ФИЗИКА

УДК 467

А. Ж. Хачатрян

Движение электрона в периодической решетке из прямоугольных потенциалов

(Представлено академиком Д. М. Седракяном 11/VII 2003)

Изучение свойства движения электрона в периодическом поле служит основой для «грубого» описания спектра в зонной теории кристаллического твердого тела. В настоящее время интерес к периодическому потенциалу возрос, так как он призван моделировать потенциал, получаемый чередованием полупроводниковых слоев вдоль некоторого направления [1].

В работе [2] рассматривается модель периодического потенциала Кронига-Пенни; показано, что каждое из уравнений, определяющих границы разрешенных зон, делится на два уравнения. Авторам, в частности, удалось выявить эффект соприкосновения разрешенных зон. Здесь приводятся обобщения результатов работы [2], с учетом различия эффективной массы электрона в однородных слоях сверхрешетки. Рассматривается также поведение коэффициента прозрачности в точках соприкосновения зон.

Рассмотрим структуру, представляющую собой периодическое повторение двух однородных слоев толщиной d_1 и d_2 ($a = d_1 + d_2$ - период структуры), внутри которых электрон обладает потенциальными энергиями V_1, V_2 (далее для определенности положим $V_2 > V_1 = 0$) и характеризуется эффективными массами m_1, m_2, соответственно. Дозволенные значения энергий электрона E определяются из следующего неравенства [3]:

$$|\cos\beta a| \leq 1, \ \cos\beta a = \cos q_1 d_1 \cos q_2 d_2 - \frac{m_2^2 q_1^2 + m_1^2 q_2^2}{2m_1 m_2 q_1 q_2} \sin q_1 d_1 \sin q_2 d_2, \tag{1}$$

$$q_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad q_2^2 = \frac{2m_2}{\hbar_2}(E - V_2). \tag{2}$$

где β - квазиимпульс электрона, принимающий значения в интервале $[-\pi/a, \pi/a]$. Согласно (1), уравнения, определяющие границы разрешенных энергетических зон, имеют следующий вид:

$$\cos\beta a = 1 \ \text{ и } \ \cos\beta a = -1. \tag{3}$$

Заметим, что первое уравнение (3) соответствует состояниям краев зоны Бриллюэна ($\beta = \pm\pi/a$), в то время как второе - состояниям центра зоны Бриллюэна ($\beta = 0$).

Переходя в (1) к половинным углам $q_1d_1/2$ и $q_2d_2/2$, можно показать, что каждое из уравнений (1) распадается на два уравнения:

$$\mathrm{tg}\frac{q_1d_1}{2} = -\frac{m_2q_1}{m_1q_2}\mathrm{tg}\frac{q_2d_2}{2}, \quad \mathrm{tg}\frac{q_1d_1}{2} = \frac{m_1q_2}{m_2q_1}\mathrm{tg}\frac{q_2d_2}{2}, \tag{4}$$

$$\mathrm{tg}\frac{q_1d_1}{2} = +\frac{m_2q_1}{m_1q_2}\mathrm{ctg}\frac{q_2d_2}{2}, \quad \mathrm{tg}\frac{q_1d_1}{2} = +\frac{m_1q_2}{m_2q_1}\mathrm{ctg}\frac{q_2d_2}{2}. \tag{5}$$

Уравнения (4), (5) определяют границы нечетных и четных запрещенных зон в надбарьерной области энергий. Уравнения, определяющие границы зон, находящихся в подбарьерной области энергий ($E < V_2$), получаются из (4), (5) путем аналитического продолжения $q_2 = i\gamma$.

Из (4), (5) можно увидеть, что в надбарьерной области значений энергий при определенном выборе параметров потенциала должен иметь место эффект соприкосновения разрешенных зон или, что то же самое, равенство ширины запрещенной зоны нулю. Для этого необходимо выявить условие, при котором уравнения, определяющие различные границы одной запрещенной зоны, обладали бы одним и тем же решением. Так, в случае нечетной запрещенной зоны необходимо требовать одновременного выполнения обоих уравнений (4), а в случае нечетной зоны - обоих уравнений (5). В случае нечетной запрещенной зоны равенство ее ширины нулю дается условием

$$q_1d_1 = n_1\pi \ \text{ и } \ q_2d_2 = n_2\pi, \tag{6}$$

где n_1, n_2 являются одновременно четными или одновременно нечетными числами. Равенство четной запрещенной зоны нулю также дается условием (6), но здесь в отличие от случая нечетной зоны целые числа n_1, n_2 должны иметь различную четность, т.е. если n_1 четно, то n_2 нечетно и если n_1 нечетно, то n_2 четно. Из первого уравнения (6) непосредственно следует, что значение энергий, при которых происходит соприкосновение разрешенных зон, не зависит от параметров m_2 и V_2, характеризующих барьерную область:

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2n_1^2}{2m_1d_1^2}, \quad V = \frac{\hbar^2\pi^2}{2}\left(\frac{n_1^2}{m_1d_1^2} - \frac{n_2^2}{m_2d_2^2}\right). \tag{7}$$

Последнее равенство (7) выражает связь между значениями независимых параметров, что при которых эффект соприкосновения зон имеет место. Заметим также, что при выполнении условия (7) ширина нечетной запрещенной зоны становится равной нулю в центре зоны Бриллюэна, а ширина нечетной запрещенной зоны - на границах зоны Бриллюэна.

Исследуем поведение коэффициента прохождения T электрона в точках контакта энергетических зон для периодической цепочки, когда слева и справа от нее электрон имеет постоянную потенциальную энергию V_1 и эффективную массу m_1. Для периодической цепочки из N потенциалов T может быть представлено в следующем виде [4]:

$$|T|^2 = \left(1 + \left|\frac{r}{t}\right|^2 \frac{\sin^2 N\beta a}{\sin^2 \beta a} \right)^{-1}, \tag{8}$$

где r,t являются амплитудами отражения и прохождения электрона для одиночного потенциала цепочки. Для прямоугольного потенциала с центром в начале координат отношение r/t имеет вид

$$\frac{r}{t} = \frac{i(m_1^2 q_2^2 - m_2^2 q_1^2)}{2m_2 m_2 q_2 q_1} \sin\{q_2 d_2\}. \tag{9}$$

Как видно из (8), для энергий электрона, соответствующих границам энергетических зон, увеличение количества потенциалов N ведет к однозначному отражению электрона. Действительно, при $\beta \to \pm\pi/a$, а также при $\beta \to 0$ для коэффициента прохождения имеем

$$|T|^2 = \left(1 + \left|\frac{r}{t}\right|^2 N^2 \right)^{-1}, \quad \text{при} \quad N \to \infty. \tag{10}$$

Однако следует заметить, что $|T|^2$ стремится к нулю лишь при условии, когда отражение электрона для одиночного потенциала не равно нулю, т.е. $|r/t|^2 \neq 0$. Действительно, как следует из (10), при $|r/t|^2 = 0$ коэффициент прохождения $|T|^2 = 1$ для любого N. Как видно из (6) и (9), при условии контакта энергетических зон коэффициент отражения прямоугольного потенциала обращается в нуль. Отсюда легко заключить, что в точках контакта зон коэффициент прохождения становится равным единице.

Таким образом, соприкосновение разрешенных энергетических зон для периодической цепочки из прямоугольных потенциалов может иметь место как на краях, так и в центре зоны Бриллюэна. В точках соприкосновения зон коэффициент прохождения электрона равен единице, т.е. имеет место полное прохождение электрона. Последнее утверждение никоим образом не противоречит известной теореме теории движения электрона в одномерном периодическом поле, согласно которой на границах энергетической щели электронная волна испытывает полное внутреннее прохождение, препятствующее прохождению электрона внутрь цепочки. Действительно, точка соприкосновения зон не может рассматриваться как точка, определяющая край какой-либо разрешенной зоны. При соприкосновении зон мы имеем одну большую разрешенную зону, состоящую из двух разрешенных зон, для которой точка контакта является внутренней точкой.

В заключение автор выражает благодарность академику Д. М. Седракяну за обсуждение результатов работы.

Государственный инженерный университет Армении

Литература

1. *Mishra S., Satpathy S.*- Am. J. Phys. 2001. V. 69. 512.
2. *Хачатрян А. Ж., Седракян Д. М.* - Изв.НАН Армении. Физика. 2003. Т. 38. N4.
3. *Bastard G.* Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Ulis. France. 1990.
4. *Хачатрян А. Ж.*-Изв.НАН Армении. Физика. 2001. Т. 36. С. 12.

Ա. Ժ. Խաչատրյան

Էլեկտրոնի շարժումը ուղղանկյուն պոտենցիալներից բաղկացած պարբերական ցանցում

Ուսումնասիրված է թույլատրելի գոտիների հպման էֆեկտը: Ցույց է տրված, որ հպման կետում էլեկտրոնային ալիքի անցման գործակիցը պարբերական համակարգի համար հավասար է մեկի: