

- [1] Бродин М. С., Блонский И. В. Экситонные процессы в слоистых кристаллах. Киев, 1986. 253 с.  
 [2] Nakagawa H., Yamada T., Tatsumoto H. // J. Phys. Soc. Jap. 1987. V. 56. N 3. P. 1185—1195.  
 [3] Бродин М. С., Блонский И. В., Добровольский А. А., Каратаев В. Н. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 10. С. 3153—3155.  
 [4] Горчев В. Ф. // Автореф. канд. дис. Киев, 1980.  
 [5] Segall B. // Phys. Rev. 1967. V. 163. N 2. P. 769—776.  
 [6] Пермогоров С. В., Резницкий А. Н., Вербин С. Ю. // Изв. АН СССР, сер. физ. 1985. Т. 49. № 10. С. 2019—2025.  
 [7] Кусмарцев Ф. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 3. С. 892—894.

Институт физики АН УССР  
 Киев

Поступило в Редакцию  
 26 декабря 1988 г.  
 В окончательной редакции  
 19 мая 1989 г.

УДК 538.915

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989  
 Solid State Physics, vol. 31, N 10, 1989

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ИЗОТОПИЧЕСКОЙ СВЕРХРЕШЕТКЕ

В. Ю. Федотов

Рассмотрим сверхрешетку, составленную из чередующихся слоев двух изотопов одного и того же полупроводникового материала (далее ИСР — изотопическая сверхрешетка). Различие кристаллического потенциала в слоях обусловлено в этом случае исключительно различной силой электрон-фононного взаимодействия в изотопах. Очевидно, что при нулевой температуре параметры кристаллических решеток слоев совпадают с точностью до ангармонизма нулевых колебаний. Почти одинакова в слоях форма кристаллического потенциала, немного меняется лишь его амплитуда. Таким образом, гамильтониан, описывающий движение электрона вдоль оси ИСР при нулевой температуре, выглядит следующим образом:

$$H = T + V(x) [1 - v(x)]. \quad (1)$$

Здесь ось  $Ox$  направлена вдоль оси ИСР,  $T$  — оператор кинетической энергии электрона;  $V(x)$  — быстроосциллирующий кристаллический потенциал изотопов;  $v(x)$  — мультипликативная добавка к потенциалу  $V(x)$ , имеющая по сравнению с ним большой период и  $|v(x)| \ll 1$ .

Рассмотрим электрон вблизи минимума зоны проводимости, расположенного в точке  $k_0$  импульсного пространства, полагая эту точку невырожденной. Будем отсчитывать квазиимпульс от  $k_0$ , а энергию — от дна зоны. Уравнение движения электрона запишем, используя метод  $k\rho$ -разложения. Для гамильтониана (1) эта процедура последовательно проделана в [1, 2]. Для рассматриваемого случая в третьем порядке по  $k$  и в атомной системе единиц получим

$$-\frac{1}{4} \left\{ \partial_x^2, \frac{1}{m^*(x)} \right\} \varphi(x) - v^*(x) \psi(x) = E\psi(x). \quad (2)$$

Здесь  $\{, \}$  — антикоммутатор;  $m^*(x)$  — эффективная масса носителей в слоях ИСР;  $v_0^*(x)$  определяет сдвиг зоны за счет электрон-фононного взаимодействия.

Пусть ИСР приготовлена из изотопов с атомными массами  $M_1$  и  $M_2$ , толщина каждого слоя  $d/2$ . Обозначим  $\Delta M = (M_1 - M_2)/2$ ,  $M = (M_1 + M_2)/2$ ;  $m$ ,  $v_0^*$ ,  $\alpha_0$  — эффективная масса электрона, сдвиг зоны и константа электрон-фононной связи, соответствующие изотопу с атомной массой  $M$ ;  $f(x)$  — периодическая функция  $f(x) = f(x+d)$

$$f(x) = \begin{cases} 1, & 0 < x \leq d/2, \\ -1, & d/2 < x \leq d, \end{cases}$$

$m^*(x)$  и  $v^*(x)$  оценим по известным формулам [3], считая, что электрон взаимодействует с акустическими и оптическими фононами

$$\frac{1}{m^*(x)} = \frac{1}{m} + \frac{A}{m} f(x), \quad v^*(x) = v_0^* - Bf(x),$$

где

$$A = \frac{\alpha_0/6}{1 - \alpha_0/6} \frac{\Delta M}{M}, \quad B = v_0^* \frac{\Delta M}{M}.$$

Используя эти обозначения, приведем (2) к виду

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2m} \partial_x^2 \psi(x) - \frac{A}{2m} f(x) \partial_x^2 \psi(x) - \frac{A}{2m} \partial_x f(x) \partial_x \psi(x) - \\ & - \frac{A}{4m} \psi(x) \partial_x^2 f(x) + Bf(x) \psi(x) = \mathcal{E} \psi(x), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\mathcal{E} = E + v_0^*$ .

Это уравнение с периодическими коэффициентами, поэтому волновая функция представима в блоховском виде  $\psi(x) = \exp(ikx) u(k, x)$ , где  $u(k, x)$  — периодическая функция с периодом  $d$ . Подставляя в (3) разложение  $f(x)$  и  $u(k, x)$  в ряд Фурье, приходим к системе уравнений

$$\begin{aligned} & [\mathcal{E}_0(k + Q_l) - \mathcal{E}(k)] c_{nl}(k) + \\ & + \sum_l f_l c_{n-l}(k) \left\{ A \left[ \mathcal{E}_0(k + Q_{n-l}) + \frac{1}{2m} Q_l \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times (k + Q_{n-l}) + \frac{1}{2} \mathcal{E}_0(Q_l) \right] + B \right\} = 0. \end{aligned}$$

Здесь  $\mathcal{E}_0(k) = k^2/2m$  — кинетическая энергия свободного электрона;  $Q_l = 2\pi l/d$ ;  $c_n$ ,  $f_l$  — коэффициенты Фурье-функций  $u(k, x)$  и  $f(x)$ .

Найдем в первом порядке по  $\Delta M/M$  щели у границ, возникших в ИСР зон Бриллюэна. Так как в разложении Фурье  $f(x)$  присутствуют только нечетные гармоники, то и щели образуются у границ нечетных зон. Элементарные вычисления дают следующий результат для зоны с номером  $2N+1$ :

$$\Delta_{2N+1} = (2N+1) A \frac{Q_l^2}{8m} + \frac{B}{2N+1}. \quad (4)$$

Второй член в (4) связан со сдвигом зоны в отдельных слоях ИСР и уменьшается с ростом  $N$ . Первый же член связан с изменением эффективной массы и растет с  $N$ . Следовательно, щель начиная с некоторого номера зоны будет расти.

Оценим для примера величину  $\Delta$  в ИСР, приготовленной из изотопов кремния  $\text{Si}_{28}$  и  $\text{Si}_{30}$ ,

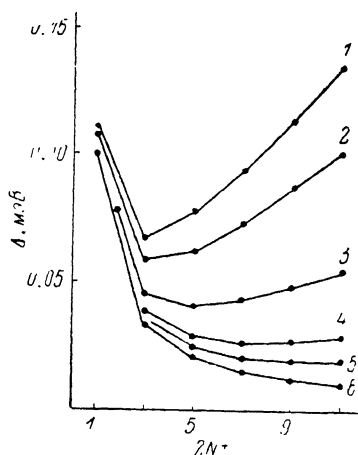
$$\Delta_{2N+1} = \frac{2N+1}{d^2} \cdot 50 + \frac{0.1}{2N+1}. \quad (5)$$

Величина щели измеряется в мэВ,  $d$  — в Å. Все необходимые константы заимствованы из [3].

Зависимость  $\Delta$  от номера зоны при различных  $d$  представлена на рисунке. Видно, что, когда период ИСР становится меньше 100 Å, появляется заметный рост величины щели по мере увеличения номера зоны. Из ри-

сунка следует, что величина щели в ИСР из кремния равна 0.1—0.15 мэВ, т. е. ИСР приводят нас в область сверхузкощелевых структур, которые другими методами получить вряд ли возможно.

Рассматриваемые эффекты можно экспериментально наблюдать, если уширение энергетических уровней в ИСР вследствие рассеяния на примеси или из-за температурного размытия будет заметно меньше, чем  $\Delta_{2N+1}$ . Возьмем в (5)  $d=100 \text{ \AA}$  и  $N=0$ , тогда  $\Delta_1 \approx 0.1 \text{ мэВ}$  (в температурном эквиваленте  $\sim 1.2 \text{ К}$ ). Следовательно, температура в эксперименте не должна превышать  $\sim 0.5 \text{ К}$ . Оценим влияние загрязнений. При технологически достижимой полной концентрации заряженной примеси



Зависимость величины энергетической щели  $\Delta$  от номера зоны в ИСР  $\text{Si}_{28}-\text{Si}_{30}$  при различных периодах ИСР.

Отношение периода ИСР к параметру решетки кремния, равному  $5.4 \text{ \AA}$ : 1 — 12, 2 — 14, 3 — 20, 4 — 30, 5 — 40, 6 — 100.

$\sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$  мы можем воспользоваться для оценки уширения энергетических уровней из-за рассеяния на примеси  $\Delta E$  моделью Корнуэлла—Вайскопфа [3]. Получим  $\Delta E \approx 0.01 \text{ мэВ}$ , и, следовательно, при указанной концентрации примесей энергетическая щель в ИСР не будет заметно размыта.

#### Список литературы

- [1] Leiber L. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 10. P. 4443—4451.
- [2] Leiber L. // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. N 2. P. 863—873.
- [3] Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М.: Мир, 1986. 304 с.

Институт атомной энергии  
им. И. В. Курчатова  
Москва

Поступило в Редакцию  
9 ноября 1988 г.  
В окончательной редакции  
22 мая 1989 г.

УДК 548.0 : 539.37

Физика твердого тела, том 31, в. 10, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, N 10, 1989

### АНОМАЛИИ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ УПРУГИХ СВОЙСТВ ТЕТРАБОРАТА ЛИТИЯ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ

И. М. Сильвестрова, П. А. Сенющенко, В. А. Ломоносов, Ю. В. Писаревский

Кристаллы тетрабората лития  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  (ТБЛ) в последнее время активно исследуются ввиду его перспективности для пьезотехники и акустоэлектроники [1, 2]. До недавнего времени температурные зависимости его упругих свойств были изучены в диапазоне температур  $-30$ — $+60 \text{ }^\circ\text{C}$  [1]. В работе [3] появились сообщения об упругих аномалиях скоростей продольных волн в направлениях X и Z при температуре около  $-110 \text{ }^\circ\text{C}$ . Недавно в [4] обнаружены скачки параметра ячейки ТБЛ вдоль оси Z. Эти скачки изменялись по величине и положению на температурной оси в зависимости от номера цикла охлаждения—нагрев.