - t') \langle [a_{\alpha}(\bar{x}, t), a_{\beta}^{+}(\bar{x}', t')]_{\pm} \rangle, \quad (41)$$

$$G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}', t - t') = -i\theta(t' - t) \langle [a_{\alpha}(\bar{x}, t), a_{\beta}^{+}(\bar{x}', t')]_{\pm} \rangle, \quad (42)$$

$$G_{\alpha\beta}^c(\bar{x}, \bar{x}', t - t') = i \langle T a_{\alpha}(\bar{x}, t) a_{\beta}^{+}(\bar{x}', t') \rangle, \quad (43)$$

где T – знак хронологического произведения. Система не ферромагнитна и не находится во внешнем поле, поэтому

$$G_{\alpha\beta}(X_1, X_2) = \delta_{\alpha\beta} G(X_1, X_2). \quad (44)$$

Спиновые индексы (α, β) записывать не будем, считая все величины, соответствующие электронной подсистеме, матрицами по спиновым переменным.

Опишем взаимодействие зарядов, используя методы квантовой электродинамики. Отличные от 0 компоненты метрического тензора четырехмерного пространства:

$$g_{00} = -g_{11} = -g_{22} = -g_{33} = 1. \quad (45)$$

Греческие индексы (α, β, \dots) в этом случае имеют значения 0, 1, 2, 3, а латинские $(i, j, \dots) - 1, 2, 3$; x^0 – временная координата, x^i – пространственные координаты. Гамильтониан свободного электромагнитного поля имеет вид

$$\hat{H}_f(x^0) = -\frac{1}{2} \int d\vec{x} \sum_{\alpha} g^{\alpha\alpha} : \left\{ \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial A_{\alpha}}{\partial x^0} \right)^2 + \sum_{i=1,2,3} \left(\frac{\partial A_{\alpha}}{\partial x^i} \right)^2 \right\}, \quad (46)$$

где $:\{\}\:$ – нормальное произведение, относящееся к операторам рождения и уничтожения фотонов, через которые выражаются операторы A_{α} ; c – скорость света в среде; A_{α} – операторы поля. Взаимодействие электронов с квантовым полем фотонов дает следующий вклад в оператор Гамильтона:

$$\hat{H}_{pf}(x^0) = - \int d\vec{x} J_e^{\alpha}(x) A_{\alpha}(x), \quad (47)$$

где J_e^{α} – квантовый 4-вектор тока электронов. В качестве источников электрического поля рассматриваются положительно заряженные остовы примесных атомов и все электроны, кроме данного, т.е. выражение (47) учитывает слагаемые, содержащие $U_0(\vec{x})$ и $V_c(\vec{x} - \vec{x}')$, в выражении (31). Полный 4-вектор тока имеет вид

$$J^{\alpha}(x) = J_e^{\alpha} + \tilde{J}^{\alpha}(x) = ea^+(x)\gamma^{\alpha}a(x) + \tilde{J}^{\alpha}(x), \quad (48)$$

где $e < 0$ – заряд электрона; γ^{α} – матрицы Дирака; первое слагаемое описывает квантовый ток электронов; второе $\tilde{J}^{\alpha}(x)$ – ток статических источников.

Операторы поля подчиняются коммутационным соотношениям

$$\left[A_{\alpha}(\vec{x}, x^0), A_{\beta}(\vec{x}', x^0) \right] = 0, \quad (49)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x^i} A_{\alpha}(\vec{x}, x^0), A_{\beta}(\vec{x}', x^0) \right] = 0, \quad (50)$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x^0} A_{\alpha}(\vec{x}, x^0), A_{\beta}(\vec{x}', x^0) \right] = ic^2 g_{\alpha\beta} \delta(\vec{x} - \vec{x}'). \quad (51)$$

Запаздывающая, опережающая и причинная функции Грина для электромагнитного поля определяются следующим образом:

$$D_{\alpha\beta}^r(x, x') = -i\theta(t - t') \langle [A_\alpha(x), A_\beta(x')] \rangle, \quad (52)$$

$$D_{\alpha\beta}^a(x, x') = i\theta(t' - t) \langle [A_\alpha(x), A_\beta(x')] \rangle, \quad (53)$$

$$D_{\alpha\beta}^c(x, x') = -i \langle T \{ A_\alpha(x), A_\beta(x') \} \rangle, \quad (54)$$

Полный гамильтониан системы, включающей электроны и электромагнитное поле, представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_p + \hat{H}_{int} + \hat{H}_f, \quad (55)$$

где первое слагаемое соответствует периодической кристаллической решетке

$$\hat{H}_p(x^0) = \int d\vec{x} a_\alpha^+(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + U_L(\vec{x}) \right\} a_\alpha(x), \quad (56)$$

второе описывает взаимодействие зарядов с электромагнитным полем, а третье – свободное электромагнитное поле. Выделим взаимодействие электронов с фотонами \hat{H}_{pf} и статических источников с электромагнитным полем:

$$\hat{H}_{int} = \hat{H}_{pf} - \int d\vec{x} \tilde{J}^\alpha A_\alpha. \quad (57)$$

Величина \hat{H}' определяется через \hat{H} : $\hat{H}' = \hat{H} - \mu\hat{N}$.

При усреднении по фотонным состояниям возьмем вакуумные фотонные состояния, т.е. тепловое излучение не учитываем. Ограничимся случаем, когда $D_{\alpha\beta}^c(\vec{x}, \vec{x}', \omega)$ не зависит от ω (или этой зависимостью можно пренебречь), т.е. рассмотрим мгновенное взаимодействие. Тогда $D_{\alpha\beta}^c(x, x') \sim \delta(t - t')$, а $D_{\alpha\beta}^r(x, x') = D_{\alpha\beta}^a(x, x') = 0$ в силу коммутационных соотношений. Поэтому далее используем причинные функции Грина электромагнитного поля $D_{\alpha\beta}^c$, а также причинные функции Грина электронов G^c .

Получим уравнения для функции Грина электромагнитного поля.

$$D_{\alpha\beta}^c(x, x') = -i\theta(t-t') \langle A_\alpha(\bar{x}, t) A_\beta(\bar{x}', t') \rangle - i\theta(t'-t) \langle A_\beta(\bar{x}', t') A_\alpha(\bar{x}, t) \rangle, \quad (58)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial X^0} D_{\alpha\beta}^c(x, x') &= -i\delta(t-t') \langle A_\alpha(\bar{x}, t) A_\beta(\bar{x}', t') \rangle + i\delta(t'-t) \langle A_\beta(\bar{x}', t') A_\alpha(\bar{x}, t) \rangle - \\ &\quad - i \left\langle T \frac{\partial}{\partial X^0} A_\alpha(\bar{x}, t), A_\beta(\bar{x}', t') \right\rangle, \end{aligned} \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial X^{02}} D_{\alpha\beta}^c(x, x') &= -i\delta(t-t') \left\langle \left[\frac{\partial}{\partial X^0} A_\alpha(\bar{x}, t), A_\beta(\bar{x}', t') \right] \right\rangle - \\ &\quad - i \left\langle T \frac{\partial^2}{\partial X^{02}} A_\alpha(\bar{x}, t) A_\beta(\bar{x}', t') \right\rangle. \end{aligned} \quad (60)$$

Операторы A_α удовлетворяют уравнению поля

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial X^{02}} A_\alpha(\bar{x}, t) - \Delta A_\alpha = -J_\alpha, \quad (61)$$

где Δ – оператор Лапласа. Тогда функция Грина электромагнитного поля будет решением уравнений

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial X^{02}} D_{\alpha\beta}^c(x, x') - \Delta_x D_{\alpha\beta}^c(x, x') - i \langle T J_\alpha(x) A_\beta(x') \rangle = g_{\alpha\beta} \delta(x - x'), \quad (62)$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial X^{02}} D_{\alpha\beta}^c(x, x') - \Delta_x D_{\alpha\beta}^c(x, x') - i \langle T A_\alpha(\bar{x}, t) J_\beta(\bar{x}', t') \rangle = g_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (63)$$

Получим уравнение для фермионной функции Грина $G_{\alpha\beta}^c$ (α, β – спиновые индексы).

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\beta}^c(x, x') &= -\hbar \delta(t-t') \delta(\bar{x} - \bar{x}') \delta_{\alpha\beta} + \\ &\quad + i \left\langle i\hbar T \frac{\partial}{\partial t} a_\alpha(\bar{x}, t) a_\beta^+(\bar{x}', t') \right\rangle. \end{aligned} \quad (64)$$

Перейдем в систему единиц, для которой $\hbar = 1$. Воспользуемся уравнением (36) :

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_\alpha(\bar{x}, t) = \left[a_\alpha(x), \hat{H}' \right] = \left\{ -\frac{\Delta_x}{2m} + U_L(\bar{x}) - \mu \right\} a_\alpha(x) - e\gamma^\xi a_\alpha A_\xi, \quad (65)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_{\beta}^{+}(\bar{x}, t) = [a_{\beta}^{+}(x), \hat{H}']_{-} = - \left\{ -\frac{\Delta_x}{2m} + U_L(\bar{x}) - \mu \right\} a_{\beta}^{+}(x) + e a_{\beta}^{+} \gamma^{\xi} A_{\xi}. \quad (66)$$

Тогда получим

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\beta}^c(x, x') - \left\{ -\frac{\Delta_x}{2m} + U_L(\bar{x}) - \mu \right\} G_{\alpha\beta}^c(x, x') + i e \gamma^{\xi} \langle T a_{\alpha}(x) a_{\beta}^{+}(x') A_{\xi}(x) \rangle = -\delta_{\alpha\beta} \delta(x - x'), \quad (67)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t'} G_{\alpha\beta}^c(x, x') + \left\{ -\frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(\bar{x}') - \mu \right\} G_{\alpha\beta}^c(x, x') - i e \gamma^{\xi} \langle T a_{\alpha}(x) a_{\beta}^{+}(x') A_{\xi}(x') \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x'). \quad (68)$$

Введем матричные обозначения в четырехмерном пространстве:

$$\{\gamma^{\xi}\} = \Gamma, \quad \{A_{\xi}(x)\} = \Phi(x), \quad g_{\xi\xi} = g. \quad (69)$$

Смешанные функции Грина определяются следующим образом:

$$R_{\alpha\beta}^c(x, x') = i \langle T a_{\alpha}(x) a_{\beta}^{+}(x') \Phi(x) \rangle, \quad (70)$$

$$R_{\alpha\beta}^{c'}(x, x') = i \langle T a_{\alpha}(x) a_{\beta}^{+}(x') \Phi(x') \rangle, \quad (71)$$

$$Q_{\alpha\beta}^c(x, x') = i \langle T a_{\alpha}(x) a_{\beta}^{+}(x) \Phi(x') \rangle, \quad (72)$$

$$Q_{\alpha\beta}^c(x', x) = i \langle T a_{\alpha}(x') a_{\beta}^{+}(x') \Phi(x) \rangle. \quad (73)$$

Используя матричные обозначения для спиновых индексов, запишем уравнения для функций Грина (62, 63, 67, 68) в следующем виде:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + \mu \right) G^c(x, x') + e \Gamma R^c(x, x') = -\delta(x - x'), \quad (74)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x'^0} - \frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(x') - \mu \right) G^c(x, x') - e \Gamma R^{c'}(x, x') = \delta(x - x'), \quad (75)$$

$$\square_x D^c(x, x') - i e g \text{Sp} \langle T a^{+}(x) \Gamma a(x) \Phi(x') \rangle - i g \tilde{J}(x) \tilde{\Phi}(x') = g \delta(x - x'), \quad (76)$$

$$\square_{x'} D^c(x, x') - i e \text{Sp} \langle T \Phi(x) a^{+}(x') \Gamma a(x') \rangle g - i \tilde{\Phi}(x) \tilde{J}(x') g = g \delta(x - x'), \quad (77)$$

где \square – оператор Даламбера; Sp берется по спиновым индексам; $\tilde{\Phi} = \langle \Phi \rangle$ – средний потенциал поля.

$$\square_x D^c(x, x') + eg \text{Sp} \Gamma Q^c(x, x') - ig \tilde{J}(x) \tilde{\Phi}(x') = g \delta(x - x'), \quad (78)$$

$$\square_{x'} D^c(x, x') + e \text{Sp} \Gamma Q^c(x', x) g - i \tilde{\Phi}(x) \tilde{J}(x') g = g \delta(x - x'). \quad (79)$$

2.2. УРАВНЕНИЯ В ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Пусть J – классическая функция, трансформационные свойства которой обеспечивают инвариантность произведения $J \cdot \Phi$ относительно допустимых в данной системе преобразований симметрии. В рассматриваемом случае J соответствует 4-вектору тока и имеет смысл малых вариаций классического тока. Определение следующих величин является формальным [168]:

$$G^c(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) a^+(x') S \} \rangle, \quad (80)$$

$$R^c(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) a^+(x') \Phi(x) S \} \rangle, \quad (81)$$

$$R^{c'}(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) a^+(x') \Phi(x') S \} \rangle, \quad (82)$$

$$S = T \left\{ \exp \left\{ i \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{z} \int dz^0 J(z) \Phi(z) \right\} \right\}. \quad (83)$$

Переход к функциям Грина осуществляется с помощью предела:

$$G^c(x, x') = \lim_{J \rightarrow 0} G^c(x, x'; J), \quad (84)$$

$$R^c(x, x') = \lim_{J \rightarrow 0} R^c(x, x'; J), \quad (85)$$

$$R^{c'}(x, x') = \lim_{J \rightarrow 0} R^{c'}(x, x'; J). \quad (86)$$

Применив функциональные производные [168], получим соотношения

$$\begin{aligned}
R^c(x, x'; J) &= -\frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G^c(x, x'; J)}{\delta J(x)} = \\
&= -i \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x)} - i G^c(x, x'; J) \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)}, \quad (87)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R^-(x, x'; J) &= -\frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} = \\
&= -i \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} - i G^c(x, x'; J) \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x')}, \quad (88)
\end{aligned}$$

$$-i \left. \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)} \right|_{J \rightarrow 0} = \left. \frac{\langle T \{ \Phi(x) S \} \rangle}{\langle S \rangle} \right|_{J \rightarrow 0} = \langle \Phi(x) \rangle = \tilde{\Phi}(x). \quad (89)$$

Обозначим

$$-i \frac{\delta \ln \langle S \rangle}{\delta J(x)} = \tilde{\Phi}(x; J). \quad (90)$$

Используя выражения (87, 88, 90), преобразуем уравнения для электронных функций Грина:

$$\begin{aligned}
\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + \mu + e\Gamma \tilde{\Phi}(x; J) \right) G^c(x, x'; J) - \\
- ie\Gamma \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x)} = -\delta(x - x'), \quad (91)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left(i \frac{\partial}{\partial x'^0} - \frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(x') - \mu - e\Gamma \tilde{\Phi}(x'; J) \right) G^c(x, x'; J) + \\
+ ie\Gamma \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} = \delta(x - x'). \quad (92)
\end{aligned}$$

Аналогичная процедура для функций Грина электромагнитного поля дает следующие результаты:

$$D^c(x, x'; J) = -\frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ \Phi(x) \Phi(x') S \} \rangle, \quad (93)$$

$$Q^c(x, x'; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \langle T \{ a(x) a^+(x') \Phi(x') S \} \rangle, \quad (94)$$

$$Q^c(x', x; J) = \frac{i}{\langle S \rangle} \left\langle T \left\{ a(x') a^+(x') \Phi(x) S \right\} \right\rangle, \quad (95)$$

$$\begin{aligned} Q^c(x, x'; J) &= -\frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} = \\ &= -i \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} + G^c(x, x'; J) \tilde{\Phi}(x'; J), \end{aligned} \quad (96)$$

$$\begin{aligned} Q^c(x', x; J) &= -\frac{i}{\langle S \rangle} \frac{\delta \langle S \rangle G^c(x', x'; J)}{\delta J(x)} = \\ &= -i \frac{\delta G^c(x', x'; J)}{\delta J(x)} + G^c(x', x'; J) \tilde{\Phi}(x; J), \end{aligned} \quad (97)$$

$$\begin{aligned} \square_x D^c(x, x'; J) + e g \text{Sp} \Gamma G^c(x, x'; J) \tilde{\Phi}(x'; J) - i e g \text{Sp} \Gamma \frac{\delta G^c(x, x'; J)}{\delta J(x')} - \\ - i g (\tilde{J}(x) + J(x)) \tilde{\Phi}(x') = g \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (98)$$

$$\begin{aligned} \square_x D^c(x, x'; J) + e \text{Sp} \Gamma G^c(x', x'; J) \tilde{\Phi}(x; J) g - i e \text{Sp} \Gamma \frac{\delta G^c(x', x'; J)}{\delta J(x)} g - \\ - i \tilde{\Phi}(x; J) (\tilde{J}(x') + J(x')) g = g \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (99)$$

После вычисления функциональных производных в уравнениях для функций Грина (91, 92, 98, 99) следует принять $J = 0$.

Возьмем функциональную производную от $\tilde{\Phi}(x, J)$ (90) и, используя определение $D^c(x, x'; J)$ (93), получим

$$D^{c'}(x, x'; J) = -\frac{\delta \tilde{\Phi}(x, J)}{\delta J(x')} = D^c(x, x'; J) + i \tilde{\Phi}(x, J) \tilde{\Phi}(x', J). \quad (100)$$

Уравнение для среднего поля $\tilde{\Phi}(x, J)$ следует из полевых уравнений для операторов A_α (61) и определения $G^c(x, x'; J)$ (80):

$$\square_x \tilde{\Phi}(x, J) = -i e g \text{Sp} \Gamma G^c(x, x; J) - \tilde{J} - J. \quad (101)$$

Уравнения для функций Грина $D^{c'}(x, x'; J)$ получим, применив уравнения для $D^c(x, x'; J)$ (98, 99)

$$\square_x D^c(x, x'; J) - ie g \text{Sp} \Gamma \frac{\delta G^c(x, x; J)}{\delta J(x')} = g \delta(x - x'), \quad (102)$$

$$\square_{x'} D^c(x, x'; J) - ie \text{Sp} \Gamma \frac{\delta G^c(x', x'; J)}{\delta J(x)} g = g \delta(x - x'). \quad (103)$$

Исходя из определения (100), среднее поле $\tilde{\Phi}(x; J)$ можно представить в виде

$$\tilde{\Phi}(x; J) = -\int dx' D^c(x, x'; J) (\tilde{J}(x') + J(x')), \quad (104)$$

$$\tilde{\Phi}(x) = -\int dx' D^c(x, x'; 0) \tilde{J}(x'). \quad (105)$$

2.3. МАССОВЫЙ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЙ ОПЕРАТОРЫ

Рассмотрим введенные ранее функционалы (80–82, 93–95, 100) как функционалы не от J , а от $\tilde{\Phi}$, тогда

$$\frac{\delta G^c(x, x')}{\delta J(z)} = \int dz' \frac{\delta G^c(x, x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} \frac{\delta \tilde{\Phi}(z')}{\delta J(z)} = -\int dz' \frac{\delta G^c(x, x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} D^c(z', z). \quad (106)$$

Из определения обратных функций Грина

$$\int dx'' G^c(x, x'') G^{c-1}(x'', x') = \delta(x - x') \quad (107)$$

следует

$$\int dx'' \frac{\delta G^c(x, x'')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} G^{c-1}(x'', x') = -\int dx'' G^c(x, x'') \frac{\delta G^{c-1}(x'', x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')}, \quad (108)$$

$$\frac{\delta G^c(x, x')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} = -\int dy' dy'' G^c(x, y') \frac{\delta G^{c-1}(y', y'')}{\delta \tilde{\Phi}(z')} G^c(y'', x'). \quad (109)$$

По определению [168] массовый оператор для уравнения (91)

$$M(x, y) = -ie^2 \Gamma \int dy' dz G^c(x, y') \tilde{\Gamma}(y', y; z) D^c(z, x), \quad (110)$$

где

$$\tilde{\Gamma}(x, y; z) = -\frac{\delta G^c(x, y)}{\delta e\tilde{\Phi}(z)}. \quad (111)$$

Массовый оператор $M(x, y)$ описывает поправку к энергии (массе) частицы за счет взаимодействия с квантовым полем, $\tilde{\Gamma}(x, y; z)$ – полная вершинная часть. С помощью (109, 111) выражение (106) запишем в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\delta G^c(x, x')}{\delta J(z)} = \\ & = e \int dz' \int dy' \int dy'' G^c(x, y') \tilde{\Gamma}(y', y''; z') G^c(y'', x') D^c(z', z). \end{aligned} \quad (112)$$

Подставив (112) в (91), учитывая (110), преобразуем уравнение (91) к виду

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + \mu + e\Gamma\tilde{\Phi}(x) \right) G^c(x, x') - \\ & - \int dy M(x, y) G^c(y, x') = -\delta(x - x'). \end{aligned} \quad (113)$$

Сопряженное уравнение преобразуем аналогично:

$$\begin{aligned} & \left(i \frac{\partial}{\partial x^0} - \frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(x') - \mu - e\Gamma\tilde{\Phi}(x') \right) G^c(x, x') + \\ & + \int dy G^c(x, y) M'(y, x') = \delta(x - x'), \end{aligned} \quad (114)$$

где массовый оператор

$$M'(y, x') = -ie^2 \Gamma \int dy' dz' \tilde{\Gamma}(y, y'; z) G^c(y', x') D^c(z, x'). \quad (115)$$

Матрица Γ из (115) действует на функцию $G^c(x, y)$ во втором слагаемом в уравнении (114).

Для функции Грина $D^c(x, x'; J)$ введем поляризационный оператор [168]

$$P(x, y) = -ie^2 \text{Sp} \Gamma \int dy' dy'' G^c(x, y') \tilde{\Gamma}(y', y''; y) G^c(y'', x), \quad (116)$$

описывающий эффект поляризации вакуума. Преобразуем уравнения (102, 103):

$$\square_x D^{c'}(x, x') - g \int dy P(x, y) D^{c'}(y, x') = g \delta(x - x'), \quad (117)$$

$$\square_{x'} D^{c'}(x, x') - \int dy P(x', y) D^{c'}(y, x) g = g \delta(x - x'). \quad (118)$$

Приведем в явном виде индексы четырехмерного пространства:

$$M(x, y) = -ie^2 \gamma^\zeta \int dy' dz G^c(x, y') \tilde{\Gamma}^\xi(y', y, z) D_{\xi\zeta}^{c'}(z, x), \quad (119)$$

$$P^{\delta\zeta}(x, y) = -ie^2 Sp \gamma^\delta \int dy' dy'' G^c(x, y') \tilde{\Gamma}^\zeta(y', y''; y) G^c(y'', x). \quad (120)$$

Из уравнений (117, 118) получим

$$\begin{aligned} & \square_{x'} (D_{\xi\zeta}^{c'}(x', x) - D_{\xi\zeta}^{c'}(x, x')) = \\ & = -ie^2 g_{\xi\delta} Sp \gamma^\delta \int dy' dy'' dy G^c(x', y') \tilde{\Gamma}^\eta(y', y''; y) G^c(y'', x') D_{\eta\zeta}^{c'}(y, x) + \\ & + ie^2 Sp \gamma^\delta \int dy' dy'' dy G^c(x', y') \tilde{\Gamma}^\eta(y', y''; y) G^c(y'', x') D_{\eta\zeta}^{c'}(y, x) g_{\xi\delta} = 0. \end{aligned} \quad (121)$$

Из определения (100) и выражения (121) следует, что функция $D_{\xi\zeta}^{c'}(x, x')$ удовлетворяет условию симметрии

$$D_{\xi\zeta}^{c'}(x', x) = D_{\xi\zeta}^{c'}(x, x'), \quad (122)$$

поэтому достаточно рассматривать одно уравнение (117).

Из уравнения (113) найдем

$$-G^{c-1} = \left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + \mu + e \Gamma \tilde{\Phi}(x) \right) \delta(x - x'') - M(x, x''). \quad (123)$$

Из определения (121) и выражения (123) получим

$$\tilde{\Gamma}(x, x''; z) = \Gamma \delta(x - x'') \delta(x - z) - \frac{\delta M(x, x'')}{\delta e \tilde{\Phi}(z)}. \quad (124)$$

Функциональную производную в правой части (124) найдем, используя соотношения (119–121):

$$\begin{aligned} & - \frac{\delta M(x, x'')}{\delta g \tilde{\Phi}(z)} = \\ & = ie^2 \Gamma \int dy' dz' \left\{ \int dz'' dz''' G^c(x, z''') \tilde{\Gamma}(z''', z''; z) G^c(z'', y') \tilde{\Gamma}(y', x''; z') + \right. \\ & \left. + G^c(x, y') \frac{\delta \tilde{\Gamma}(y', x''; z')}{\delta e \tilde{\Phi}(z)} \right\} D^{c'}(z', x). \end{aligned} \quad (125)$$

При малом взаимодействии с квантовым полем $\tilde{\Gamma}(x, x''; z)$ сводится к Γ :

$$\tilde{\Gamma}(x, x''; z) = \Gamma \delta(x - x'') \delta(x - z) + O(e^2). \quad (126)$$

Воспользуемся представлением

$$G^c(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(x^0 - y^0)} G^c(\bar{x}, \bar{y}; \omega), \quad (127)$$

$$M(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(x^0 - y^0)} M(\bar{x}, \bar{y}; \omega), \quad (128)$$

$$M'(y, x') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(y^0 - x'^0)} M'(\bar{y}, \bar{x}'; \omega), \quad (129)$$

$$D^c(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(x^0 - x'^0)} D^c(\bar{x}, \bar{x}'; \omega), \quad (130)$$

$$P(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(x^0 - y^0)} P(\bar{x}, \bar{y}; \omega). \quad (131)$$

В стационарном или квазистационарном случае U_L и $\tilde{\Phi}$ не зависят явно от x^0 . Подставив (127–129) в уравнения (113, 114), а (130, 131) – в уравнение (117), получим

$$\left(\omega + \mu + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + e\Gamma \tilde{\Phi}(x) \right) G^c(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) - 2\pi \int d\bar{y} M(\bar{x}, \bar{y}; \omega) G^c(\bar{y}, \bar{x}'; \omega) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\bar{x} - \bar{x}'), \quad (132)$$

$$\left(-\omega - \mu - \frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(x') - e\Gamma \tilde{\Phi}(x') \right) G^c(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) + 2\pi \int d\bar{y} G^c(\bar{x}, \bar{y}; \omega) M'(\bar{y}, \bar{x}'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \delta(\bar{x} - \bar{x}'), \quad (133)$$

$$\left(-\frac{\omega^2}{c^2} - \Delta_x \right) D^c(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) - 2\pi g \int d\bar{y} P(\bar{x}, \bar{y}; \omega) D^c(\bar{y}, \bar{x}'; \omega) = \frac{g}{2\pi} \delta(\bar{x} - \bar{x}'). \quad (134)$$

2.4. УРАВНЕНИЯ ДАЙСОНА

Функции Грина свободных полей $G^{c(0)}$, $D^{c(0)}$ удовлетворяют уравнениям

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + \frac{\Delta_x}{2m} - U_L(x) + \mu \right) G^{c(0)}(x, x') = -\delta(x - x'), \quad (135)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} - \frac{\Delta_{x'}}{2m} + U_L(x') - \mu \right) G^{c(0)}(x, x') = \delta(x - x'), \quad (136)$$

$$\square D^{c(0)}(x, x') = g\delta(x - x'), \quad (137)$$

которые следуют из уравнений (113, 114, 117) при исчезающем взаимодействии с квантовым полем ($e \rightarrow 0$). С помощью этих функций дифференциальные уравнения (113, 114, 117) можно заменить на интегральные уравнения Дайсона [168]:

$$G^c(x, x') = G^{c(0)}(x, x') + e\Gamma \int dx'' G^{c(0)}(x, x'') \tilde{\Phi}(x'') G^c(x'', x') - \int dx'' dy G^{c(0)}(x, x'') M(x'', y) G^c(y, x'), \quad (138)$$

$$G^c(x, x') = G^{c(0)}(x, x') + e\Gamma \int dx'' G^c(x, x'') \tilde{\Phi}(x'') G^{c(0)}(x'', x') - \int dx'' dy G^c(x, y) M'(y, x'') G^{c(0)}(x'', x'), \quad (139)$$

$$D^{c'}(x, x') = D^{c(0)}(x, x') + \int dx'' dy D^{c(0)}(x, x'') P(x'', y) D^{c'}(y, x'), \quad (140)$$

или в функционально-матричной форме

$$G^c = G^{c(0)} + e\Gamma G^{c(0)} \tilde{\Phi} G^c - G^{c(0)} M G^c, \quad (141)$$

$$G^c = G^{c(0)} + e\Gamma G^c \tilde{\Phi} G^{c(0)} - G^c M' G^{c(0)}, \quad (142)$$

$$D^{c'} = D^{c(0)} + D^{c(0)} P D^{c'}. \quad (143)$$

Решение уравнения (101) с помощью функции $D^{c(0)}(x, x')$ можно представить в виде

$$\tilde{\Phi}(x) = -\int dx' D^{c(0)}(x, x') \left(\tilde{J} + i e g \text{Sp} \Gamma G^c(x', x') \right), \quad (144)$$

$$\tilde{\Phi} = -D^{c(0)} \left(\tilde{J} + i e g \text{Sp} \Gamma G^c \right). \quad (145)$$

В отличие от (144) в (105) входит функция Грина $D^c(x, x')$, учитывающая “поляризацию вакуума”, т.е. часть электрон-фотонного взаимодействия, пошедшую на экранирование.

Представим массовый и поляризационный операторы в функционально-матричной форме:

$$M = -ie^2 \Gamma G^c \tilde{\Gamma} D^c, \quad (146)$$

$$M' = -ie^2 \tilde{\Gamma} \Gamma G^c D^c, \quad (147)$$

$$P = -ie^2 \text{Sp} \Gamma G^c \tilde{\Gamma} G^c. \quad (148)$$

Для систем с электромагнитным взаимодействием уравнения Дайсона инвариантны относительно мультипликативного преобразования:

$$G^c \rightarrow z G^c, D^c \rightarrow z_3 D^c, \Gamma \rightarrow z^{-1} \Gamma, \tilde{\Phi} \rightarrow z_3^{1/2} \tilde{\Phi}, e^2 \rightarrow z_3^{-1} e^2. \quad (149)$$

2.5. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ КРИСТАЛЛА С ПРИМЕСНОЙ СВЕРХРЕШЕТКОЙ

В идеальном кристалле допустимы периодические условия Борна – Кармана. Поле примесной сверхрешетки рассматривается как возмущение. Электронные волновые функции разложим по функциям Блоха невозмущенной задачи и воспользуемся теоремой Ванье. Тогда вместо уравнений (113, 114) в однозонном приближении получим следующие уравнения:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} - W(-i\vec{\nabla}_x) + \mu + e\Gamma\tilde{\Phi}(x) \right) G^c(x, x') - \int dy M(x, y) G^c(y, x') = -\delta(x - x'), \quad (150)$$

$$\left(i \frac{\partial}{\partial x^0} + W(-i\vec{\nabla}_{x'}) - \mu - e\Gamma\tilde{\Phi}(x') \right) G^c(x, x') + \int dy G^c(x, y) M'(y, x') = \delta(x - x'), \quad (151)$$

где $W(\vec{k})$ – энергетический спектр электрона в зоне проводимости.

Воспользуемся преобразованием Фурье:

$$F(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega d\bar{k} d\bar{k}' \exp\{-i\omega(t-t') + i\bar{k} \cdot \bar{x} - i\bar{k}' \cdot \bar{x}'\} F(\bar{k}, \bar{k}'; \omega), \quad (152)$$

$$F(\bar{k}, \bar{k}'; \omega) = \frac{1}{(2\pi)^7} \int_{-\infty}^{\infty} dt d\bar{x} d\bar{x}' \exp\{i\omega t - i\bar{k} \cdot \bar{x} + i\bar{k}' \cdot \bar{x}'\} F(\bar{x}, \bar{x}', t). \quad (153)$$

Если $F(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = F(\bar{x} - \bar{x}'; \omega)$, то $F(\bar{k}, \bar{k}'; \omega) = F(\bar{k}; \omega) \delta(\bar{k} - \bar{k}')$,

$$F(\bar{k}; \omega) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt d\bar{x} \exp\{i\omega t - i\bar{k} \cdot \bar{x}\} F(\bar{x}, t). \quad (154)$$

Уравнения Дайсона в представлении Фурье преобразуются к виду

$$G^c(k) = G^{c(0)}(k) \left[1 - (2\pi)^4 e\Gamma \tilde{\Phi}(k) G^{c(0)}(k) + (2\pi)^8 G^{c(0)}(k) M(k) \right]^{-1}, \quad (155)$$

$$D^c(k) = D^{c(0)}(k) \left[1 - (2\pi)^8 D^{c(0)}(k) P(k) \right]^{-1}. \quad (156)$$

Возмущение создается точечными источниками классического поля с плотностью заряда $\rho(\bar{x})$

$$J^0(\bar{x}) = \rho(\bar{x}) = |e|z \sum_{\mathbf{R}} \delta(\bar{x} - \bar{\mathbf{R}}), \quad (157)$$

где $|e|z$ – заряд остовов примесных атомов, суммирование ведется по узлам примесной сверхрешетки. Подставим (157) в (105) и воспользуемся представлением Фурье функции $D^{c'}$:

$$\tilde{\Phi}_0(x) = -|e|z \int dx' \int D_{00}^c(\bar{k}, \omega) \exp\{-i\omega(t-t') + i\bar{k} \cdot (\bar{x} - \bar{x}')\} d\mathbf{k} \sum_{\mathbf{R}} \delta(\bar{x}' - \bar{\mathbf{R}}),$$

$$\tilde{\Phi}_0(x) = -2\pi |e|z \sum_{\mathbf{R}} \int d\bar{k} \exp\{i\bar{k} \cdot (\bar{x} - \bar{\mathbf{R}})\} D_{00}^c(\bar{k}; 0). \quad (158)$$

Из уравнения (137) найдем

$$D_{\alpha\beta}^{c(0)}(\bar{k}; \omega) = \frac{g_{\alpha\beta}}{(2\pi)^4} \frac{1}{\bar{k}^2 - k^0{}^2 - i\varepsilon}, \quad (159)$$

где $k^0 = \frac{\omega}{c}$; $\varepsilon \rightarrow 0$. В рассматриваемом случае векторная составляющая 4-потенциала электромагнитного поля равна нулю, поэтому только компоненты D_{00}^c функции Грина (54) отличны от

нуля. В (158) входит $D^c(\vec{k}; \omega = 0)$, т.е. запаздывание не учитывается. Тогда

$$D_{00}^{c(0)}(\vec{k}; 0) = \frac{1}{(2\pi)^4} \frac{1}{\vec{k}^2}. \quad (160)$$

Преобразуем выражение (158) с учетом (156, 160):

$$\tilde{\Phi}_0(x) = -\frac{1}{(2\pi)^3} |e|z \sum_R \int d\vec{k} \frac{e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{R})}}{\vec{k}^2 - (2\pi)^4 P^{00}(\vec{k}; 0)} - C, \quad (161)$$

постоянная C добавлена, так как потенциал определяется с точностью до произвольной константы.

Уравнения (132, 133) представим в виде, аналогичном (150, 151), подставим $G^{c(0)}(x, x')$ в виде интеграла Фурье (152), учтем (154):

$$(\omega - W(-i\vec{\nabla}_x) + \mu) G^{c(0)}(\vec{x}, \vec{x}'; \omega) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (162)$$

$$(\omega + \mu - W(\vec{k})) G^{c(0)}(k) = -\frac{1}{(2\pi)^4}. \quad (163)$$

Решение уравнения (162) можно представить следующим образом:

$$G^{c(0)}(\vec{x}, \vec{x}'; \omega) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int d\vec{k} e^{i\vec{k}(\vec{x}-\vec{x}')} \cdot \left\{ \frac{a(\vec{k})}{\omega - W(\vec{k}) + \mu - i\varepsilon} + \frac{b(\vec{k})}{\omega - W(\vec{k}) + \mu + i\varepsilon} \right\}, \quad (164)$$

где $a(\vec{k}) + b(\vec{k}) = 1$. Найдем элемент объема в пространстве квазиимпульсов. Пусть $\omega' = W(\vec{k}) - \mu$ – изоэнергетическая поверхность; k_\perp – нормаль к изоэнергетической поверхности, тогда

$$d\vec{k} = d\sigma_\omega dk_\perp, \quad d\omega' = |\nabla_{\vec{k}} W| dk_\perp, \quad d\vec{k} = \frac{d\omega' d\sigma_\omega}{|\nabla_{\vec{k}} W|}. \quad (165)$$

Используя (165), преобразуем (164):

$$G^{c(0)}(\vec{x}, \vec{x}'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{Q(\vec{x}, \vec{x}'; \omega) a(\omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon} +$$

$$+ \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{Q(\bar{x}, \bar{x}'; \omega') b(\omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon}. \quad (166)$$

Предполагается, что a и b зависят только от ω' .

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} G^{c(0)}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{Q(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) a(\omega')}{\omega' - \omega} + \\ &+ \frac{1}{2\pi} \int d\omega' \frac{Q(\bar{x}, \bar{x}'; \omega') b(\omega')}{\omega' - \omega}, \end{aligned} \quad (167)$$

где \int означает главную часть интеграла,

$$\operatorname{Im} G^{c(0)}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = -\frac{a-b}{2} Q(\bar{x}, \bar{x}'; \omega). \quad (168)$$

Выразим $Q(\bar{x}, \bar{x}'; \omega)$ из (168) и подставим в (167):

$$\operatorname{Re} G^{c(0)}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = -\frac{1}{\pi} \int d\omega' \frac{\operatorname{Im} G^{c(0)}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega') (a+b)}{(\omega' - \omega)(a-b)}. \quad (169)$$

Дробь $(a+b)/(a-b)$ представим в виде

$$\frac{a+b}{a-b} = \frac{1+e^{\beta\omega'}}{1-e^{\beta\omega'}}, \quad (170)$$

тогда

$$a = \frac{1}{1+e^{\beta\omega'}} = n^{(0)}(\omega'), \quad b = \frac{e^{\beta\omega'}}{1+e^{\beta\omega'}} = 1 - n^{(0)}(\omega'). \quad (171)$$

В результате получим представление для невозмущенной электронной функции Грина:

$$G^{c(0)}(\bar{k}; \omega) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \left\{ \frac{n^{(0)}(\bar{k})}{\omega - W(\bar{k}) + \mu - i\varepsilon} + \frac{1 - n^{(0)}(\bar{k})}{\omega - W(\bar{k}) + \mu + i\varepsilon} \right\}, \quad (172)$$

$$G^{c(0)}(\bar{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \frac{\omega - W(\bar{k}) + \mu + i\varepsilon (2n^{(0)}(\bar{k}) - 1)}{(\omega - W(\bar{k}) + \mu)^2 + \varepsilon^2}, \quad (173)$$

$$n^{(0)}(\bar{k}) = \left[1 + e^{\frac{W(\bar{k}) - \mu}{kT}} \right]^{-1}. \quad (174)$$

Из (171), (173) следует, что при $\omega = 0$ $\operatorname{Im} G^{c(0)} = 0$.

Подставим приближенное выражение $\tilde{\Gamma}$ (126) в (119, 120):

$$M(x, y) = -ie^2 (\gamma^0)^2 G^c(x, y) D_{00}^{c'}(y, x), \quad (175)$$

$$P^{00}(x, y) = -ie^2 \text{Spr} \gamma^0 G^c(x, y) \gamma^0 G^c(x, y). \quad (176)$$

Далее у потенциала $\tilde{\Phi}$, поляризационного оператора P и функции Грина $D^{c'}$ не будем выписывать нулевые индексы, считая, что отличны от нуля только эти компоненты. В нерелятивистском случае остаются матрицы размерностью (2×2) в пространстве спинов, $\gamma^0 = I$. Подставим в (175, 176) функции Грина в представлении Фурье (154):

$$M(k) = -ie^2 \int dk' G^c(k') D^{c'}(k' - k), \quad (177)$$

$$P(k) = -ie^2 2 \int dk' G^c(k') G^c(k' - k). \quad (178)$$

В первом приближении коэффициенты Фурье поляризационного оператора вычислим с помощью функции $G^{c(0)}(k)$ (172):

$$P(k) = -i \frac{e^2 2}{(2\pi)^8} \int dk' \left\{ \frac{n^{(0)}(\vec{k}') n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k})}{(\omega' - W(\vec{k}') + \mu - i\varepsilon)(\omega' - \omega - W(\vec{k}' - \vec{k}) + \mu - i\varepsilon')} + \frac{n^{(0)}(\vec{k}') (1 - n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k}))}{(\omega' - W(\vec{k}') + \mu - i\varepsilon)(\omega' - \omega - W(\vec{k}' - \vec{k}) + \mu + i\varepsilon')} + \frac{(1 - n^{(0)}(\vec{k}')) n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k})}{(\omega' - W(\vec{k}') + \mu + i\varepsilon)(\omega' - \omega - W(\vec{k}' - \vec{k}) + \mu - i\varepsilon')} + \frac{(1 - n^{(0)}(\vec{k}')) (1 - n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k}))}{(\omega' - W(\vec{k}') + \mu + i\varepsilon)(\omega' - \omega - W(\vec{k}' - \vec{k}) + \mu + i\varepsilon')} \right\}. \quad (179)$$

При интегрировании по ω' контур интегрирования замкнем в верхней полуплоскости, так как по определению $G^c(\vec{x}, \vec{x}', t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$, тогда

$$P(k) = \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \int d\vec{k}' n^{(0)}(\vec{k}') \left\{ \frac{1}{W(\vec{k}') - W(\vec{k}' - \vec{k}) - \omega + i\varepsilon} + \right.$$

$$+ \frac{1}{W(\vec{k}') - W(\vec{k}' + \vec{k}) + \omega + i\varepsilon} + \frac{2i\varepsilon n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k})}{(W(\vec{k}') - W(\vec{k}' - \vec{k}) - \omega)^2 + \varepsilon^2} \Big\}, \quad (180)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} P(k) = & \frac{2e^2}{(2\pi)^7} \int d\vec{k}' n^{(0)}(\vec{k}') \left\{ \frac{1}{W(\vec{k}') - W(\vec{k}' - \vec{k}) - \omega} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{W(\vec{k}') - W(\vec{k}' + \vec{k}) + \omega} \right\}, \quad (181) \end{aligned}$$

$\operatorname{Im} P(k) \neq 0$, если $W(\vec{k}') - W(\vec{k}' \mp \vec{k}) \mp \omega = 0$ при $\varepsilon = 0$, т.е. если выполняется закон сохранения.

Допустим, что зависимость энергии от квазиволнового вектора параболическая: $W(\vec{k}) = \vec{k}^2/2m$. Тогда (180) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} P(k) = & \frac{2e^2}{(2\pi)^6} \int_0^\infty |\vec{k}'|^2 d|\vec{k}'| \int_{-1}^1 dx n^{(0)}(\vec{k}') \left\{ \frac{m}{|\vec{k}'||\vec{k}| \left(x - \frac{|\vec{k}|}{2|\vec{k}'|} - \frac{\omega m}{|\vec{k}'||\vec{k}|} + i\varepsilon \right)} - \right. \\ & \left. - \frac{m}{|\vec{k}'||\vec{k}| \left(x + \frac{|\vec{k}|}{2|\vec{k}'|} - \frac{\omega m}{|\vec{k}'||\vec{k}|} - i\varepsilon \right)} + \frac{2i\varepsilon n^{(0)}(\vec{k}' - \vec{k})}{\left(\frac{|\vec{k}'||\vec{k}|}{m} x - \frac{|\vec{k}|^2}{2m} - \omega \right)^2 + \varepsilon^2} \right\}. \quad (182) \\ \operatorname{Im} P(k) = & \frac{2e^2}{(2\pi)^6} \int_0^\infty |\vec{k}'|^2 d|\vec{k}'| \int_{-1}^1 dx n^{(0)}(\vec{k}') \left\{ -\frac{\pi m}{|\vec{k}'||\vec{k}|} \delta \left(x - \frac{|\vec{k}|}{2|\vec{k}'|} - \frac{\omega m}{|\vec{k}'||\vec{k}|} \right) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\pi m}{|\bar{k}'||\bar{k}|} \delta \left(x + \frac{|\bar{k}|}{2|\bar{k}'|} - \frac{\omega m}{|\bar{k}'||\bar{k}|} \right) + \frac{2\pi m}{|\bar{k}'||\bar{k}|} \delta \left(x - \frac{|\bar{k}|}{2|\bar{k}'|} - \frac{\omega m}{|\bar{k}'||\bar{k}|} \right) n^{(0)} \left(\frac{|\bar{k}'|^2}{2m} - \omega \right) \Bigg\} = \\
& = -\frac{2e^2 m^2 k \Gamma}{(2\pi)^5 |\bar{k}|} n^{(0)} \left(\frac{|\bar{k}|}{2} \right). \quad (183)
\end{aligned}$$

При $T = 0$ из (183) следует, что $\text{Im } P(k) = 0$, тогда

$$P(k) = \text{Re } P(k).$$

Для вычисления $\text{Re } P(k)$ перейдем в гауссову систему единиц, заменим e^2 на $4\pi e^2/\varepsilon$ (ε – диэлектрическая проницаемость среды) и введем безразмерные величины

$$\frac{|\bar{k}|}{|\bar{k}_F|} \rightarrow k, \quad \frac{\omega}{\mu} \rightarrow \omega, \quad \mu = \frac{\hbar^2 |\bar{k}_F|^2}{2m}, \quad (184)$$

где k_F – значение квазиимпульса, соответствующее уровню Ферми. Получим $\text{Re } P(k)$ при $T = 0$ в безразмерном виде:

$$\begin{aligned}
\text{Re } P(k) = & \frac{g_r^2}{(2\pi)^4} \left\{ \frac{4k^2 - k^4 - \omega^2}{8k^3} \ln \left| \frac{\omega^2 - (2k - k^2)^2}{\omega^2 - (2k + k^2)^2} \right| - \right. \\
& \left. - \frac{\omega}{4k} \ln \left| \frac{(\omega - 2k)^2 - k^4}{(\omega + 2k)^2 - k^4} \right| - 1 \right\}, \quad (185)
\end{aligned}$$

$$\text{где } g_r^2 = \frac{2e^2 m}{\pi \varepsilon k_F \hbar^2} = \frac{2}{(3\pi^5)^{1/3} n^{1/3} a_B} = \frac{3,8886 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}}{\varepsilon n^{1/3}} \left(\frac{m}{m_0} \right) \ll 1.$$

Здесь n – концентрация электронов.

В (161) подставим $P(\bar{k}; 0) = \text{Re } P(\bar{k}; 0)$, тогда

$$P(\vec{k};0) = \frac{g_r^2}{(2\pi)^4} \left\{ \frac{4-k^2}{4k} \ln \left| \frac{2-k}{2+k} \right| - 1 \right\}, \quad (186)$$

где k – безразмерная величина. Потенциал $\tilde{\Phi}(x)$ – периодическая функция с периодом сверхрешетки, следовательно, он может быть разложен по векторам обратной сверхрешетки \vec{K}_ξ :

$$\tilde{\Phi}(x) = \sum_{\vec{K}_\xi} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi) e^{i\vec{K}_\xi \cdot \vec{x}}, \quad (187)$$

$$\tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi) = \frac{1}{\Omega_{sl}} \int_{\Omega_{sl}} d\vec{x} \tilde{\Phi}(\vec{x}) e^{-i\vec{K}_\xi \cdot \vec{x}}, \quad (188)$$

где Ω_{sl} – объем элементарной ячейки сверхрешетки. Подставим (161) в (188):

$$\tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{-|e|Z}{V(2\pi)^3} \sum_{\vec{R}} \int_V d\vec{x} e^{i\vec{x} \cdot (\vec{k} - \vec{K}_\xi)} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}}}{k^2 - (2\pi)^4 P(\vec{k};0)} - C \delta_{\vec{K}_\xi, 0}. \quad (189)$$

Учитывая, что объем сверхрешетки достаточно велик, при интегрировании по пространственным координатам получим $(2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{K}_\xi)$. Постоянную C примем такой, чтобы $\tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi = 0) = 0$. В результате получим

$$\tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi) = \begin{cases} -\frac{|e|Zi}{\Omega_{sl}(\vec{K}_\xi^2 - (2\pi)^4 P(\vec{K}_\xi;0))} & \text{при } \vec{K}_\xi \neq 0, \\ 0 & \text{при } \vec{K}_\xi = 0, \end{cases} \quad (190)$$

где i – число атомов в элементарной ячейке сверхрешетки. Группа симметрии сверхрешетки должна быть подгруппой симметрии исходной решетки. Исходная решетка – ГЦК, поэтому возможны сверхрешетки типа ОЦК, ГЦК и простая кубическая.

Найдем приближенное значение коэффициентов Фурье массового оператора в гауссовой системе единиц, для этого в (177) подставим $G^{(0)}$ (172) и $D^{(c)}$ (156):

$$M(\vec{k}) = \frac{ie^2 k_F}{\varepsilon (2\pi)^8} \int d\omega' d\vec{k}' \left\{ \frac{n^{(0)}(\vec{k}')}{\omega' - k'^2 + 1 - i\varepsilon'} + \frac{1 - n^{(0)}(\vec{k}')}{\omega' - k'^2 + 1 + i\varepsilon'} \right\} \times$$

$$\times \frac{1}{|\bar{k}' - \bar{k}|^2 - (2\pi)^4 P(k' - k)}, \quad (191)$$

где ω', \bar{k}' – безразмерные величины (184); $P(k) = \text{Re} P(k)$ (185). При интегрировании по ω' в (191) замыкаем контур интегрирования в верхней полуплоскости:

$$M(k) = -\frac{e^2 k_F}{\varepsilon(2\pi)^7} \int d\bar{k}' \frac{n^{(0)}(\bar{k}')}{|\bar{k}' - \bar{k}|^2 - (2\pi)^4 P(\bar{k}' - \bar{k}; \bar{k}'^2 - 1 - \omega)}. \quad (192)$$

При $T = 0$ из (174) следует, что $n^{(0)}(\bar{k}') = \theta(\mu - W(\bar{k}'))$, поэтому в безразмерных единицах (184) $|\bar{k}'| \leq 1, |\bar{k}| \leq 1$. В рассматриваемых далее случаях $g_r^2 \ll 1$, вот почему вклад от поляризационного оператора в подынтегральном выражении (192) существует при $|\bar{k}' - \bar{k}|^2 \ll 1$. При дальнейшей работе с электронной функцией Грина вклад будут давать $\omega \sim W(k) - \mu$. На основе этих рассуждений в (192) можно заменить $P(\bar{k}' - \bar{k}; \bar{k}'^2 - 1 - \omega)$ на $P(0;0)$:

$$M(k) \approx -\frac{e^2 k_F}{\varepsilon(2\pi)^7} \int d\bar{k}' \frac{n^{(0)}(\bar{k}')}{|\bar{k}' - \bar{k}|^2 - (2\pi)^4 P(0;0)}. \quad (193)$$

Определим радиус экранирования Дебая r_0 в безразмерных единицах:

$$r_0^{-2} = (2\pi)^4 |P(0;0)|. \quad (194)$$

При переходе к размерным единицам r_0^{-1} умножим на k_F :

$$r_0^{-1} = 2 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/6} \sqrt{\frac{n^{1/3}}{a_B}}, \quad (195)$$

где a_B – боровский радиус. В результате (193) примет следующий вид:

$$M(k) = -\frac{e^2 k_F}{\varepsilon (2\pi)^6} \int_0^1 k'^2 dk' \int_{-1}^1 \frac{dx}{k'^2 - 2k'kx + k^2 + r_0^{-2}}. \quad (196)$$

Вычислив интегралы в (196), получим

$$M(\vec{k}) = -\frac{g_F^2}{(2\pi)^4} \mu \left\{ 1 + \frac{k_F^2 - k^2 + r_0^{-2}}{4k_F k} \ln \frac{(k_F + k)^2 + r_0^{-2}}{(k_F - k)^2 + r_0^{-2}} - \frac{1}{r_0 k_F} [\arctg r_0 (k_F + k) - \arctg r_0 (k - k_F)] \right\}. \quad (197)$$

Поправка к энергии за счет обменного взаимодействия

$$\varepsilon_{\text{ex}}(\vec{k}) = (2\pi)^4 M(\vec{k}). \quad (198)$$

2.6. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ С ПРИМЕСНОЙ СВЕРХРЕШЕТКОЙ

Для вычисления энергетического спектра электронов воспользуемся запаздывающей функцией Грина $G^r(x, x')$. Уравнения для $G^r(x, x')$ такие же, как и для $G^c(x, x')$, однако ее аналитические свойства проще. Функция Грина $G^r(\vec{k}; \omega)$ аналитична в верхней полуплоскости переменной ω .

Пусть \vec{k} – квазиволновой вектор, принимающий значения в первой зоне Бриллюэна сверхрешетки, а \vec{K}_ξ – вектор обратной сверхрешетки.

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\bar{r} e^{i(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{K}_\xi - \vec{K}'_\xi) \cdot \bar{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \delta_{\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi}, \quad (199)$$

$$\sum_{\vec{K}_\xi \text{ т.б.}} \int d\bar{k} e^{i(\vec{k} + \vec{K}_\xi) \cdot (\bar{x} - \bar{x}')} = (2\pi)^3 \delta(\bar{x} - \bar{x}'). \quad (200)$$

Функцию $G^r(\bar{x}, \bar{x}'; \omega)$ представим в виде

$$G^r(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = \sum_{\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi} \int d\vec{k} d\vec{k}' e^{i(\vec{k} + \vec{K}_\xi) \cdot \bar{x}} G^r(\vec{k}, \vec{K}_\xi; \vec{k}', \vec{K}'_\xi; \omega) e^{-i(\vec{k}' + \vec{K}'_\xi) \cdot \bar{x}'}, \quad (201)$$

$$G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi; \bar{k}', \bar{K}'_\xi; \omega) = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\bar{x} d\bar{x}' e^{-i(\bar{k} + \bar{K}_\xi)\bar{x}} G^r(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) e^{i(\bar{k}' + \bar{K}'_\xi)\bar{x}'}. \quad (202)$$

Из уравнения (150) для функции G^r получим

$$\begin{aligned} & [\omega + i\varepsilon + \mu - W(\bar{k} + \bar{K}_\xi) - (2\pi)^4 M(\bar{k} + \bar{K}_\xi)] G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi; \omega) + \\ & + e\Gamma \sum_{\bar{K}_v \neq 0} \tilde{\Phi}(\bar{K}_v) G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi - \bar{K}_v, \bar{K}'_\xi; \omega) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \delta_{\bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi}, \end{aligned} \quad (203)$$

где

$$G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi; \bar{k}', \bar{K}'_\xi; \omega) = \delta(\bar{k} - \bar{k}') G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi; \omega), \quad (204)$$

$$G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi; \omega) = G^r(\bar{k}, \bar{K}'_\xi, \bar{K}_\xi; \omega), \quad (205)$$

$$\tilde{\Phi}(\bar{K}_v) = \tilde{\Phi}(-\bar{K}_v). \quad (206)$$

Преобразуем уравнение (203):

$$\begin{aligned} G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi; \omega) = & -\frac{\delta_{\bar{K}_\xi, \bar{K}'_\xi}}{(2\pi)^4 (\omega + i\varepsilon + \mu - W(\bar{k} + \bar{K}_\xi) - (2\pi)^4 M(\bar{k} + \bar{K}_\xi))} - \\ & - e\Gamma \sum_{\bar{K}_v \neq 0} \tilde{\Phi}(\bar{K}_v) G^r(\bar{k}, \bar{K}_\xi - \bar{K}_v, \bar{K}'_\xi; \omega). \end{aligned} \quad (207)$$

Оценим вклад второго слагаемого в правой части уравнения (207). Вектор обратной сверхрешетки $|\bar{K}_v| \sim \frac{2\pi\alpha}{d}$, где $\alpha = 1$ для простой кубической сверхрешетки, $\alpha = \sqrt{2}$ для ОЦК, $\alpha = \sqrt{3}$ для ГЦК, $d = \left(\frac{zi}{n}\right)^{1/3}$ – период сверхрешетки, i – число атомов в элементарной ячейке сверхрешетки ($i = 1$ – простая кубическая сверхрешетка, $i = 2$ – ОЦК, $i = 4$ – ГЦК). В безразмерных единицах (184) $|\bar{K}_v| \sim 2\alpha \left(\frac{\pi}{3zi}\right)^{1/3} \geq 1$, тогда из (190) получим

$$e\tilde{\Phi}(\bar{K}_v \neq 0) = \frac{4}{3} g_r^2 \frac{1}{|\bar{K}_v|^2 - (2\pi)^4 P(\bar{K}_v; 0)} \ll 1. \quad (208)$$

В силу (208) второе слагаемое в правой части уравнения (207) можно рассматривать как малое возмущение.

Пусть \vec{K}_ξ принимает N значений, $N(N+1)/2$ различных компонент $G^r(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi; \omega)$ рассмотрим как компоненты вектора в $N(N+1)/2$ -мерном пространстве, введем сокращенное обозначение $G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi) = G^r(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi; \omega)$. Уравнение (203) запишем в виде

$$\begin{aligned} & (E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\xi) + i\varepsilon)G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi) + \\ & + e\Gamma \sum_{\vec{K}_v \neq \vec{K}_\xi} \tilde{\Phi}(\vec{K}_v - \vec{K}_\xi)G^r(\vec{K}_v, \vec{K}'_\xi) = -\frac{\delta_{\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi}}{(2\pi)^4}, \end{aligned} \quad (209)$$

где $E = \omega + \mu$, $W_r(\vec{k} + \vec{K}_\xi) = W(\vec{k} + \vec{K}_\xi) + (2\pi)^4 M(\vec{k} + \vec{K}_\xi)$.

Спектр одночастичных электронных состояний найдем, приравняв к нулю определитель системы уравнений (209). Зонная структура возникает как следствие брэгговского отражения электрона от атомных плоскостей кристаллической решетки. Энергия электрона претерпевает разрывы на границах зон Бриллюэна, что в силу периодичности в пространстве векторов обратной решетки эквивалентно образованию зонной структуры, рассматриваемой в пределах первой зоны Бриллюэна. В кристалле, содержащем примесную сверхрешетку, следует ожидать расщепления заполненной основной зоны на подзоны вследствие брэгговского отражения от атомных плоскостей сверхрешетки.

В рассматриваемом случае электрическое поле является стационарным, а электроны – нерелятивистскими, поэтому в (209) можно принять $\Gamma=1$. Из (209) найдем

при $\vec{K}'_\xi = \vec{K}_\xi$

$$\begin{aligned} & (E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\xi) + i\varepsilon)G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi) + \\ & + e \sum_{\vec{K}_v \neq \vec{K}_\xi} \tilde{\Phi}(\vec{K}_v - \vec{K}_\xi)G^r(\vec{K}_v, \vec{K}_\xi) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \end{aligned} \quad (210)$$

при $\vec{K}'_\xi \neq \vec{K}_\xi$

$$(E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\xi) + i\varepsilon)G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi) +$$

$$+ e \sum_{\vec{k}_v \neq \vec{k}_\xi} \tilde{\Phi}(\vec{k}_v - \vec{k}_\xi) G^r(\vec{k}_v, \vec{k}'_\xi) = 0, \quad (211)$$

где $\vec{k} + \vec{k}_\xi$ принадлежит первой зоне Бриллюэна, соответствующей исходной матрице кристалла. Из (208, 210, 211) следует, что недиагональные элементы $G^r(\vec{k}_\xi, \vec{k}'_\xi)$ много меньше диагональных, поэтому в первом приближении

$$\begin{aligned} & G^r(\vec{k}_v, \vec{k}_\xi)_{\vec{k}_v \neq \vec{k}_\xi} = \\ & = \frac{e\tilde{\Phi}(\vec{k}_v - \vec{k}_\xi)}{(2\pi)^4 (E - W_r(\vec{k} + \vec{k}_v) + i\varepsilon)(E - W_r(\vec{k} + \vec{k}_\xi) + i\varepsilon)}, \quad (212) \\ & G^r(\vec{k}_v, \vec{k}_v) = \\ & = -\frac{1}{(2\pi)^4} \left(E - W_r(\vec{k} + \vec{k}_v) + i\varepsilon - e^2 \sum_{\vec{k}_\gamma \neq \vec{k}_v} \frac{\tilde{\Phi}^2(\vec{k}_\gamma - \vec{k}_v)}{E - W_r(\vec{k} + \vec{k}_\gamma)} \right)^{-1}. \quad (213) \end{aligned}$$

Если один из векторов $\vec{k} + \vec{k}_v$ или $\vec{k} + \vec{k}_\xi$ выходит за пределы первой зоны Бриллюэна исходного кристалла, то $G^r(\vec{k}_v, \vec{k}_\xi) = 0$. При \vec{k}_γ таком, что $W_r(\vec{k} + \vec{k}_\gamma) \neq W_r(\vec{k} + \vec{k}_v)$, полюса функции Грина (213) дают энергетический спектр

$$E(\vec{k} + \vec{k}_v) = W_r(\vec{k} + \vec{k}_v) + \sum_{\vec{k}_\gamma \neq \vec{k}_v} \frac{(e\tilde{\Phi}(\vec{k}_\gamma - \vec{k}_v))^2}{W_r(\vec{k} + \vec{k}_v) - W_r(\vec{k} + \vec{k}_\gamma)}. \quad (214)$$

Энергетический спектр в симметричных точках первой зоны Бриллюэна сверхрешетки будет рассмотрен далее.

2.7. ЭНЕРГИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХРЕШЕТКИ

Внутренняя энергия рассматриваемой системы на основе соотношений (37, 38) имеет вид

$$\langle \hat{H}' \rangle = \text{Sp} \left\{ e^{\beta(\Omega - \hat{H}')} \hat{H}' \right\}, \quad (215)$$

где

$$\Omega = -\beta^{-1} \ln \text{Spe}^{-\beta \hat{H}'}. \quad (216)$$

Термодинамический потенциал Ω является решением уравнения Гиббса – Гельмгольца

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \beta} = -\beta^{-1} \Omega + \beta^{-1} \langle \hat{H}' \rangle. \quad (217)$$

Интегрируя (217), получим

$$\Omega = \beta^{-1} \int_{\beta_m}^{\beta} d\beta' \langle \hat{H}' \rangle + C\beta^{-1}, \quad (218)$$

где C , β_m – постоянные. Вычислим Sp в среднем $\langle \hat{H}' \rangle$, содержащемся в уравнении (218), в системе собственных функций гамильтониана \hat{H}' , тогда

$$\begin{aligned} \Omega &= \beta^{-1} \sum_n \int_{\beta_m}^{\beta} d\beta' e^{\beta'(\Omega - E_n)} E_n + \beta^{-1} C = \\ &= \beta^{-1} \sum_n \frac{E_n}{\Omega - E_n} \left[e^{\beta(\Omega - E_n)} - e^{\beta_m(\Omega - E_n)} \right] + \beta^{-1} C, \end{aligned} \quad (219)$$

где E_n – собственные значения \hat{H}' . Считаем, что Ω – конечная величина, отличная от нуля, при $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$). Из (219) получим, что

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \Omega = E_0, \quad (220)$$

где E_0 – энергия основного состояния системы.

Среднее значение $\langle \hat{H}' \rangle$ определим, используя (46–48, 55–57),

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}' \rangle &= \int d\bar{x} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + U_L - \mu \right\} \text{Sp} \langle a^+(x') a(x) \rangle - \\ &- \int d\bar{x} e^{\xi} \text{Sp} \langle a^+(x') a(x) A_{\xi} \rangle - \int d\bar{x} \tilde{J}^{\xi}(x) \langle A_{\xi}(x) \rangle + \langle \hat{H}_T \rangle, \end{aligned} \quad (221)$$

где Sp берется по спиновым индексам. Введем обозначение

$$I_{\alpha\beta}(x, x') = \langle a_{\beta}^+(x') a_{\alpha}(x) \rangle. \quad (222)$$

Используя (65), получим

$$i \frac{\partial}{\partial t} I_{\alpha\beta}(x, x') = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x + U_L - \mu \right\} I_{\alpha\beta}(x, x') - e\gamma^\xi \langle a_\beta^+(x') a_\alpha(x) A_\xi(x) \rangle. \quad (223)$$

Подставим (223) в (221):

$$\langle \hat{H}' \rangle = \int d\vec{x} i \frac{\partial}{\partial t} \text{Sp} I(x, x') \Big|_{x' \rightarrow x} - \int d\vec{x} \tilde{J}^\xi(x) \tilde{A}_\xi(x) + \langle \hat{H}_f \rangle. \quad (224)$$

Воспользуемся преобразованием Фурье для $I_{\alpha\beta}$:

$$\langle \hat{H}' \rangle = \int d\vec{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \text{Sp} I(\vec{x}, \vec{x}; \omega) - \int d\vec{x} \tilde{J}^\xi(x) \tilde{A}_\xi(x) + \langle \hat{H}_f \rangle. \quad (225)$$

Найдем связь между $I_{\alpha\beta}(\vec{x}, \vec{x}; \omega)$ и $G_{\alpha\beta}^r(\vec{x}, \vec{x}; \omega)$. Пусть $|m_N\rangle$ (m -квантовое состояние системы из N частиц) – собственное состояние \hat{H}' . Вычислим средние значения, используя базис состояний $|m_N\rangle$:

$$\langle n | a_\alpha(\vec{x}, t) | m \rangle = \langle n | e^{\frac{i\hat{H}'t}{\hbar}} a_\alpha(\vec{x}) e^{-\frac{i\hat{H}'t}{\hbar}} | m \rangle = e^{\frac{i(E'_n - E_m)}{\hbar}} \langle n | a_\alpha(\vec{x}) | m \rangle, \quad (226)$$

$$E'_n - E'_m = E_n(N-1) - E_m(N) + \mu, \quad (227)$$

$$\begin{aligned} I_{\beta\alpha}(x, x') &= \langle a_\alpha^+(\vec{x}', t'), a_\beta(\vec{x}, t) \rangle = \sum_{n, m, l} \langle n | \rho | m \rangle \langle m | a_\alpha^+(\vec{x}', t') | l \rangle \langle l | a_\beta(\vec{x}, t) | n \rangle = \\ &= \sum_{N, n, l} \exp \left\{ -\frac{i(E_n(N) - E_l(N-1) - \mu)(t - t')}{\hbar} \right\} \exp \{ \beta(\Omega + \mu N - E_n) \} \times \\ &\quad \times \langle n_N | a_\alpha^+(\vec{x}') | l_{N-1} \rangle \langle l_{N-1} | a_\beta(\vec{x}) | n_N \rangle, \quad (228) \\ \langle a_\beta(\vec{x}, t) a_\alpha^+(\vec{x}', t') \rangle &= \sum_{N, n, l} \exp \left\{ -\frac{i(E_n(N) - E_l(N-1) - \mu)(t - t')}{\hbar} \right\} \times \\ &\times \exp \{ \beta(\Omega + \mu(N-1) + E_l(N-1)) \} \langle n_N | a_\alpha^+(\vec{x}') | l_{N-1} \rangle \langle l_{N-1} | a_\beta(\vec{x}) | n_N \rangle. \quad (229) \end{aligned}$$

Введем обозначение

$$A_{m_N}^\beta(\vec{x}) = \langle l_{N-1} | a_\beta(\vec{x}) | n_N \rangle. \quad (230)$$

$$G_{\beta\alpha}^r(\vec{x}, \vec{x}', t - t') = i\theta(t - t') \times$$

$$\times \left[\sum_{N, n, l} \exp \left\{ -\frac{i(E_n(N) - E_l(N-1) - \mu)(t - t')}{\hbar} \right\} \right] \times$$

$$\times \exp\{\beta(\Omega + \mu N - E_n)\} A_{\ln N}^{\alpha}(\bar{x}') A_{\ln N}^{\beta}(\bar{x}) \times \\ \times (1 + \exp\{\beta(E_n(N) - E_1(N-1) - \mu)\}) \}. \quad (231)$$

Перейдем к макроскопическому пределу и заменим в (228, 229, 231) суммирование интегрированием по ω :

$$I_{\beta\alpha}(x, x') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} I_{\beta\alpha}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega), \quad (232)$$

$$G_{\beta\alpha}^r(x, x') = i\theta(t-t') \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} I_{\beta\alpha}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) (1 + e^{\beta\omega}), \quad (233)$$

$$G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}', t) = \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega')}{\omega' - \omega - i\varepsilon} (1 + e^{\beta\omega'}). \quad (234)$$

Аналогично покажем, что

$$G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon} (1 + e^{\beta\omega'}), \quad (235)$$

$$G_{\alpha\beta}^c(\bar{x}, \bar{x}'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega') e^{\beta\omega'}}{\omega' - \omega - i\varepsilon} + \\ + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}'; \omega')}{\omega' - \omega + i\varepsilon}. \quad (236)$$

$G_{\alpha\beta}^r$ аналитична в верхней полуплоскости ($\text{Im } \omega > 0$), $G_{\alpha\beta}^r$ – в нижней ($\text{Im } \omega < 0$), а $G_{\alpha\beta}^c$ неаналитична. Из (228, 232) следует, что $I_{\alpha\beta}(x, \bar{x}'; \omega)$ вещественны и неотрицательны.

Из (234–236) получим дисперсионные соотношения для диагональных элементов функций Грина:

$$\text{Re } G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega')}{\omega' - \omega} (1 + e^{\beta\omega'}), \quad (237)$$

$$\text{Im } G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{2} I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega) (1 + e^{\beta\omega}), \quad (238)$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega)}{\omega' - \omega} (1 + e^{\beta\omega'}), \quad (239)$$

$$\operatorname{Im} G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = -\frac{1}{2} I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega) (1 + e^{\beta\omega}), \quad (240)$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha\beta}^c(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega')}{\omega' - \omega} (e^{\beta\omega'} + 1), \quad (241)$$

$$\operatorname{Im} G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{2} I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega) (e^{\beta\omega} - 1), \quad (242)$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega')}{\omega' - \omega}, \quad (243)$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G_{\alpha\beta}^a(\bar{x}, \bar{x}; \omega')}{\omega' - \omega}, \quad (244)$$

$$\operatorname{Re} G_{\alpha\beta}^c(\bar{x}, \bar{x}; \omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} G_{\alpha\beta}^c(\bar{x}, \bar{x}; \omega')}{\omega' - \omega} \frac{(1 + e^{\beta\omega})}{(1 - e^{\beta\omega'})}. \quad (245)$$

Выразим $I_{\alpha\beta}(\bar{x}, \bar{x}; \omega)$ через $G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega)$ из (238) и подставим в (225):

$$\langle \hat{H}' \rangle = 2 \int d\bar{x} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \frac{\operatorname{Sp} \operatorname{Im} G^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega)}{1 + e^{\beta\omega}} - \int d\bar{x} \tilde{J}^{\xi}(x) \tilde{A}_{\xi}(x) + \langle \hat{H}_f \rangle. \quad (246)$$

Для функции $G_{\alpha\beta}^r(\bar{x}, \bar{x}; \omega)$ воспользуемся представлением (201), тогда (246) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \langle \hat{H}' \rangle &= 4(2\pi)^3 \sum_{\bar{K}_{\xi}} \int d\bar{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \frac{\operatorname{Im} G^r(\bar{k}, \bar{K}_{\xi}; \bar{k}, \bar{K}_{\xi}; \omega)}{1 + e^{\beta\omega}} - \\ &\quad - \int d\bar{x} \tilde{J}^{\xi}(x) \tilde{A}_{\xi}(x) + \langle \hat{H}_f \rangle. \end{aligned} \quad (247)$$

Из соотношения (204) следует, что в первом слагаемом в правой части (247) содержится δ -функция при нулевом значении аргумента. В этом случае δ -функцию следует интерпретировать как $V/(2\pi)^3$, где объем системы $V \rightarrow \infty$. Тогда (247) примет вид

$$\frac{\langle \hat{H}' \rangle}{V} = A + B, \quad (248)$$

$$A = 4 \sum_{\vec{k}_\xi} \int d\vec{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \frac{\text{Im} G^r(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi; \omega)}{1 + e^{\beta\omega}}, \quad (249)$$

$$B = -\frac{1}{V} \int d\vec{x} \tilde{J}^\xi(x) \tilde{A}_\xi(x) + \frac{1}{V} \langle \hat{H}_f \rangle. \quad (250)$$

Упростим выражение для вычисления коэффициента B, для этого преобразуем выражение (46):

$$\begin{aligned} \hat{H}_f = & -\frac{1}{2} \int d\vec{x} \sum_\alpha g^{\alpha\alpha} : \left\{ -\frac{1}{c^2} A_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x^0} \right)^2 A_\alpha - \sum_i A_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right)^2 A_\alpha \right\} : - \\ & -\frac{1}{2} \int d\vec{x} \sum_\alpha g^{\alpha\alpha} : \left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial x^0} \left(A_\alpha \frac{\partial}{\partial x^0} A_\alpha \right) + \sum_i \frac{\partial}{\partial x^i} \left(A_\alpha \frac{\partial}{\partial x^i} A_\alpha \right) \right\} :. \end{aligned} \quad (251)$$

Согласно постановке задачи электромагнитное поле стационарно, система в целом электронейтральна, поэтому

$$\hat{H}_f = \frac{1}{2} \sum_\alpha g^{\alpha\alpha} \int d\vec{x} : \left\{ \sum_i A_\alpha \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \right)^2 A_\alpha \right\} :. \quad (252)$$

Из уравнения (61) и выражения (252) следует, что в рассматриваемом случае

$$\hat{H}_f = \frac{1}{2} \int d\vec{x} A_\alpha J^\alpha. \quad (253)$$

Подставив (48, 253) в (250), получим

$$B = \frac{e}{2V} \int d\vec{x} \gamma^\xi \text{Sp} \langle a^+(x) a(x) A_\xi(x) \rangle - \frac{1}{2V} \int d\vec{x} \langle \tilde{J}^\xi(x) A_\xi(x) \rangle. \quad (254)$$

Найдем коэффициент A (249). Из выражения (214) получим химический потенциал

$$\mu = W_r(\vec{k}_F) - \sum_{\vec{k}_\gamma \neq 0} \frac{(e\Phi(\vec{k}_\gamma))^2}{W_r(\vec{k}_F + \vec{k}_\gamma) - W_r(\vec{k}_F)}, \quad (255)$$

где $|\vec{k}_F|$ определяется концентрацией электронов n:

$$|\vec{k}_F| = (3\pi^2 n)^{1/3}. \quad (256)$$

При $\beta \rightarrow \infty$ вклад в интеграл по ω в (249) дает $\omega = E - \mu \leq 0$. Расстояние между ближайшими соседями для обратной сверхрешетки $|\vec{K}_1| = 2\pi\alpha \left(\frac{n}{z_1}\right)^{1/3} \sim k_F$, т.е. заполнена первая зона Бриллюэна. Поэтому в $\sum_{\vec{K}_\xi}$ в (249) дает вклад только $\vec{K}_\xi = 0$,

$$A = 4 \int d\vec{k} \int_{-\infty}^0 d\omega \omega \operatorname{Im} G^r(\vec{k}, 0, 0; \omega). \quad (257)$$

Из (213) следует, что

$$\operatorname{Im} G^r(\vec{k}, 0, 0; \omega) = \frac{\pi}{(2\pi)^4} \delta(\omega + \mu - E(\vec{k})). \quad (258)$$

Зависимость $E(\vec{k})$ получим из (214):

$$E(\vec{k}) = W_r(\vec{k}) - \sum_{\vec{K}_\gamma \neq 0} \frac{(e\tilde{\Phi}(\vec{K}_\gamma))^2}{W_r(\vec{k} + \vec{K}_\gamma) - W_r(\vec{k})}. \quad (259)$$

Подставим (258) в (257) и проинтегрируем по ω :

$$A = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} E(\vec{k}) \theta(\mu - E(\vec{k})) - \mu n. \quad (260)$$

Используя (190, 197, 209, 255, 259) и закон дисперсии

$W(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$, получим в первом приближении

$$A = -\mu^0 n \left\{ \frac{2}{5} + \frac{g_r^2}{2} \left[1 - \frac{1}{2k_{F0}^2} + \left(\frac{1}{8k_{F0}^4} + \frac{1}{k_{F0}^2} \right) \ln((2k_{F0})^2 + 1) - \frac{2}{k_{F0}} \operatorname{arctg}(2k_{F0}) \right] \right\}, \quad (261)$$

где $\mu^0 = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$. Из (208, 259) следует, что вклад от членов, со-

держащих $(e\tilde{\Phi})^2$, имеет порядок g_r^4 , поэтому этим вкладом в коэффициент A пренебрегаем.

Найдем коэффициент В (254). Рассмотрим первое слагаемое в правой части (254). В силу (70)

$$\left\langle a_{\beta}^{+}(x)a_{\beta}(x)A_{\xi}(x) \right\rangle = iR_{\beta\beta}^c(x, x') \quad (262)$$

$x' \rightarrow x, x' > x^0$

Из выражений (87, 89) найдем

$$R_{\beta\beta}^c(x, x') = -i \left[\frac{\delta G_{\beta\beta}^c(x, x'; J)}{\delta J(x)} + iG_{\beta\beta}^c(x, x'; J)\tilde{\Phi}(x; J) \right]_{J \rightarrow 0} \quad (263)$$

Подставим (112) в (263), учтем (110), тогда получим

$$e\Gamma R^c(x, x') = -\int dy M(x, y)G^c(y, x') + e\Gamma\tilde{\Phi}(x)G^c(x, x'). \quad (264)$$

Используя (262, 264), преобразуем выражение (254) для коэффициента В:

$$B = -\frac{i}{2V} \left[\int_{x' \rightarrow x, x' > x^0} d\bar{x} dy \text{Sp} M(x, y)G^c(y, x') - e \int_{x' \rightarrow x, x' > x^0} d\bar{x} \tilde{\Phi}(x) \text{Sp} G^c(x, x') - i \int d\bar{x} \tilde{J} \tilde{\Phi} \right]. \quad (265)$$

В первом и втором интегралах в (265) в подынтегральных выражениях представим $\tilde{\Phi}(x)$, $G^c(y, x')$ и $M(x, y)$ в виде разложения по векторам обратной сверхрешетки (187, 201) и, используя (204), получим

$$B = -\frac{i(2\pi)^4}{2} \sum_{\vec{K}_{\xi}} \int d\omega d\bar{k} \text{Sp} M(\bar{k} + \vec{K}_{\xi}) G^c(\bar{k}, \vec{K}_{\xi}, \vec{K}_{\xi}; \omega) e^{-i\omega(t-t')} \Big|_{t' \rightarrow t, t' > t} +$$

$$+\frac{i}{2} \sum_{\vec{K}_{\xi} \neq \vec{K}'_{\xi}} e\tilde{\Phi}(\vec{K}'_{\xi} - \vec{K}_{\xi}) \int d\bar{k} d\omega \text{Sp} G^c(\bar{k}, \vec{K}_{\xi}, \vec{K}'_{\xi}; \omega) e^{-i\omega(t-t')} \Big|_{t' \rightarrow t, t' > t} -$$

$$-\frac{1}{2V} \int d\bar{x} \tilde{J} \tilde{\Phi}. \quad (266)$$

В силу (208, 212) второй член в правой части (266) пропорционален $(e\Phi)^2 \sim g_r^4$ и является малой величиной второго порядка,

поэтому им пренебрегаем. Первый член в правой части (266) содержит интеграл

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_{\alpha\beta}^c(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi; \omega) e^{i\omega(t'-t)} \Big|_{t' \rightarrow -t, t' > t} = \\ & = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' I_{\alpha\beta}(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi; \omega') e^{i\omega'(t'-t)} \Big|_{t' \rightarrow -t, t' > t}, \end{aligned} \quad (267)$$

при вычислении (267) использовано (236). Выразим $I_{\alpha\beta}$ из (238) через $\text{Im} G_{\alpha\beta}^r$ и подставим в (267), вычислим Sp по спиновым индексам в (266), в результате получим

$$\begin{aligned} B = & -2(2\pi)^4 \sum_{\vec{K}_\xi} \int d\vec{k} M(\vec{k} + \vec{K}_\xi) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Im} G^r(\vec{k}, \vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi; \omega)}{1 + e^{\beta\omega}} - \\ & - \frac{1}{2V} \int d\vec{x} \tilde{J} \tilde{\Phi}. \end{aligned} \quad (268)$$

При $\beta = \infty$ вклад в первый интеграл в правой части (268) дают только $\omega \leq 0$, т.е. состояния с $E \leq \mu$, принадлежащие первой зоне Бриллюэна сверхрешетки, поэтому в сумме $\sum_{\vec{K}_\xi}$ остается

одно слагаемое с $\vec{K}_\xi = 0$. Воспользуемся (258), тогда выражение (268) преобразуется к виду

$$B = -\frac{\pi}{2} \int_{|\vec{k}| < k_F} d\vec{k} M(\vec{k}) - \frac{1}{2V} \int d\vec{x} \tilde{J} \tilde{\Phi}. \quad (269)$$

Подставим (197) в (269) и вычислим первый интеграл в правой части (269) в первом приближении по g_r^2 :

$$B = \mu^0 n \frac{g_r^2}{4} \left[3 - \frac{4}{k_F r_0} \text{arctg}(2k_F r_0) \right] - \frac{1}{2V} \int d\vec{x} \tilde{J} \tilde{\Phi} \quad (270)$$

где учтено, что $(r_0 k_F)^{-2} = 2g_r^2$.

Используя (261, 270), приведем выражение (248) к виду

$$\frac{\langle \hat{H}' \rangle}{V} = A_e + J_i, \quad (271)$$

$$A_e = \mu^0 n \left[-\frac{2}{5} + \frac{g_r^2}{4} \right], \quad (272)$$

$$J_i = -\frac{1}{2V} \int d\vec{x} \tilde{J}(\vec{x}) \tilde{\Phi}(\vec{x}). \quad (273)$$

Величина $J_e = A_e + \mu n$ имеет смысл плотности энергии системы электронов с учетом электрон-ионного взаимодействия, а J_i – плотности энергии электромагнитного поля. Из (208, 255) в первом приближении получим $\mu = W_i(\vec{k}_F)$. Используя (197, 272), получим

$$J_e = \mu^0 n \left\{ \frac{3}{5} - \frac{g_r^2}{4} \left[3 - \frac{4}{k_F r_0} \arctg(2k_F r_0) \right] \right\}. \quad (274)$$

Найдем коэффициент J_i . Подставим (157, 187, 190) в (273):

$$\begin{aligned} J_i &= -\frac{|e|Z}{2V} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{K}_\xi} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi) \int d\vec{x} e^{i\vec{K}_\xi \cdot \vec{x}} \delta(\vec{x} - \vec{R}) = \\ &= \frac{e^2 n^2}{2} \sum_{\vec{K}_\xi \neq 0} \frac{1}{K_\xi^2 - (2\pi)^4 P(\vec{K}_\xi, 0)}. \end{aligned} \quad (275)$$

Выражение $\langle \hat{H}' \rangle / V$ содержит взаимодействие каждого точечного источника с самим собой, в результате величина J_i (275) оказывается бесконечной. Исключим это взаимодействие, воспользовавшись выражениями (105, 130, 155, 273), и выполним процедуру, аналогичную процедуре перенормировки в квантовой электродинамике [173]:

$$\begin{aligned} J_i' &= J_i - \frac{e^2 Z^2}{2V} \sum_{\vec{R}} \int d\vec{x} dx' \delta(\vec{x} - \vec{R}) D^c(x, x') \delta(\vec{x}' - \vec{R}) = \\ &= J_i - \frac{\pi e^2 Z^2}{V} \sum_{\vec{R}} D^c(\vec{R}, \vec{R}; \omega = 0). \end{aligned} \quad (276)$$

Используя представление Фурье (154, 156), а также формулы (160, 186), преобразуем (276) к виду

$$J_i' = J_i - \frac{e^2 n Z}{2(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{k}}{k^2 - (2\pi)^4 P(k; 0)}. \quad (277)$$

Далее будем применять величину J_i' вместо J_i и знак “штрих” опустим. Перейдем к безразмерным переменным суммирования и интегрирования в (277) с помощью нормировки (184):

$$J_i = \frac{2}{3} g_r^2 n \mu^0 \left\{ \sum_{\bar{i}_\xi \neq 0} \frac{1}{I_\xi^2 - (2\pi)^4 P(\bar{i}_\xi; 0)} - \frac{3z}{8\pi} \int \frac{d\bar{i}}{i^2 - (2\pi)^4 P(i; 0)} \right\}, \quad (278)$$

где $\bar{I}_\xi = \bar{K}_\xi / k_F$; $\bar{i} = \bar{k} / k_F$; плотность узлов в пространстве векторов \bar{I}_ξ для всех рассматриваемых сверхрешеток равна $3z/8\pi$. Подставим (186) в (278), величину J_i вычислим с точностью до слагаемых первого порядка малости по g_r^2 :

$$J_i \approx -g_r^2 n \mu^0 \left(2 - \frac{1}{r_0 k_F} \operatorname{arctg} 2r_0 k_F \right) + \frac{2}{3} g_r^2 n \mu^0 \left\{ \sum_{\bar{i}_v \neq 0} \frac{1}{I_v^2} - \frac{3z}{2} \int \frac{d\bar{i}}{i^2} \right\}. \quad (279)$$

Выражение в фигурных скобках в (279) есть разность двух бесконечных величин. Пусть I_L – радиус сферы, содержащей L узлов в пространстве обратной сверхрешетки,

$$\lim_{I_L \rightarrow \infty} \left\{ \sum_{\substack{\bar{i}_v \neq 0 \\ |\bar{i}_v| \leq I_L}} \frac{1}{I_v^2} - \frac{3z}{2} \int \frac{d\bar{i}}{i^2} \right\} = C_J < \infty. \quad (280)$$

Для вычисления предела в (280) проведем суммирование по узлам в пространстве обратной сверхрешетки. Для простой кубической и ОЦК сверхрешеток $C_J \approx 2$, для ГЦК сверхрешетки $C_J \approx 0,88$. В результате для простой кубической и ОЦК сверхрешеток

$$J_i \approx -g_r^2 n \mu^0 \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{r_0 k_F} \operatorname{arctg} 2r_0 k_F \right), \quad (281)$$

для ГЦК сверхрешетки

$$J_i \approx -g_r^2 n \mu^0 \left(1,4133... - \frac{1}{r_0 k_F} \operatorname{arctg} 2r_0 k_F \right). \quad (282)$$

Используя (272, 274, 281, 282), найдем средние значения плотности энергии $\langle \hat{H} \rangle$ и термодинамического потенциала $\Omega = \langle \hat{H}' \rangle$ в основном состоянии. Для плоской кубической и ОЦК сверхрешеток

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle}{V} \approx \frac{3}{5} n \mu^0 - g_r^2 n \mu^0 \left[1,4166... - \frac{2}{r_0 k_F} \arctg(2r_0 k_F) \right], \quad (283)$$

$$\frac{\Omega}{V} \approx -\frac{2}{5} n \mu^0 - g_r^2 n \mu^0 \left[0,4166... - \frac{1}{r_0 k_F} \arctg(2r_0 k_F) \right]. \quad (284)$$

Для ГЦК сверхрешетки

$$\frac{\langle \hat{H} \rangle}{V} \approx \frac{3}{5} n \mu^0 - g_r^2 n \mu^0 \left[2,1633... - \frac{2}{r_0 k_F} \arctg(2r_0 k_F) \right], \quad (285)$$

$$\frac{\Omega}{V} \approx -\frac{2}{5} n \mu^0 - g_r^2 n \mu^0 \left[1,1633... - \frac{1}{r_0 k_F} \arctg(2r_0 k_F) \right]. \quad (286)$$

Слагаемые, пропорциональные g_r^2 , в выражениях (283, 285) имеют смысл плотности энергии взаимодействия. Обозначим энергию взаимодействия на один атом U_{int} ,

$$U_{\text{int}} = g_r^2 \mu^0 \left[\frac{2}{r_0 k_F} \arctg 2r_0 k_F - C_i \right], \quad (287)$$

где $C_i = 1,4166...$ для простой кубической и ОЦК, $C_i = 2,1633...$ для ГЦК сверхрешеток.

Расчитанные зависимости $U_{\text{int}}(n)$ приведены на рис. 8, 9. При достаточно больших значениях концентрации электронов выполняется условие $r_0 > n^{-1/3}$, т.е. дебаевский радиус экранирования больше среднего расстояния между донорами. В этих условиях можно говорить о взаимодействии между донорами, приводящем к их коррелированному расположению и пространственному упорядочению. Образование сверхрешетки энергетически выгодно при $U_{\text{int}} < 0$, это условие выполняется при $n > n_c$. В табл. 1 приведены значения n_c для рассматриваемых типов сверхрешеток в различных материалах.

Из зависимостей, приведенных на рис. 8, 9 следует, что для ГЦК сверхрешетки $|U_{\text{int}}|$ больше, чем для простой кубической и ОЦК, т.е. образование сверхрешетки типа ГЦК энергетически выгоднее. Однако значения $|U_{\text{int}}|$ малы по сравнению с энергией валентного взаимодействия, поэтому электростатическое взаимодействие не будет определяющим при формировании структуры сверхрешетки.

Таблица 1

Значение критической концентрации электронов n_c (см^{-3})

Материал	Кубическая, ОЦК	ГЦК
GaAs	$5 \cdot 10^{18}$	$2 \cdot 10^{17}$
GaSb	$7 \cdot 10^{17}$	$2 \cdot 10^{16}$
InAs	$2 \cdot 10^{17}$	$5 \cdot 10^{15}$
InSb	$2 \cdot 10^{16}$	10^{15}

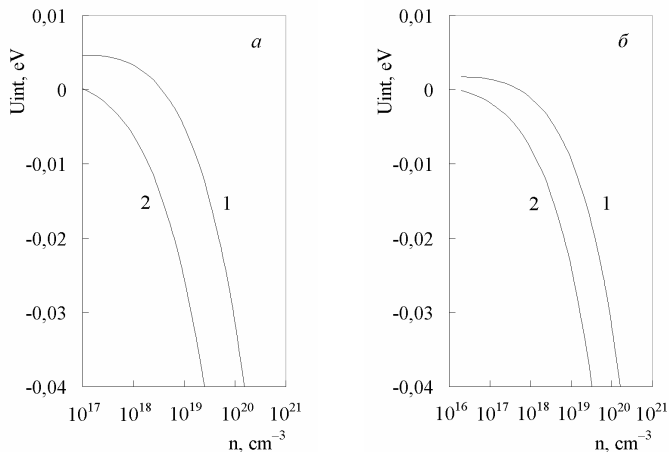


Рис. 8. Энергия взаимодействия на один атом донорной примеси:

a – в кристалле GaAs; b – в кристалле GaSb;
1 – ОЦК сверхрешетка; 2 – ГЦК сверхрешетка

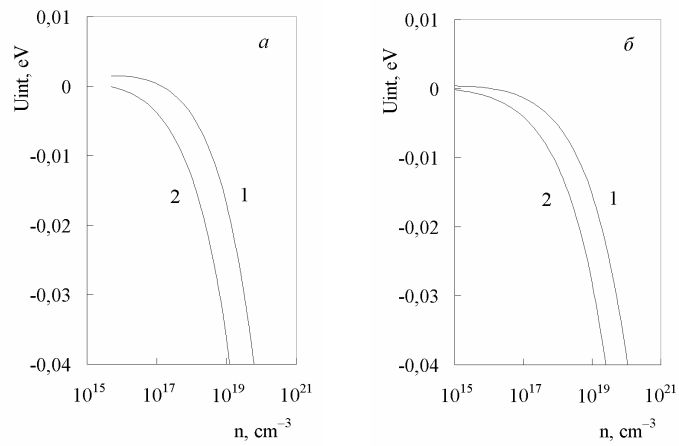


Рис. 9. Энергия взаимодействия на один атом донорной примеси:
a – в кристалле InAs; *б* – в кристалле InSb;
 1 – ОЦК сверхрешетка; 2 – ГЦК сверхрешетка

2.8. ЗОНА ЗАПРЕЩЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИИ, ОБУСЛОВЛЕННАЯ ПРИМЕСНОЙ СВЕРХРЕШЕТКОЙ

Рассмотрим спектр электронов в заполненной зоне проводимости при наличии сверхрешетки из доноров, создающих мелкие уровни в запрещенной зоне полупроводника. Доноры образуют периодическую структуру, поэтому размытия примесной зоны не происходит. Влияние концентрации примесей на положение уровня не учитывается, так как уровень остается мелким. Спектр одночастичных электронных состояний найдем, приравняв к нулю определитель системы уравнений (210, 211). Рассмотрим симметричные точки первой зоны Бриллюэна сверхрешетки. Обозначим $U(\vec{k}; \vec{K}_v)$ множество векторов \vec{K}_μ , удовлетворяющих условию

$$W_r(\vec{k} + \vec{K}_\mu) = W_r(\vec{k} + \vec{K}_v) = W_r^k \quad (288)$$

для данного \vec{k} . Систему уравнений (210, 211) запишем в виде

$$\begin{aligned} & (E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\kappa)) G^r(\vec{K}_\kappa, \vec{K}_\kappa) + e \sum_{\vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa, \vec{K}_\mu \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\mu - \vec{K}_\kappa) G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) + \\ & + e \sum_{\vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa, \vec{K}_\mu \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\mu - \vec{K}_\kappa) G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) = -\frac{1}{(2\pi)^4} \quad (289) \end{aligned}$$

при $\vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)$,

$$\begin{aligned} & (E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\mu)) G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) + e \sum_{\vec{K}_\xi \neq \vec{K}_\mu, \vec{K}_\xi \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi - \vec{K}_\mu) G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\kappa) + \\ & + e \sum_{\vec{K}_\xi \neq \vec{K}_\mu, \vec{K}_\xi \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi - \vec{K}_\mu) G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\kappa) = 0 \quad (290) \end{aligned}$$

при $\vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)$,

$$(E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\mu)) G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) + e \sum_{\vec{K}_\xi \neq \vec{K}_\mu} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi - \vec{K}_\mu) G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\kappa) = 0 \quad (291)$$

при $\vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa, \vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v), \vec{K}_\mu \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)$.

Из (208) следует, что $G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}'_\xi) \sim g_r^2 \ll G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\xi)$. Из (289–291) в первом приближении по g_r^2 получим

$$G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) = \frac{e\tilde{\Phi}(\vec{K}_\mu - \vec{K}_\kappa)}{(2\pi)^4(E - W_r(\vec{k} + \vec{K}_\mu))(E - W_r^k)} \quad (292)$$

$$\begin{cases} \text{при } \vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa, \vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v), \vec{K}_\mu \in U(\vec{k}; \vec{K}_v), \\ (E - W_r^k)G^r(\vec{K}_\kappa, \vec{K}_\kappa) + e \sum_{\vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa, \vec{K}_\mu \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\mu - \vec{K}_\kappa)G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) = \\ = -\frac{1}{(2\pi)^4} \quad \text{при } \vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v), \\ (E - W_r^k)G^r(\vec{K}_\mu, \vec{K}_\kappa) + e \sum_{\vec{K}_\xi \neq \vec{K}_\mu, \vec{K}_\xi \in U(\vec{k}; \vec{K}_v)} \tilde{\Phi}(\vec{K}_\xi - \vec{K}_\mu)G^r(\vec{K}_\xi, \vec{K}_\kappa) = 0 \\ \text{при } \vec{K}_\mu \neq \vec{K}_\kappa \in U(\vec{k}; \vec{K}_v). \end{cases} \quad (293)$$

Пусть примеси образуют простую кубическую сверхрешетку с периодом d . Обратная сверхрешетка является также простой кубической, положение узлов в пространстве обратной сверхрешетки определяется векторами

$$\vec{K}_v = \frac{2\pi}{d}(n_1\vec{i} + n_2\vec{j} + n_3\vec{k}), \quad (294)$$

где (n_1, n_2, n_3) – целые числа; $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ – ортонормированный базис. Первая зона Бриллюэна имеет форму куба с длиной ребра $2\pi/d$ и центром в точке $(0,0,0)$. Для каждого \vec{k} , принадлежащего границе первой зоны Бриллюэна, найдется \vec{K}_μ из первой координатной сферы такой, что $\vec{k} + \vec{K}_\mu$ принадлежит противоположной границе, например:

$$\vec{k} = \frac{\pi}{d}(1,0,0), \quad \vec{K} = \frac{2\pi}{d}(-1,0,0). \quad (295)$$

Запишем систему уравнений (293) для векторов (295), множество $U(\vec{k}; \vec{K})$ содержит векторы \vec{K} и $\vec{0} = (0,0,0)$.

$$\begin{cases} (E - W_r^k)G^r(0,0) + e\tilde{\Phi}(\bar{K})G^r(\bar{K},0) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\ (E - W_r^k)G^r(\bar{K},0) + e\tilde{\Phi}(\bar{K})G^r(0,0) = 0, \end{cases} \quad (296)$$

$$\begin{cases} (E - W_r^k)G^r(\bar{K},\bar{K}) + e\tilde{\Phi}(\bar{K})G^r(0,\bar{K}) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\ (E - W_r^k)G^r(0,\bar{K}) + e\tilde{\Phi}(\bar{K})G^r(\bar{K},\bar{K}) = 0, \end{cases} \quad (297)$$

Из (296, 297) следует, что $G^r(0,0) = G^r(\bar{K},\bar{K})$. Приравнявая к нулю определитель системы уравнений (296) или (297), найдем

$$E_1 = W_r^k - |e\tilde{\Phi}(\bar{K})|, \quad E_2 = W_r^k + |e\tilde{\Phi}(\bar{K})|. \quad (298)$$

Следовательно, возникла зона запрещенных энергий шириной

$$\Delta E(\bar{K}) = 2|e\tilde{\Phi}(\bar{K})| \approx \frac{2}{3}\mu^0 g_r^2, \quad (299)$$

где использовано (208).

Пусть \bar{k} принадлежит ребру, но не вершине первой зоны Бриллюэна сверхрешетки:

$$\bar{k} = \frac{\pi}{d}(x,1,1), \quad -1 < x < 1. \quad (300)$$

Тогда множество $U(\bar{k}; \bar{K}_\mu)$ содержит векторы

$$\bar{K}_1 = \frac{2\pi}{d}(0,-1,0), \quad \bar{K}_2 = \frac{2\pi}{d}(0,0,-1), \quad \bar{K}_3 = \frac{2\pi}{d}(0,-1,-1), \quad \bar{0}. \quad (301)$$

Запишем систему уравнений (293) для векторов (300, 301). Полученные уравнения для $G(\bar{K}_\mu, \bar{K}_\nu)$ отражают симметрию обратной сверхрешетки. Из этих уравнений следует:

$$\begin{aligned} G^r(\bar{0},\bar{0}) &= G^r(\bar{K}_1,\bar{K}_1) = G^r(\bar{K}_2,\bar{K}_2) = G^r(\bar{K}_3,\bar{K}_3), \\ G^r(\bar{0},\bar{K}_1) &= G^r(\bar{0},\bar{K}_2) = G^r(\bar{K}_1,\bar{K}_3), G^r(0,\bar{K}_3) = G^r(\bar{K}_1,\bar{K}_2). \end{aligned}$$

Система линейно-независимых уравнений в рассматриваемой точке зоны Бриллюэна имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} (E - W_r^k)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + (E - W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3))G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = 0, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + (E - W_r^k)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = 0. \end{array} \right. \quad (302)$$

Приравнявая к нулю определитель системы уравнений (302), получим три подзоны:

$$E_{1e} = W_r^k - e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3) - 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1), \quad (303)$$

$$E_{2e} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3), \quad (304)$$

$$E_{3e} = W_r^k - e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1). \quad (305)$$

Пусть \vec{k} принадлежит вершине первой зоны Бриллюэна сверхрешетки:

$$\vec{k} = \frac{\pi}{d}(1,1,1), \quad (306)$$

тогда множество $U(\vec{k}; \vec{K}_v)$ содержит векторы

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{K}_1 = \left[\frac{2\pi}{d}(-1,0,0), \frac{2\pi}{d}(0,-1,0), \frac{2\pi}{d}(0,0,-1) \right], \\ \vec{K}_2 = \left[\frac{2\pi}{d}(-1,-1,0), \frac{2\pi}{d}(-1,0,-1), \frac{2\pi}{d}(0,-1,-1) \right], \\ \vec{K}_3 = \frac{2\pi}{d}(-1,-1,-1), \vec{0}. \end{array} \right\} \quad (307)$$

С учетом симметрии задачи совокупность однотипных векторов \vec{K}_ε в (307) обозначена одним символом. Получим систему линейно-независимых уравнений для векторов (306, 307) из системы уравнений (293):

$$\begin{cases}
(E - W_r^k)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + 3e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + \\
+ 3e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2)G^r(\vec{K}_2, \vec{0}) + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\
e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + (E - W_r^k + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2))G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + \\
+ e(2\tilde{\Phi}(\vec{K}_1) + \tilde{\Phi}(\vec{K}_3))G^r(\vec{K}_2, \vec{0}) + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = 0, \quad (308) \\
e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + e(2\tilde{\Phi}(\vec{K}_1) + \tilde{\Phi}(\vec{K}_3))G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + \\
+ (E - W_r^k + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2))G^r(\vec{K}_2, \vec{0}) + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = 0, \\
e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + 3e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2)G^r(\vec{K}_1, \vec{0}) + 3e\tilde{\Phi}(\vec{K}_1)G^r(\vec{K}_2, \vec{0}) + \\
+ (E - W_r^k)G^r(\vec{K}_3, \vec{0}) = 0.
\end{cases}$$

Приравнявая к нулю определитель системы уравнений (308), получим 4 подзоны:

$$E_{1t} = W_r^k - e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3) - 3e(\tilde{\Phi}(\vec{K}_2) + \tilde{\Phi}(\vec{K}_1)), \quad (309)$$

$$E_{2t} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2) - e(\tilde{\Phi}(\vec{K}_1) - \tilde{\Phi}(\vec{K}_3)), \quad (310)$$

$$E_{3t} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_2) + e(\tilde{\Phi}(\vec{K}_1) - \tilde{\Phi}(\vec{K}_3)), \quad (311)$$

$$E_{4t} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_3) + 3e(\tilde{\Phi}(\vec{K}_1) - \tilde{\Phi}(\vec{K}_2)). \quad (312)$$

Значения энергии взаимодействия для сверхрешеток типа ОЦК и простой кубической имеют близкие значения, поэтому сверхрешетка типа ОЦК далее не рассматривается.

Пусть примеси образуют сверхрешетку типа ГЦК с периодом d . Обратная сверхрешетка имеет элементарную ячейку типа объемноцентрированного куба, положение узлов в пространстве обратной сверхрешетки определяется векторами

$$\vec{K}_v = \frac{2\pi}{d}((n_1 + n_2 - n_3)\vec{i} + (-n_1 + n_2 + n_3)\vec{j} + (n_1 - n_2 + n_3)\vec{k}), \quad (313)$$

где (n_1, n_2, n_3) – целые числа. Первая зона Бриллюэна имеет форму октаэдра с отсеченными шестью вершинами (рис. 10). Чтобы не путать симметричные точки зон Бриллюэна основной решетки и сверхрешетки, обозначим точки X через B, L – через A, W – через C .

Рассмотрим грани первой зоны Бриллюэна, исключая ребра. Грань А имеет нормаль, коллинеарную вектору

$$\vec{K}_A = \frac{2\pi}{d}(\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}), \quad (314)$$

уравнение поверхности

$$2(\vec{k} \cdot \vec{K}_A) - \vec{K}_A^2 = 0. \quad (315)$$

Множество векторов $U(\vec{k}, \vec{K}_A)$ при условии

$$|\vec{k} - \vec{K}_A|^2 = |\vec{k}|^2 \quad (316)$$

состоит из векторов $\vec{0}$ и $-\vec{K}_A$. Для грани В вектор нормали коллинеарен вектору

$$\vec{K}_B = \frac{4\pi}{d}\vec{i}, \quad (317)$$

уравнение поверхности

$$2(\vec{k} \cdot \vec{K}_B) - \vec{K}_B^2 = 0. \quad (318)$$

Множество $U(\vec{k}, \vec{K}_B)$ состоит из векторов $\vec{0}$ и $-\vec{K}_B$. В этом случае решение системы уравнений (293) имеет вид, аналогичный (298), где вместо \vec{K} нужно подставить \vec{K}_A или \vec{K}_B . Ширина зоны запрещенных энергий для граней типа А и В соответственно

$$\Delta E_A = 2|e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)|, \quad \Delta E_B = 2|e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B)|. \quad (319)$$

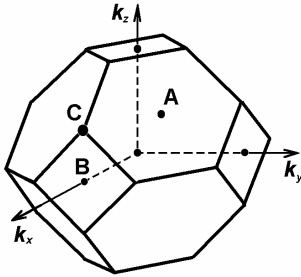


Рис. 10. Первая зона Бриллюэна ГЦК сверхрешетки

Рассмотрим ребра первой зоны Бриллюэна, исключая вершину. Ребра являются пересечением граней типа А, В или А, А', в обоих случаях системы линейно-независимых уравнений аналогичны. Множество $U(\vec{k}, \vec{K}_v)$ состоит из трех векторов:

$\vec{0}, -\vec{K}_A, -\vec{K}_B$. В отличие от простой кубической решетки

$(\vec{K}_A, \vec{K}_B) \neq 0$, поэтому вектор $-\vec{K}_A - \vec{K}_B$ не входит в $U(\vec{k}, \vec{K}_v)$.

Действительно, используя (315, 318), получим

$$|\vec{k} - \vec{K}_A - \vec{K}_B|^2 = \vec{k}^2 + 2\vec{K}_A \cdot \vec{K}_B \neq \vec{k}^2.$$

В рассматриваемом случае из системы уравнений (293) получим следующую систему линейно-независимых уравнений:

$$\begin{cases} (E - W_r^k)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + (E - W_r^k)G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(-\vec{K}_B + \vec{K}_A)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = 0, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + e\tilde{\Phi}(-\vec{K}_A + \vec{K}_B)G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + (E - W_r^k)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = 0. \end{cases} \quad (320)$$

Из (314, 317) следует, что $|\vec{K}_A - \vec{K}_B| = |\vec{K}_A|$. Приравнявая к нулю определитель системы уравнений (320), получим 3 подзоны:

$$E_{1e} = W_r^k - \frac{1}{2}e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B) - \left(\frac{1}{4}e^2\tilde{\Phi}^2(\vec{K}_B) + 2e^2\tilde{\Phi}^2(\vec{K}_A) \right)^{1/2}, \quad (321)$$

$$E_{2e} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B), \quad (322)$$

$$E_{3e} = W_r^k - \frac{1}{2}e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B) + \left(\frac{1}{4}e^2\tilde{\Phi}^2(\vec{K}_B) + 2e^2\tilde{\Phi}^2(\vec{K}_A) \right)^{1/2}. \quad (323)$$

Рассмотрим вершины зоны Бриллюэна, например точку C. Множество $U(\vec{k}, \vec{K}_v)$ состоит из 4 векторов: $\vec{0}$, \vec{K}_A , $\vec{K}_{A'}$, \vec{K}_B , где

$$\vec{K}_{A'} = \frac{2\pi}{d}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}), \quad (324)$$

Система уравнений (293) сводится к следующей системе линейно-независимых уравнений:

$$\begin{cases} (E - W_r^k)G(\vec{0}, \vec{0}) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = -\frac{1}{(2\pi)^4}, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + (E - W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B))G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = 0, \\ e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B)G^r(\vec{0}, \vec{0}) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A)G^r(-\vec{K}_A, \vec{0}) + \\ + (E - W_r^k)G^r(-\vec{K}_B, \vec{0}) = 0, \end{cases} \quad (325)$$

где учтено, что $|\vec{K}_{A'} - \vec{K}_A| = |\vec{K}_B|$, $|\vec{K}_{A'} - \vec{K}_B| = |\vec{K}_A|$, $|\vec{K}_{A'}| = |\vec{K}_A|$.

Приравнявая к нулю определитель системы уравнений (325), получим 3 подзоны:

$$E_{1t} = W_r^k - e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B) - 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A), \quad (326)$$

$$E_{2t} = W_r^k + e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B), \quad (327)$$

$$E_{3t} = W_r^k - e\tilde{\Phi}(\vec{K}_B) + 2e\tilde{\Phi}(\vec{K}_A). \quad (328)$$

Вычислим ширину зоны запрещенных энергий в рассмотренных симметричных точках зоны Бриллюэна сверхрешетки. Подставим компоненты Фурье электрического потенциала (208) в полученные выражения для энергетического спектра и ограничимся слагаемыми порядка g_r^2 . Ширина запрещенной зоны для граней (319) (шестиугольники А, квадраты В):

$$\Delta E_A = 0,543\mu^0 g_r^2, \quad \Delta E_B = 0,407\mu^0 g_r^2. \quad (329)$$

Ширина запрещенной зоны для ребер (321–323):

$$\Delta E_{1e} = E_2 - E_1 = 0,785\mu^0 g_r^2, \quad \Delta E_{2e} = E_3 - E_2 = 9,18 \cdot 10^{-2} \mu^0 g_r^2. \quad (330)$$

Ширина запрещенной зоны для вершин (326–328):

$$\Delta E_{1t} = E_2 - E_1 = 0,95\mu^0 g_r^2, \quad \Delta E_{2t} = E_3 - E_2 = 0,136\mu^0 g_r^2. \quad (331)$$

Из полученных результатов следует, что в полупроводниковом кристалле, содержащем сверхрешетку из “мелких” доноров, зона проводимости вследствие брэгговского отражения от атомных плоскостей сверхрешетки расщепляется на подзоны, разделенные зонами запрещенных энергий. Этот эффект проиллюстрирован на рис. 11. Рассчитанные значения ширины зоны

запрещенных энергий для InAs при концентрации электронов n , близкой к критической, приведены в табл. 2.

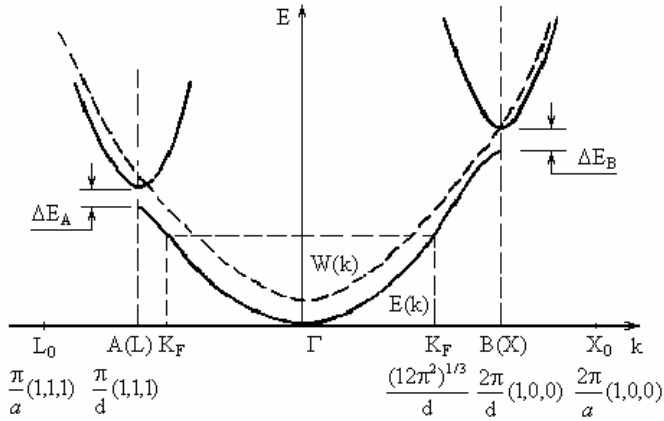


Рис. 11. Расщепление зоны проводимости в вырожденном полупроводнике, содержащем сверхрешетку из “мелких” доноров

Таблица 2

Значение ширины зоны запрещенных энергий

$n, \text{ c м}^{-3}$	$\Delta E_A, \text{ эВ}$	$\Delta E_B, \text{ эВ}$
$3,16 \cdot 10^{18}$	$9,66 \cdot 10^{-3}$	$7,25 \cdot 10^{-3}$
$6,31 \cdot 10^{18}$	$1,22 \cdot 10^{-2}$	$9,12 \cdot 10^{-3}$
10^{19}	$1,42 \cdot 10^{-2}$	$1,06 \cdot 10^{-2}$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена феноменологическая модель образования примесных и собственных комплексов в полупроводниковых твердых растворах на примере системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$. Рассматриваемые комплексы участвуют во взаимодействии как дополнительные структурные компоненты системы. Взаимодействие примесных комплексов обуславливает существование фазы их упорядочения при концентрации $x_1 = 0,1$ ат. % Si, а взаимодействие собственных комплексов реализуется в виде фазы упорядочения со структурой элементарной ячейки 3GeGe1GeSi при концентрации $x_2 = 12,5$ ат. % Si.

Примесный комплекс образуется атомом замещения в окружении только атомов исходного кристалла. При этом если энергия и радиус локализации валентных электронов замещающего атома меньше энергии и радиуса локализации валентных электронов собственных атомов, возмущение валентных связей выходит за пределы координационной сферы примесного атома, вследствие чего образуется поляризованная сфера деформации радиусом r_0 , охватывающая несколько ближайших соседей.

Предложена формула для оценки радиуса сферы деформации. Рассчитанное значение r_0 приближенно равно половине периода упорядочения атомов Si при концентрации x_1 .

Собственные комплексы, образующие кластеры, в твердом растворе $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ представляют выделение новой фазы, т.е. система оказывается гетерогенной. Рассчитано изменение термодинамического потенциала при образовании кластера из N собственных комплексов. Найденное число атомов Si в кластере $39 \leq N \leq 132$.

Рассчитано изменение энергетической структуры сильно легированных полупроводников со сверхрешеткой из “мелких” доноров вследствие взаимодействия электронов и остовов примесных атомов. Получены зависимости энергии взаимодействия на один атом донорной примеси U_{int} в кристаллах GaAs, GaSb, InAs, InSb для простой кубической, ОЦК и ГЦК сверхрешеток от концентрации электронов. Значения $|U_{\text{int}}|$ малы по сравне-

нию с энергией валентного взаимодействия, поэтому электростатическое взаимодействие не является определяющим при формировании структуры сверхрешетки в твердых растворах полупроводников типа $A^3B^5_{(1-x)}B^6_x$.

Показано расщепление зоны проводимости на подзоны, разделенные зонами запрещенных энергий, в вырожденном полупроводнике, содержащем сверхрешетку из “мелких” доноров. Значение ширины зоны запрещенных энергий, образовавшейся в зоне проводимости, для сильно легированных кристаллов InAs n-типа – порядка 10^{-2} эВ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горюнова Н.А. Химия алмазоподобных полупроводников. Л.:ЛГУ, 1963. 221 с.
2. Горюнова Н.А. Сложные алмазоподобные полупроводники. М.: Советское радио, 1968. 264 с.
3. Stohr H., Klemm W. Analysis of composition of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ // *Zeitschrift für anorganische und allgemeine chemie*. 1939. V. 241. № 4. P. 305–424.
4. Шигаева С.М., Белашов Ю.Г. К вопросу о получении гомогенных легированных твердых растворов системы германий-кремний // Рост и легирование полупроводниковых кристаллов и пленок: Сб. ст. Ч. 1. Новосибирск: Наука, 1977. С. 156–158.
5. Тагиров В.И. Полупроводниковые твердые растворы. Германий-кремний. Баку: Элм. 1983. 208 с.
6. Кекуа М.Г., Хуцишвили Э.В. Твердые растворы полупроводниковой системы германий-кремний. Тбилиси: Мецниереба, 1985. 175 с.
7. Богатов Н.М., Хабаров Э.Н. Образование структурных компонентов и их упорядочение в твердых растворах Ge-Si // Высокочистые вещества. 1989. № 2. С. 15–32.
8. Смирнов Ю.М., Литвинова Т.Ю. Влияние условий выращивания на структуру и распределение примесей в монокристаллах сплава германия с кремнием // Кремний-германий: Сб. ст. М.: Металлургия, 1969. С. 97–101.
9. Романенко В.Н. Управление составом полупроводниковых кристаллов. М.: Металлургия, 1976. 368 с.
10. Чики З.И., Шульпина И.Л., Белокурова И.Н. Структурное совершенство кристаллов системы Ge-Si // Легированные полупроводники. М.: Наука, 1975. С. 127–130.
11. Санидзе В.В., Георгадзе Г.С., Микадзе З.К. Исследование структурных совершенств кристаллов германий-кремний при увеличении содержания кремния от 0,5 до 2,5 ат. % // Тр. груз. политехн. ин-та. 1978. № 7. С. 42–44.

12. Доливо-Добровольская Г.И., Смирнов Ю.М. Морфологические особенности кристаллов системы Ge-Si // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1975. Т. 2. № 7. С. 1174–1177.
13. Земсков В.С., Белая А.Д., Коровин Н.С. Распределение компонентов в кристаллах твердых растворов, выращенных по методу Чохральского без вращения затравки и тигля // Легирование полупроводников. М.: Наука, 1982. С. 131–134.
14. Белокурова И.Н., Вахрушев С.Б., Земсков В.С., Кожух М.Л. и др. Формирование заданной структурной микронеоднородности в кристаллах твердых растворов германий-кремний // IV Всесоюз. конф. по физико-химическим основам легирования полупроводниковых материалов. Тез. докл. Москва, 1979. С. 129.
15. Чики З.И., Шульпина И.Л., Белокурова И.Н. Дефекты роста в кристаллах сплавов GeSi // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1973. Т. 37. № 1. С. 2345–2348.
16. Чики З.И., Шульпина И. Л., Белокурова И.Н. Концентрационная неоднородность монокристаллических сплавов GeSi // ФТТ. 1974. Т. 16. В. 12. С. 3700–3703.
17. Земсков В.С., Шульпина И.Л., Белокурова И.Н., Титков А.Н. и др. Структурные особенности и механические свойства кристаллов твердых растворов германий-кремний-сурьма, полученных в эксперименте “универсальная печь” по программе “Союз-Аполлон” // Физика и химия обработки материалов. 1977. № 5. С. 140–144.
18. Земсков В.С., Белокурова И.Н., Шульпина И.Л., Сорокин Л.М. и др. Кристаллизация твердых растворов Ge-Si-St в различных условиях // Легирование полупроводников. М.: Наука, 1982. С. 163–169.
19. Саидов М.С. О распределении компонентов при получении монокристаллов твердых растворов кремния с германием зонной кристаллизацией // Изв. АН УзССР. Сер. Физ.-мат. науки. 1981. № 4. С. 62–65.
20. Саидов М.С., Юсупов А., Атабаев И.Г. О получении одно-родных монокристаллов полупроводниковых твердых рас-

- творов // Изв. АН УзССР. Сер. Физ.-мат. науки. 1985. № 6. С. 34–37.
21. Мишерин В.Н., Трошин Н.Е., Цомае К.П., Власенко В.А. и др. Исследование возможности получения гомогенных сплавов с помощью зонной плавки // Вопросы металлургии и физики полупроводников. М. 1959. С. 59–69.
 22. Саидов М.С., Высаева В.А., Умеров Р.С. Исследование распределения в монокристаллах $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$, выращенных методом бестигельной плавки // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1977. Т. 13. № 3. С. 518–519.
 23. Саидов М.С., Умеров Р.С. Выращивание монокристаллов твердых растворов германий-кремний методом электронно-лучевой бестигельной зонной плавки // Кристаллография. 1978. Т. 23. № 1. С. 237–240.
 24. Dismakes J.P., Ekstrom L., Paff R.J. Lattice parametr and density on germanium-silicon alloys // J. Phys. Chem. 1964. V. 68. № 10. P. 3021-3027.
 25. Левитас А. Электрические свойства германиево-кремниевых сплавов // Кремний. М.: И. Л. 1960. С. 417–426.
 26. Сергеев Г.А., Мирошниченко И.С. Измерения коэффициента распределения при неравновесной кристаллизации сплавов // Структура жидкости и фазовые переходы. Вып. 3. Днепропетровск. 1975. С. 60–62.
 27. Сандулова А.В., Богоявленский П.С., Дронюк М.И. Получение твердых расплавов Ge-Si из газовой фазы // ДАН СССР. 1962. Т. 143 № 3. С. 610–612.
 28. Сандулова А.В. Получение и оценка некоторых свойств нитевидных и игольчатых монокристаллов твердых растворов системы Ge-Si // ДАН СССР. 1963. Т. 153 № 2. С. 330–332.
 29. Сандулова А.В., Васильева Б.С., Ахроменко Ю.Г. Исследования массопереноса в закрытой системе кремний-германий-бром. // Нитевидные кристаллы и тонкие пленки. Ч.1. Воронеж. 1975. С. 115–120.

30. Земсков В.С., Белокурова И.М., Василина Б.С., Маврин О.И. и др. Исследование распределения добавок кремния в кристаллах германия, полученных из газовой фазы в условиях невесомости // Легированные полупроводниковые материалы. М.: Наука, 1985. С. 145–149.
31. Лютович К.Л., Куропаткин В.Л., Саидов С.М. Выращивание эпитаксиальных твердых растворов методом молекулярно-лучевой эпитаксии // Изв. АН УзССР Сер. Физ.-мат. науки. 1986. № 2. С. 88–89.
32. Богатов Н.М., Петров А.Л., Хабаров Э.Н. Компонентный состав и свойства твердых растворов кремния в германии // IV школа по физико-химическим основам методов получения и исследования материалов электронной техники. Тез. докл. Новосибирск. 1984. С. 127–128.
33. Балагурова Е.А., Хабаров Э.Н. Упорядочение твердых растворов в системах Ge-Si, InAs-CdTe, HgTe-CdTe // Свойства полупроводниковых твердых растворов, обусловленные структурными компонентами. Томск. ТГУ, 1978. С. 3–21.
34. Хабаров Э.Н. Области примесных твердых растворов на основе матрицы собственного полупроводника // Свойства полупроводниковых твердых растворов, обусловленные структурными компонентами. Томск: ТГУ, 1978. С. 22–34.
35. Алесковский В.Б. К вопросу о структурных единицах твердого вещества // Докл. АН СССР. 1990. Т. 311. №. 5. С. 1140–1142.
36. Глазов В.М., Павлова Л.М. Химическая термодинамика и фазовые равновесия. М.: Metallurgia, 1981. –336 с.
37. Хабаров Э.Н., Рязанцев А.А. Взаимодействие компонентов в полупроводниковых твердых растворах с гетеровалентным замещением // Изв. СО АН СССР. Сер. Хим. 1975. Т. 2. № 1. С. 126–136.
38. Кекуа М.Г. Диаграммы состояния Ge-Si // Тр. института металлургии. АН ГрузССР. 1962. Т. 8. С. 257–258.
39. Thurand C.D. The theoretical diagram of sistem Ge-Si // J. Electrochem. Soc. 1953. V. 57. № 4. P. 827–831.

40. Свелин Р.А. Термодинамика твердого состояния. М.: Металлургия, 1968. 232 с.
41. Bublik V.T., Leikin V.N. Calculation of the pseudobinary alloy semiconductor phase diagrams // Phys. Stat. Sol. (a). 1978. V. 46. № 1. P. 365–372.
42. Литвак А.М., Чарыков Н.А. Новый термодинамический метод расчета фазовых диаграмм двойных и тройных систем, содержащих In, Ga, As, Sb // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1991. Т. 27. № 2. С. 225–230.
43. Гусев А.И., Ремпель А.А. Термодинамическая модель атомного упорядочения. Фазовые диаграммы упорядоченных систем // Журн. физ. химии. 1991. Т. 65. № 3. С. 635–633.
44. Эллиот Р.П. Структуры двойных сплавов. М.: Металлургия, 1979. 472 с.
45. Губенко А.Я. Особые точки на линиях ликвидуса и солидуса простых диаграмм состояния и их связь со структурным состоянием расплава // Легированные полупроводниковые материалы. М.: Наука, 1985. С. 39–45.
46. Губенко А.Я., Аникин Ю.А., Замяткин В.В. Немонотонные изменения свойств расплавов и кристаллов в системе германий-кремний // Материалы электронной техники. М.: Моск. институт электронного машиностроения. 1990. С. 124–132.
47. Губенко А.Я. Взаимосвязь между температурой, давлением и составом сосуществующих фаз // Металлы. 1992. № 1. С. 7–9.
48. Богатов Н.М., Лелюх Е.В., Матвеекин М.П., Хабаров Э.Н. Влияние взаимодействия собственных комплексов на формирование реальной структуры кристаллов // VII конф. по процессам роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок. Семинар по использованию элементоорганических соединений в синтезе кристаллов и пленок, по молекулярно-лучевой эпитаксии. Новосибирск, 9–13 июня 1986 г. Тез. докл. Т. 2. Новосибирск, 1986. С. 228–229.

49. Хабаров Э.Н., Лиопо В.А. Твердые растворы алмазоподобных полупроводниковых соединений при “гетеровалентном” замещении // ФТП. 1972. Т. 6. В. 10. С. 2082–2083.
50. Владимиров Н.В., Кузьмина Г.А., Лиопо В.А., Михаленко А.А. и др. Рентгенографическое излучение дефектов структуры в кристаллах твердых растворов $Cd_xHg_{1-x}Te$ // Полуметаллы и полупроводники с узкими запрещенными зонами: Материалы III Всесоюз. симпозиума. Львов, 1973. С. 64–68.
51. Лиопо В.А., Хабаров Э.Н. Изучение особенностей межатомного взаимодействия в полупроводниках типа $A^3B^5-A^2B^6$ рентгеновским методом // Химическая связь в кристаллах и их физические свойства. Т. 2. Минск: Наука и техника, 1976. С. 86–91.
52. Хабаров Э.Н. Двухчастичная модель примесей и их взаимодействие в атомарных полупроводниках и полупроводниковых соединениях // Рост и легирование полупроводниковых кристаллов и пленок. Ч. 1. Новосибирск: Наука, 1977. С. 243–252.
53. Полтавцев Ю.Г. Структура полупроводниковых расплавов. М.: Металлургия, 1984. 176 с.
54. Регель А.Р., Глазов В.М. Структурные дефекты в расплавах полупроводников // ФТП. 1983. Т. 17. В. 10. С. 1729–1747.
55. Мильвидсий М.Г., Рыгова Н.С., Соловьева Е.М. Изовалентные примеси в полупроводниках // Цветные металлы. 1991. № 8. С. 23–26.
56. Юнусов М.С., Пулатова Д.С., Махмудов А. Ш., Мирзаев А. Электронная структура изоэлектронных примесей замещения и их комплексов в Si и Ge // XII совещание по теории полупроводников. Ташкент, 30 сентября–3 октября 1985. Тез. докл. Ч. 2. Киев, 1985. С. 311–312.
57. Грехов А.М., Гунько В.М., Шаховцов В.И. Расчет уровней изовалентных примесей в кремнии // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1988. Т. 24. № 2. С. 319–320.

58. Грехов А.М., Шаховцов В.И. Исследование электронно-колебательной структуры изоэлектронных примесей в кремнии. Изменение электронных свойств при зарождении фазы Ge d Si // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 285–288.
59. Баженов В.К., Фистуль В.И. Изоэлектронные примеси в полупроводниках. Состояние проблемы // ФТП. 1984. Т. 18. В. 8. С. 1345–1362.
60. Johnson E.R., Christian S.M. Some properties of germanium-silicon alloys // Phys. Rev. 1954. V. 95. № 2. P. 560–561.
61. Busch G., Vogt O. Elektrische leit fahigkeit und Holleffect von Ge-Si-legierungen // Helv. Phys. Acta. 1960. V. 33. № 5. P. 437–458.
62. Wang C.C., Alexander B.H. Final technical report on investigation of germanium-silicon alloys // Burean of Ships Contract No. Nobss. 1955. Feb. 17. B. 63180.
63. Bublik V.T., Gorelik S.S., Zaitsev A.A., Polykov A.Y. Diffuse X-ray determination of the energy of mixing and elastic constant of Ge-Si solid solutions // Phys. Stat. Sol. (b). 1974. V. 66. № 2. P. 427–432.
64. Soma T. Vollume effect on the bulk modulus of Si-Ge solid solutions // Phys. Stat. Sol. (b). 1979. V. 95. № 2. P. K117–K119.
65. Кекуа М.Г., Хуцишвили Э.В. Исследование микротвердости сплавов системы германий-кремний // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1967. Т. 3. № 7. С. 1166–1169.
66. Ванг К.К., Александр Б.Х. Твердость германиево-кремниевых сплавов при комнатной температуре // Кремний. М.: ИЛ, 1960. С. 427–430.
67. Глазов В.М., Вигдорович В.Н. Микротвердость металлов и полупроводников. М.: Металлургия, 1989. 248 с.
68. Жданова В.В., Кекуа М.Г., Самандашвили Т.В. Тепловое расширение сплавов системы Si-Ge // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1967. Т. 3. № 7. С. 1263–1264.
69. Прилепский В.И., Уманский Я.С. Искажения решеток германия, кремния и их твердых растворов в интервале от 88

- до 500 К // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1965. Т. 1. № 8. С. 1272–1276.
70. Braunstein R., Moorc A.R., Herman F. Intrinsic optical absorption Ge-Si alloys // Phys. Rev. 1958. V. 109. № 3. P. 695–710.
 71. Ингизян П.Н., Лалыкин С.П., Смирнов И.А., Тихонов В.В., и др. Определение ширины запрещенной зоны твердых растворов Ge-Si при высоких температурах // ФТП. 1971. Т. 5. В. 12. С. 2381–2382.
 72. Лупал М.В., Лютович К.Л., Панов М.Ф., Пихтин А.Н. и др. Параметры зонной структуры твердых растворов $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ // ФТП. 1990. Т. 24. В. 9. С. 1604–1607.
 73. Сафаров В.И., Титков А.Н. Непрямые бесфононные оптические переходы в смешанных кристаллах германий-кремний // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 2. С. 458–462.
 74. Гросс Е.Ф., Титков А.Н. Бесфононная излучательная аннигиляция не прямых электронов в кристаллах германия с изоэлектронными примесями замещения // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 7. С. 2004–2006.
 75. Бакиров М.Я., Мамедов В.С. Фотопроводимость монокристаллов твердых растворов Ge-Si // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. 1978. Т. 14. № 7. С. 1201–1204.
 76. Покровский Я.Е., Свистунова К.И., Алкеев Н.В. Влияние зонной структуры на механизм рекомбинации конденсированных носителей заряда в Ge, Si и их сплавах // ФТТ. 1972. Т. 14. В. 2. С. 3306–3308.
 77. Kleine J.S., Pollak F.N., Cardone M. Electroreflectance in Ge-Si alloys // Helv. Phys. Acta. 1968. V. 41. № 7. P. 968–977.
 78. Хуцишвили Э.В., Кекуа М.Г. Исследование малых добавок Si на спектр отражения Ge // Вопросы металловедения и коррозии металлов. Тбилиси. 1974. С. 58–62.
 79. Hamlicek J., Lukes F., Schmidt E., Kekoua M.G., Khoutsishvili E. Disorder broadening of optical spectra in Ge-Si alloys // Solid State Commun. 1983. V. 47. № 5. P. 387–389.
 80. Humlicek J., Lukes F., Schmidt E., Kekoua M.G., Khoutsishvili E. Temperature dependence of the optical spectra of Si, Ge, and

- Ge-Si alloys // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1986. V. 33. № 2. P. 1092-1101.
81. People R. Indirect band gap of coherently stained $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ bulk alloys on $\langle 001 \rangle$ silicon substrates // Phys. Rev. B: Condens. Matter. 1985. V. 32. № 2. P. 1405–1408.
 82. Braunstein R. Lattice vibration spectra of germanium-silicon alloys // Phys. Rev. 1963. V. 130. № 3. P. 879–887.
 83. Feldman D.W., Askin M. Raman scattering by local modes in germanium rich silicon-germanium alloys // Phys. Rev. Lett. 1966. V. 17. № 24. P. 1209–1212.
 84. Lannin J.S. Vibrational properties of concentrated Ge-Si alloys // Solid State Commun. 1976. V. 19. № 1. P. 35–38.
 85. Саидов М.С., Атабаев И.Г., Хируненко Л.И., Шаховцов В.И. и др. Фотонные спектры поглощения твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ // Докл. АН УзССР. 1986. № 3. С. 24–26.
 86. Шлимак И.С., Эфрос А.Л., Янчев И.Я. Исследование роли флуктуаций состава в твердых растворах Ge-Si // ФТП. 1977. Т. 11. В. 2. С. 257–261.
 87. Саидов М.С., Юсупов А., Никитин В.В., Абдримов К. и др. Холловская подвижность дырок в монокристаллах твердых растворов $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ // ФТП. 1981. Т. 15. В. 6. С. 1221–1223.
 88. Шаховцов В.И., Шаховцова С.И., Шварц М.М., Шпинар Л.И. и др. Подвижность носителей тока в твердых растворах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ // ФТП. 1989. Т. 23. В. 1. С. 48–51.
 89. Аджаров Г.Х., Агаев Н.А., Кязимзаде Р.А. Подвижность электронов в твердых растворах германий-кремний при рассеянии на фононах и беспорядках сплава // ФТП. 1991. Т. 25. В. 4. С. 760–762.
 90. Ренч Р., Шлимак И.С. Влияние состава на межпримесную излучательную рекомбинацию в сплаве германий-кремний // ФТП. 1978. Т. 12. В. 4. С. 713–717.
 91. Krussman R., Vollmer H., Labusch R. The activation energy of phosphorus donors in silicon-rich silicon-germanium alloys // Phys. Stat. Sol. (b). 1983. V. 118. № 1. P. 275–282.

92. Мизрухин Л.В., Мильвидский М.Г., Хируненко Л.И., Шаховцов В.И., и др. Уширение полос поглощения водородоподобных центров в кремнии с изовалентными примесями // ФТП. 1986. Т. 20. В. 9. С. 1647–1653.
93. Хируненко Л.И., Шаховцов В.И., Шинкаренко В.К. Исследование колебательных спектров поглощения кислорода в твердых растворах Si<Ge> // ФТП. 1986. Т. 20. В. 12. С. 2222–2225.
94. Лопатин А.Б., Покровский Я.Е. Исследование неупорядоченности в сплавах германий-кремний методом спектроскопии связанных экситонов // ФТТ. 1986. Т. 28. В. 8. С. 2373–2378.
95. Горбачева Н.И., Курбаков А.И., Мильвидский М.Г., Рубинова Э.Э. и др. Структурное несовершенство монокристаллического кремния, легированного германием // Кристаллография. 1986. Т. 31. № 5. С. 994–996.
96. Кустов В.Е., Мильвидский М.Г., Семенов Ю.Г., Туровский Б.М. и др. Деформационные заряды изовалентных примесей в кремнии // ФТП. 1986. Т. 20. В. 2. С. 270–274.
97. Soma T. The Electronic theory of Si-Ge solid solutions // Phys. Stat. Sol. (b). 1979. V. 95. № 2. P. 427–431.
98. Matsuo Kagawa H., Kitani Y., Soma T. Linear thermal expansion coefficient of Si_{1-x}Ge_x solid solution // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 132. № 2. P. K87–K90.
99. Erbarut E., Tomak M. A localized orbital description of Ge-Si alloy // Phys. Stat. Sol. (b). 1985. V. 132. № 1. P. 173–177.
100. Martin-Rodero A., Verges J.A., Tejedor C. Shot Range effect in germanium-silicon // Phys. Stat. Sol. (b). 1980. V. 99. № 2. P. 501–505.
101. Кустов Е.Ф., Мельников Е.А., Сутченков А.А., Левадий А.И. и др. Зонная структура твердых растворов германия и кремния // ФТП. 1983. Т. 17. В. 5. С. 769–772.
102. Балагурова Е.А., Петров А.Л., Хабаров Э.Н. Примесные состояния кремния в германии // ФТП. 1981. Т. 15. В. 5. С. 985–987.

103. Петров А.Л. Зависимость энергии спин-орбитального расщепления валентной зоны от состава твердых растворов $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ и $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ // ФТП. 1981. Т. 15. В. 3. С. 595–596.
104. Богатов Н.М., Петров А.Л., Хабаров Э.Н. Изменение спин-орбитального расщепления в сплавах германий-кремний // ФТП. 1982. Т. 16. В. 4. С. 653–655.
105. Богатов Н.М., Хабаров Э.Н. Взаимодействие примесных комплексов в полупроводниках со сфалеритоподобной структурой // Легированные полупроводниковые материалы. М.: Наука, 1985. С. 240–243.
106. Искра В.Д. Случайные поля в сплавах Ge-Si, обусловленные легированием // Изв. вузов. Сер. Физ. 1987. № 2. С. 41–46.
107. Кардона М. Модуляционная спектроскопия. М.: Мир, 1972. 416 с.
108. Qteish A., Resta R. Microscopic atomic structure and stability of Si-Ge solid solutions // Phys. Rev. B: Condens Matter. 1988. V. 37. № 3. P. 1308–1314.
109. Волков Д.А., Фистуль В.И. Метод расчета энергии связи изовалентных и изоэлектронных примесей в тетраэдрических полупроводниках // ФТП. 1993. Т. 27. В. 3. С. 431–437.
110. Ichimura M., Nishino Y., Kajiyama H. Wada T. Calculation of bond lengths in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys based on the valence-force-field model // Jap. J. Appl. Phys. Pt 2. 1990. V. 29. № 5. P. 842–843.
111. Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
112. Желудев И.С. Симметрия и ее приложения. М.: Атомиздат, 1976. 288 с.
113. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ: Справочник / Под ред. А.В. Новоселовой. М.: Наука, 1978. 339 с.

114. Таблицы физических величин: Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. М.: Атомиздат, 1976. 1008 с.
115. Дашевский М.Я., Лымарь С.Г., Докучаева А.А., Итальянцев А.Г. и др. Влияние германия на поведение кислорода в кремнии // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1985. Т. 21. № 11. С. 1827–1830.
116. Дашевский М.Я., Докучаева А.А., Анисимов К.И. Влияние германия на образование термодоноров в кремнии // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1986. Т. 22. № 10. С. 1599–1601.
117. Дашевский М.Я., Докучаева А.А., Корляков Д.Н., Салманов А.Р. и др. Электрофизические параметры кремния, легированного германием, после термической обработки при 720 К // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1988. Т. 24. № 9. С. 1413–1418.
118. Дашевский М.Я., Корляков Д.Н., Кузнецов Е.А. Влияние германия на распад пересыщенного твердого раствора кислорода в монокристаллическом кремнии // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1990. Т. 26. № 6. С. 1135–1138.
119. Дашевский М.Я., Корляков Д.Н. Физические свойства термообработанных монокристаллов Si и Si<Ge> // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1991. Вып. 6(260). С. 45–47.
120. Бугай А.А., Кравцова И.Н., Максименко В.М., Шанина Б.Д. и др. Влияние германия на свойства Si-S1 центра в твердом растворе Si_{1-x}Ge_x // ФТТ. 1987. Т. 29. В. 7. С. 2217–2220.
121. Кустов В.Е., Критская Т.В., Трипаченко Н.А., Шаховцов В.И. Влияние германия на внутренние упругие напряжения в кислородосодержащем кремнии // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 313–315.
122. Критская Т.В., Хируненко Л.И., Яшник В.И. Термическое дефектообразование в кристаллах Si:Ge // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1991. Вып. 6(260). С. 56–58.

123. Бринкевич Д.И., Горбачева Н.И., Петров В.В., Ткачев В.Д. и др. Термодоноры в кремнии, легированном германием // Докл. АН БССР. 1986. Т. 30. № 4. С. 308–310.
124. Бринкевич Д.И., Петров В.В. Поведение кислорода в термообработанном кремнии, легированном германием // Журн. прикл. спектроскопии. 1987. Т. 46. № 2. С. 305–307.
125. Бабицкий Ю.М., Горбачева Н.И., Гринштейн П.М., Ильин М.А. и др. Кинетика генерации низкотемпературных кислородных доноров в кремнии с изовалентными примесями // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 307–312.
126. Туровской Б.М., Горбачева Н.И. Зависимость эффективного коэффициента распределения германия в кремнии от концентрации германия в расплаве // Изв. АН СССР. Сер. Неорганич. материалы. 1990. Т. 26. № 5. С. 904–906.
127. Бринкевич Д.И., Горбачева Н.И., Петров В.В., Просолович В.С. Термическое дефектообразование в кремнии, легированном германием и гадолинием // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1991. Вып. 6(260). С. 58–60.
128. Бринкевич Д.И., Маркевич В.П., Мурин Л.И., Петров В.В. Кинетика образования термодоноров в кристаллах $\text{Si} \langle \text{Ge}, \text{O} \rangle$ // ФТП. 1992. Т. 26. В. 4. С. 682–690.
129. Аскарлов Б., Оксенгендлер Б.Л., Юсупов А., Сохаталиев С.А. Влияние неоднородности состава на атомные перестройки в твердых растворах кремния с германием // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1991. Вып. 7(261). С. 38–39.
130. Дугаев В.К., Петров П.П. О потенциале акцепторной примеси в твердых растворах полупроводников // Украинский физический журнал. 1984. Т. 29. № 3. С. 443–446.
131. Грехов А.М., Шаховцов В.И. Влияние комплексов Ge и C на уровни энергии бора в сплавах Si-Ge, Si-C // Украинский физический журнал. 1988. Т. 33. № 4. С. 602–606.
132. Бугай А.А., Калабукова Е.Н., Максименко В.М., Неймарк Е.И. и др. Спектр ЭПР фосфора в сплавах Si:Ge // ФТТ. 1982. Т. 24. В. 4. С. 1233–1235.

133. Бугай А.А., Максименко В.М., Неймарк Е.И., Шанина Б.Д. и др. Изучение локальных искажений ячеечного потенциала доноров в сплавах $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ методами ЭПР и спин-решеточной релаксации // ФТТ. 1984. Т. 26. В. 11. С. 3338–3346.
134. Неймарк Е.И., Шанина Б.Д. Локальные искажения кристаллического потенциала и примесные состояния в сплаве кремний-германий // ФТП. 1987. Т. 21. В. 4. С. 757–759.
135. Неймаш В.Б., Саган Т.Р., Цмоць В.М., Шаховцов В.И. Магнитное упорядочение кислородосодержащих термодоноров в Si // Украинский физический журнал. 1992. Т. 37. № 3. С. 437–442.
136. Глазов В.М., Кольцов В.Б., Куцова В.З., Регель А.Р. и др. Исследование электрофизических свойств кремния в широком интервале температур // Электронная техника. Сер. 6. Материалы. 1990. Вып. 4(249). С. 53–58.
137. Даниленко В.М. Модели реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1983. 224 с.
138. Bulyarskii S.V., Oleinikov V. P. Thermodynamics of defect interaction in compound semiconductors // Phys. Stat. Sol. (b). 1988. V. 1. № 6. P. 439–447.
139. Брук-Левинсон Э.Т., Чернецов О.Д. Формализм большого канонического ансамбля для описания кристаллов с дефектами // ДАН БССР. 1990. Т. 34. № 5. С. 413–414.
140. Маслюк В.Т., Гоер Д.Б. Равновесные состояния дефектов в полупроводниках при учете эффектов кластеризации // Изв. АН СССР. Сер. Неорганические материалы. 1991. Т. 27. № 4. С. 704–710.
141. Смирнов Б.М. Кластеры с плотной упаковкой // УФН. 1992. Т. 162. № 1. С. 119–138.
142. Смирнов Б.М. Большие кластеры с парным взаимодействием атомов // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30. № 3. С. 513–520.
143. Мильвидский М.Г., Чалдышев В.В. Наноразмерные атомные кластеры в полупроводниках – новый подход к фор-

- мированию свойств материалов. Обзор // ФТП. 1998. Т. 32. В. 5. С. 513–522.
144. Cappelletti P., Cerofolini G.F., Pignatelli G.U. Effective mass considered as a local property // *J. Appl. Phys.* 1983. V. 54. № 2. P. 853–856.
 145. Мильвидский М.Г., Рытова Н.С., Соловьева Е.В. Влияние упругой деформации, создаваемой примесями, на концентрацию и поведение собственных точечных дефектов в полупроводниках // Проблемы кристаллографии: К столетию со дня рождения академика А.В. Шубникова. М.: Наука, 1987. С. 215–232.
 146. Lockwood D.J., Rajan K., Fenton E.W., Baribeau J.M. et al. Ordering in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ crystals // *Solid State Commun.* 1987. V. 61. № 8. P. 465–467.
 147. Bernard J.E., Zunger A. Strain energy and stability of Si-Ge compounds, alloys, and superlattices // *Phys. Rev. B.* 1991. V. 44. № 4. P. 1663–1681.
 148. Мильвидский М.Г., Соловьева Е.В. Особенности дефектообразования в полупроводниках при изовалентном легировании // ФТП. 1983. Т. 17. В. 11. С. 2022–2024.
 149. Семиколенова Н.А. Аномальные изменения свойств монокристаллов арсенида индия, легированного теллуром // Изв. вузов. Сер. Физ. 1984. № 5. С. 51–57.
 150. Бирюлин Ю.Ф., Прудникова И.А., Семиколенова Н.А., Шляхов А.Г. Фотолюминесценция в легированном арсениде галлия при фазовом переходе порядок–беспорядок // Химическая связь, электронная структура и физико-химические свойства полупроводников и полуметаллов: Всесоюз. совещание. Тез. докл. Калинин, 1985. С. 143.
 151. Мансуров Л.Г., Савицкий В.Г. Электронографическое изучение упорядочения в твердых растворах $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ // VII конф. по процессам роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок. Семинар по использованию элементоорганических соединений в синтезе кристаллов и пленок, по молекулярно-лучевой эпитаксии. Новосибирск,

- 9–13 июня 1986 г. Тез. докл. Т. 2. Новосибирск, 1986. С. 145–146.
152. Скоробогатова Л.А., Хабаров Э.Н. Изменение структуры зоны проводимости твердых растворов $(\text{InSb})_{1-x}(\text{CdTe})_x$ с составом сплавов // Полуметаллы и полупроводники с узкими запрещенными зонами: Материалы III Всесоюз. симпозиума. Львов, 1873. С. 73–78.
153. Скоробогатова Л.А., Петров А.Л., Кузьмина Г.А. Электроотражение твердых растворов системы InSb-CdTe // ФТП. 1979. Т. 13. В. 4. С. 814–815.
154. Мартисов М.Ю. Механизм снижения плотности дислокаций при изовалентном легировании полупроводниковых соединений $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ // ФТП. 1992. Т. 26. В. 5. С. 822–824.
155. Семиколонова Н.А., Хабарова В.А., Хабаров Э.Н. Квазихимический механизм взаимодействия примесей в легированном арсениде индия // Исследования полупроводниковых соединений сложного состава и р-п-переходов на их основе: Сб. ст. Элиста: Калмыцкий госуниверситет, 1981. С. 40–43.
156. Siegrist T., Le Page Y., Holtzberg F. Vacancy ordering in Gd_{1-x}Se // J. Solid State Chem. 1987. V. 68. № 1. P. 185–187.
157. Gubenko A.Ya. Self-organization as a means to suppress and control defect formation in silicon // Materials Science and Engineering. 1999. V. B58. P. 100–103.
158. Крицкий В.Е., Лионов Е.И., Лиопо В.А., Орлов В.Н. и др. Структурные компоненты непсевдобинарных разрезов силленитов // IV школа по физико-химическим основам методов получения и исследования материалов электронной техники: Тез. докл. Новосибирск, 1984. С. 100–101.
159. Крицкий В.Е., Лиопо В.А., Лионов Е.И., Хабаров Э.Н. Анализ возможных структурных позиций размещения примесных атомов в решетке силленита // Деп. в ВИНТИ №7816-В 85. 1985. 20 с.
160. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. 1998. Т. 32. В. 1. С. 3–18.

161. Ионова Г.В., Ионов С.П. Зарядово-орбитальное упорядочение в неорганических кристаллах и его проявление в спектрах ЯМР // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1978. Т. 42. № 6. С. 1297–1315.
162. Ницович В.М., Кновский И.Я., Когутюк И.П., Мойсенко Н.И. Концентрационные зависимости физических свойств зарядовоупорядоченных систем // Журн. физ. химии. 1983. Т. 57. № 5. С. 1068–1078.
163. Ницович В.М., Когутюк И.П., Пронишин И.В. Влияние межэлектронного взаимодействия на фазовые переходы кристаллов в зарядовоупорядоченное состояние // Изв. вузов. Сер. Физ. 1985. Т. 28. № 3. С. 92–94.
164. Ницович В.М., Пронишин И.В., Косяченко С.В., Скаб С.С. Электронные фазовые переходы в зарядовоупорядоченных системах // Ин-т физ. АН УССР. Препр. 1984. № 40. 24 с.
165. Петренко П.В., Лось В.Ф., Репецкий С.П., Кулиш Н.П. Влияние упорядочения на энергетический спектр и электропроводность сплава // ФТТ. 1992. Т. 34. В. 4. С. 1160–1170.
166. Аблязов Н.Н., Эфрос А.Л. Рассеяние электронов на упорядочивающейся системе зарядов // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 4. С. 1450–1458.
167. Богатов Н.М., Семиколенова Н.А., Хабаров Э.Н. Анализ взаимодействия компонентов в сильнолегированном арсениде индия // XI совещание по теории полупроводников: Тез. докл. Ужгород, 1983. С. 76–77.
168. Бонч-Бруевич В.Л., Тябликов С.В. Метод функций Грина в статистической механике. М.: ГИФМЛ, 1961. 312 с.
169. Давыдов А.С. Теория твердого тела. М.: Наука, 1976. 640 с.
170. Хакен Х. Квантовополевая теория твердого тела. М.: Наука, 1980. 344 с.
171. Кушниренко А.Н. Об одном квантово-полевым подходе в теории твердого тела // ИПМ АН УССР. Препр. 1979. № 1. 67 с.
172. Кушниренко А.Н. Квантово-электродинамическая теория твердого тела // ИПМ АН УССР. Препр. 1979. № 3. 56 с.
173. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Квантовые поля. М.: Наука, 1980. 320 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ОБРАЗОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ КОМПОНЕНТОВ И ИХ УПОРЯДОЧЕНИЕ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ Ge-Si	4
1.1. Поиск возможностей получения гомогенных кристаллов твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$	5
1.2. Образование структурных компонентов в расплаве при кристаллизации твердых растворов $Ge_{1-x}Si_x$	8
1.3. Концентрационные свойства кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$	12
1.4. Примесные комплексы кремния в решетке германия.....	18
1.5. Собственные комплексы кремния в решетке германия.....	29
2. ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ ТИПА $A^3V^5-V^6$ СО СВЕРХРЕШЕТКОЙ ИЗ ДОНОРНЫХ АТОМОВ	41
2.1. Функции Грина.....	42
2.2. Уравнения в функциональных производных.....	49
2.3. Массовый и поляризационный операторы.....	52
2.4. Уравнения Дайсона.....	56
2.5. Основные уравнения для кристалла с примесной сверхрешеткой.....	57
2.6. Уравнения для энергетического спектра электронов в кристалле с примесной сверхрешеткой.....	66
2.7. Энергия взаимодействия сверхрешетки.....	69
2.8. Зона запрещенных значений энергии, обусловленная примесной сверхрешеткой.....	83
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	92
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	94

Научное издание

Б о г а т о в Николай Маркович

Х а б а р о в Эдуард Николаевич

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СТРУКТУРНЫХ КОМПОНЕНТОВ
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

ЛР № 020378 от 22.01.97.

Подписано в печать 10.09.2001. Формат 60x84 1/16.

Уч.-изд. л. 5,1. Усл. печ. л. 4,5. Тираж 100 экз. Заказ № .

Кубанский государственный университет

350040 г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149.

Тип. КубГУ. 350023 г. Краснодар, ул. Октябрьская, 25