Uzbek Journal of Physics

Vol.22(№2) 2020 PP.86-91

О СВЯЗАННЫХ ТАММОВСКИХ СОСТОЯНИЯХ В ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

М.Ю. Ташметов[1], Ш. Махкамов[1], А.В. Хугаев[1], Ф.Т. Умарова[1,2], А.Р. Саттиев[1], М.Н. Эрдонов[1], А.Б. Нормуродов[1], Х.М. Холмедов[3]

[1]Институт ядерной физики АН РУз, 100214, Ташкент, Узбекистан
[2] Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз им.У.А. Арифова, 100125, Ташкент, Узбекистан
[3]Ташкентский университет информационных технологий имени аль-Хорезми, 100084, Ташкент, Узбекистан
(Получена 26.07.2019)

Мазкур ишда Тамм ҳолатларининг ҳосил бўлишини чегаравий шартларнинг ғалаёнланиш амплитудаларига боғлиқ равишда ҳисоблаш натижалари тақдим қилинган. Бир ўлчамли занжирнинг турли конфигурациялари учун, қолган эркин ҳолатларни ҳисобга олган ҳолда, чегара яқинида ҳосил бўладиган электронларнинг қўшимча боғланган ҳолатлари ҳисобланди. 2D ва 3D панжара ҳолатлари учун атомларнинг ҳар-хил таркибли моделлари қараб чиқилди ва ушбу ишда ривожлантирилаётган ёндашув доирасида бундай умумлаштириш имконияти таҳлил қилинди.

В настоящей работе представлены результаты расчетов образования таммовских состояний в зависимости от амплитуды возмущений краевых условий. Проведен расчет дополнительных связанных состояний электронов, образующихся вблизи границы, для различных конфигураций одномерной цепочки с учетом оставшихся свободных состояний. Рассмотрены модели с различными составами атомов на случай 2D и 3D решеток и проанализированы возможности такого обобщения в рамках развиваемого в работе подхода.

This paper presents the results of calculations of the formation of Tamm states, depending on the amplitude of the perturbations of the boundary conditions. The calculation of additional bound states of electrons formed near the boundary was carried out for various configurations of a one-dimensional chain, taking into account the remaining free states. Models with different compositions of atoms for the case of 2D and 3D lattices are considered and the possibilities of such a generalization within the framework of the approach developed in the work are analyzed.

Особенности характеристик и параметров полупроводниковых материалов и изделий существенным образом определяются совершенством базового материала, технологическим способом получения кристалла и процессом обработки его поверхности при формировании *p*-*n*-структуры и омического контакта. Однако на практике невозможно достичь получения идеального контакта и переходных структур из-за наличия окисного слоя, различных примесных и структурных дефектных состояний как на поверхности, так и в объёме кристалла.

Разработка способов повышения степени очистки и подготовки поверхности полупроводниковых материалов является одной из наиболее важных задач при проектировании приборов для микро-, нано- и оптоэлектроники. Методы очистки поверхности в основном разделяются на «жидкостные» и «сухие» в зависимости от агрегатного состояния среды [1, 2]. Среди разработанных методов более экономичным и доступным является метод влажной химической очистки. Однако

этот метод требует получения особо чистых химических реагентов. В настоящее время широко используются «сухие» способы, такие как ионно-лучевые и лазерные методы обработки поверхности. На практике для целенаправленного управления поверхностным состоянием полупроводниковых кристаллов и выращиваемых тонких пленок применяются, как правило, оба метода. Однако оптимизация технологических режимов обработки поверхности, особенно физических процессов, протекающих на границе объема кристалла с поверхностью, требует изучения на атомарном уровне состояний структурных неоднородностей и выявления их влияния на свойства кристаллов.

В работе [3] показано, что при ионно-лучевой обработке углеродом поверхностных областей пластин кремния можно управлять типом электропроводности, их структурно-фазовым составом, морфологией и автоэмиссионными свойствами.

Возможности использования правила Иоффе-Регеля для уточнения критерия сильной локализации электронов на поверхности полупроводника приведены в работе [3], а в приближении Томаса-Ферми в [4, 5].

Общеизвестно, что при наличии границы между поверхностью и объемом в материалах с периодической структурой, вблизи их границ, возникают дополнительные локализованные на поверхности связанные состояния, называемые таммовскими [6]. Для изучения процессов их формирования в периодических пространственных полупроводниковых структурах с выраженной границей рассмотрим одномерную цепочку, состоящую из N одинаковых атомов. Отчасти, наше исследование носит методологический характер, однако оно легко допускает обобщенный подход на случай, когда базисные волновые функции атомов цепочки могут коррелировать между собой, что является важным при наличии ненулевого интеграла перекрытия этих волновых функций. Цель настоящей работы заключается в выявлении процесса локализации на поверхности полупроводника сильно связанных состояний электронов с остовами атомов цепочки, с учетом того, что основной вклад определяется только соседними атомами. Для определенности рассмотрим одномерную (1D) цепочку из N одинаковых атомов, для которой уравнение Шредингера запишем в виде:

$$\hat{H} \mid \Psi >= E \mid \Psi > , \tag{1}$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона, $|\Psi>$ – волновая функция состояния и E – энергия этого состояния. Если обозначить, что $\mid \varphi_n >$ – волновые функции электронов в n-ом атоме цепочки, то волновую функцию $|\Psi>$ цепочки можно разложить по собственным волновым функциям $\mid \varphi_n >$, записав выражение в стандартном виде:

$$\left|\Psi > = \sum_{n=1}^{N} C_n \right|\varphi_n > , \tag{2}$$

где C_n – коэффициенты разложения. Тогда уравнение (1) можно переписать в эквивалентном виде:

$$\sum_{n=1}^{N} C_n \left[< \varphi_m \mid \hat{H} \mid \varphi_n > - E < \varphi_m \mid \varphi_n > \right] = 0 . \tag{3}$$

Введя вспомогательные обозначения

$$H_{mn} =< \varphi_m \mid \hat{H} \mid \varphi_n > \text{ и } S_{mn} =< \varphi_m \mid \varphi_n >= \delta_{mn} , \tag{4}$$

уравнение (3) можно переписать в виде:

$$\sum_{n=1}^{N} C_n \left[H_{mn} - E\delta_{mn} \right] = 0 . \tag{5}$$

Введем, по предположению модели, что ненулевыми матричными элементами являются следующие[1]:

$$H_{mn} = \alpha, \quad H_{n\pm1,n} = \beta, \quad H_{mn} = 0 \quad \text{для} \quad m \neq n, n \pm 1 \tag{6}$$

Здесь α – энергия электрона в n-ом атоме, β – амплитуда перехода $|n> \rightarrow |n \pm 1>$. Как мы отметили, это случай сильно связанных с атомами остова электронов. Тогда соотношение (5) определяется следующим уравнением:

$$\sum_{n=1}^{N} C_n \left[H_{mn} + H_{nn+1} + H_{nn-1} - E\delta_{mn} \right] = 0 . \tag{7}$$

Откуда с учетом обозначений (6) имеем уравнение:

$$\sum_{n=1}^{N} C_n \left[\alpha\delta_{mn} + \beta\delta_{nn+1} + \beta\delta_{nn-1} - E\delta_{mn} \right] = 0 , \tag{8}$$

которое, в итоге, мы можем переписать в виде системы линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов разложения:

$$\sum_{n=1}^{N} A_{mn} C_n = 0 . \tag{9}$$

Здесь A_{mn} – трехдиагональная матрица Якоби. Из элементарной теории матриц следует, что нетривиальные решения системы (9) могут быть только в случае, когда $\det \| A_{mn} \| = 0$, откуда получаются собственные значения для энергии E_n и соответствующие им собственные волновые функции при подстановке в (8). Далее, раскрывая матрицу Якоби, чтобы не загромождать уравнение (8), представим детерминант матрицы A_{mn}, обезразмеривая его делением на -2β, в виде рекуррентного соотношения:

$$D_N = \varepsilon D_{N-1} - \frac{1}{4} D_{N-2} , \tag{10}$$

где мы ввели обозначения $\varepsilon = (E - \alpha) / 2\beta$, а D_N – детерминант N-ого порядка.

Учитывая, что детерминант $D_N = U^N$, уравнение (10) запишется в виде

$$U^2 - \varepsilon U + \frac{1}{4} = 0 , \tag{11}$$

решение которого легко найти из выражения

$$U_{1,2} = \frac{1}{2} \left[\varepsilon \pm \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \right], \tag{12}$$

для которого существует общепринятая параметризация в зависимости от значения ε:

$$\text{a)} \ |\varepsilon| < 1 \quad \text{и} \quad \text{b)} \ |\varepsilon| \geq 1 .$$

Оба случая не представляют трудностей для рассмотрения, поэтому мы остановимся на рассмотрении случая а) $|\varepsilon| < 1$. Действительно, в этом случае, вводя параметризацию в виде $\varepsilon = \cos\varphi$, мы получим:

[1] В силу того, что существенными являются “перескоки” электронов только между соседними атомами цепочки, то есть $|n> \rightarrow |n \pm 1>$.

$$U_{1,2} = \frac{1}{2}\left[\cos\varphi \pm i\sin\varphi\right] = \frac{1}{2}\exp(\pm i\varphi). \tag{13}$$

Подставляя это соотношение в (10), получим следующее уравнение

$$D_N = A\exp(i\varphi N) + B\exp(i\varphi N), \tag{14}$$

где постоянные A и B можно вычислить, полагая соответственно $N = 1$ и $N = 2$. Тогда соотношение для детерминанта можно переписать как

$$\det\|\hat{A}\| = D_N = 2^{-N}\frac{\sin[(N+1)\varphi]}{\sin\varphi} = 0. \tag{15}$$

Из последнего соотношения видно, что это условие позволяет привести указанное уравнение к простому виду:

$$(N+1)\varphi = \pi n, \qquad n = 1,2,...,N. \tag{16}$$

Тогда, с учетом нашей параметризации $\varepsilon = \cos\varphi$, мы получим выражение для собственной энергии

$$E_n = \alpha + 2\beta\cos\left(\frac{\pi n}{N+1}\right). \tag{17}$$

Последнее соотношение показывает, что все собственные значения E_N находятся в пределах[2]:

$$\alpha - 2\beta \le E_N \le \alpha + 2\beta, \tag{18}$$

которое демонстрирует нам, что все собственные связанные состояния находятся внутри зоны, ограниченной соотношением (18). Поэтому на «поверхности», то есть на краях этой периодической структуры, не будут появляться никакие дополнительные связанные состояния. Учитываем, что для наличия связанных состояний на границах с необходимостью требуется возмущение на этих границах состояний в атомах. Тогда, по принятой выше аналогии, для детерминанта трехдиагональной матрицы Якоби мы получим следующее рекуррентное соотношение:

$$\det\|\hat{A}'\| = (\varepsilon - \gamma/2)D_{N-1} - \frac{1}{4}D_{N-2} \to D_N = \frac{1}{2}\gamma D_{N-1}. \tag{19}$$

Вводя важный параметр возмущения краевых условий $\gamma = (\alpha' - \alpha)/\beta$, а также проводя параметризацию выражения (19), получаем условие для нахождения связанных состояний с учетом возмущения на границах в виде

$$\gamma = 2\frac{D_N}{D_{N-1}} = \frac{\sin\left[(N+1)\varphi\right]}{\sin\varphi}. \tag{20}$$

Тогда количество связанных состояний электронов на границе поверхности запишется в виде

$$\frac{\alpha' - \alpha}{\beta} = \frac{\sin\left[(N+1)\varphi\right]}{\sin\varphi}. \tag{21}$$

Из соотношения (21) мы видим, что связанные соотношения удовлетворяют условию

$$E_n = \alpha + 2\beta\cos\varphi_n, \tag{22}$$

[2] Простой анализ соотношения (17)

причем φ_n является численным решением уравнения (21). Из этого уравнения с очевидностью следует, что, меняя левую часть уравнения, за счет возмущения, мы можем менять число состояний атомов внутри зоны, описываемой в (18), при этом оставшиеся свободные состояния до числа N будут образовывать связанные состояния электронов, локализованные вблизи границы.

На рисунке представлены графические решения уравнения (21) для разных значений краевых возмущений $(\alpha'-\alpha)/\beta$ и разных чисел атомов в цепочке.

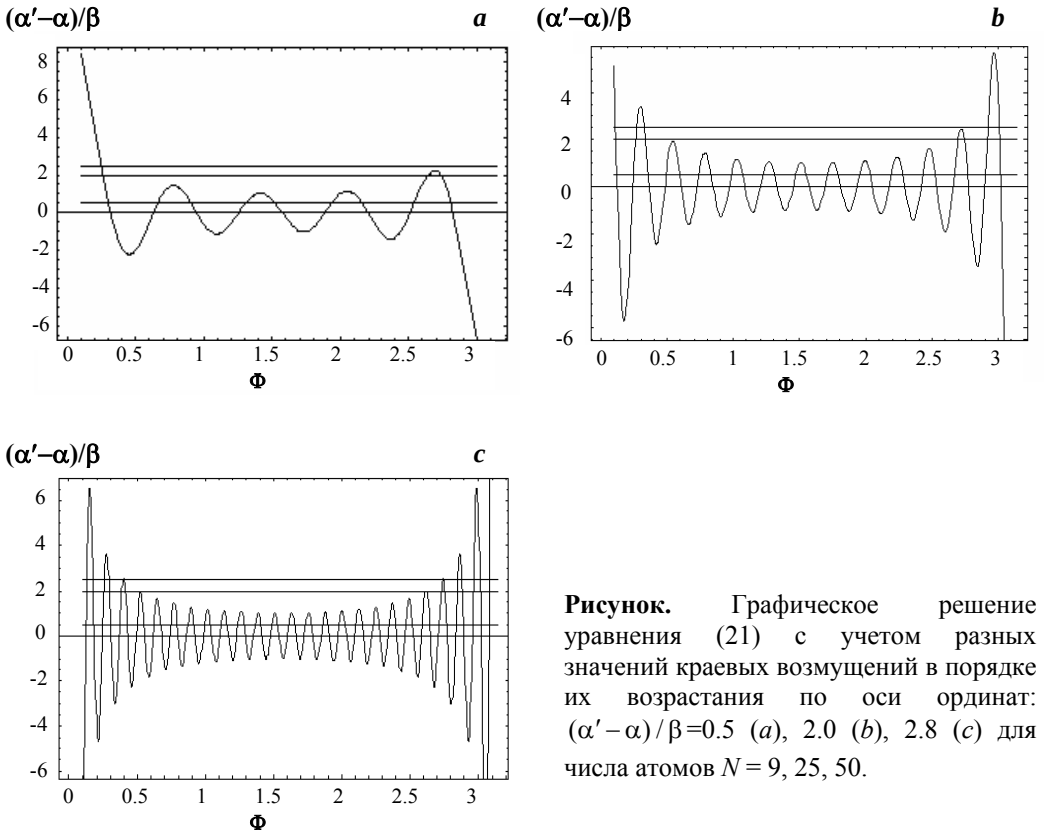


Рисунок. Графическое решение уравнения (21) с учетом разных значений краевых возмущений в порядке их возрастания по оси ординат: $(\alpha'-\alpha)/\beta$=0.5 (*a*), 2.0 (*b*), 2.8 (*c*) для числа атомов N = 9, 25, 50.

Таким образом, на основе проведенных расчетов (см. рисунок) показано, что образование таммовских состояний электронов на границе поверхности зависит от амплитуды возмущений краевых условий. Расчет дополнительных связанных состояний электронов вблизи границы требует детального численного решения для различных конфигураций с учетом оставшихся свободных состояний. На практике востребованными являются модели с различными составами атомов, сохраняющих трансляционную симметрию решетки. Более того, можно обобщить этот подход на случай 2D и 3D решеток, однако его реализация существенно сложнее для демонстрации в рамках одной работы.

Действительно, к примеру, продемонстрируем возможное обобщение на случай 2D, когда у нас образуется решетка на плоскости. В этом случае, система базисных волновых функций уже не будет выражаться, как в случае (2), а запишется более сложным образом:

$$|\Psi_{mn}>=\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{M}C_{mnkl}\,|\varphi_{mk}>|\varphi_{nl}>, \qquad (23)$$

здесь $|\varphi_{ij}>$ базисные волновые функции, при разложении функции $|\Psi_{mn}>$, характеризующей волновую функцию в узле решетки на пересечении ее *n*-ой и *m*-ой осей, которая представляет собой систему из пересекающихся двух семейств параллельных прямых и в узлах пересечения которой находятся атомы. При этом, аналогично предыдущему 1D случаю, мы будем рассматривать только соседние атомы, которые расположены вокруг узла, определяемого пересечением *n*-ой и *m*-ой осей решетки. Это означает, что коэффициенты *n* и *m* будут, при определении волновой функции в узле $\{m,n\}$, соответственно учитывать только состояния в соседних узлах $\{m\pm1,n\pm1\}$. Тогда техника получения результатов при решении соответствующего уравнения Шредингера для 2D существенно усложняется. Аналогичный подход можно реализовать и в случае 3D решетки. Характер обобщения будет следовать той же, намеченной нами, схеме реализации.

Отметим, что реализация этих теоретических подходов и дальнейшие исследования в этом направлении, требуют гораздо более мощных вычислительных ресурсов и будут предметом продолжения наших исследований.

Необходимо отметить, что в фундаментальном аспекте интересно исследовать более тонкие моменты с учетом спиновых состояний и влияния более удаленных, а не только ближайших атомов. Тогда, как можно увидеть, базисные волновые функции в окрестности остовов перестанут быть ортогональными, и все проделанное нами выше потребует введения неортогонального базиса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р.Н. Яфиров, ФТП **52**(9), 980-985 (2018).
2. Т.Т. Муратов, Физика (журн. Беларус. гос ун-та) №2, 117-124 (2018).
3. В.Б. Бондаренко, А.В. Филимонов, ФТП **51**(10), 1372-1375 (2017).
4. R.G. Parr and W. Yang. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (New York, Oxford University Press, 1989).
5. В.Г. Гантмахер. Электроны в неупорядоченных средах (Москва, Физматлит, 2013).
6. И.Е. Тамм, ЖЭТФ **3**, 34-43 (1933).