

Теория локальных состояний в полупроводниковых кристаллах с учетом полного закона дисперсии носителей заряда в зонах

Г. Ф. Глинский✉, В. А. Смирнова

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, Россия

✉ genaglinskii@mail.ru

Аннотация. Предлагается новый метод расчета локальных (в том числе примесных) состояний в полупроводниковых кристаллах в рамках метода огибающих волновых функций. Основу его составляет одностонный эффективный гамильтониан, учитывающий вклад в искомые локализованные состояния всех блоховских состояний в зоне Бриллюэна. В отличие от общепринятого подхода – метода эффективной массы, данный метод позволяет получить полную информацию об энергетическом спектре и огибающих волновых функциях во всей области энергий, включая состояния вблизи дна (доноры) и потолка (акцепторы) рассматриваемой зоны. Показана важность соблюдения условия периодичности в обратном пространстве матричных элементов эффективного гамильтониана в $\mathbf{k}$ -представлении, что непосредственно следует из использования в нашем подходе блоховского базиса. Представленный метод универсален, поскольку позволяет учесть все особенности зонной структуры рассматриваемого полупроводника, включая эффекты непараболичности, и может быть использован для анализа локализованных состояний при наличии произвольного вида плавного внешнего потенциала.

Ключевые слова: огибающие волновые функции, примеси в полупроводниках, метод эффективной массы, эффективный гамильтониан

Для цитирования: Глинский Г. Ф., Смирнова В. А. Теория локальных состояний в полупроводниковых кристаллах с учетом полного закона дисперсии носителей заряда в зонах // Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2026. Т. 19, № 7. С. 34–44. doi: 10.32603/2071-8985-2026-19-7-34-44.

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Финансирование: Исследование проводилось в рамках проекта № FSEE-2025-0007 (гос. задание Министерства науки и высшего образования РФ № 075-00003-25-00 от 25.12.2024).

Original article

The Theory of Local Conditions in the Semiconductor Crystals Taking into Account the Full Dispersion Law in the Bands

G. F. Glinskii✉, V. A. Smirnova

Saint Petersburg Electrotechnical University, Saint Petersburg, Russia

✉ genaglinskii@mail.ru

Abstract. The new method of creation the effective single-zone Hamiltonian of electron in crystal with smooth external field are presented in the article with taking into account all conditions of Brillouin zone. This method allows to calculate the energy spectrum and wave functions of electron with high accurate in the whole considered zone. While standard method of effective mass can give a calculation of the value of energy and wave functions of electron only for several conditions. The authors demonstrate a necessary of exact accounting the law of electron dispersion and the periodicity condition for the matrix elements in the $\mathbf{k}$ -space of the Bloch basis. Introduced method differ the accuracy, ease of use and universality to all forms of the external fields.

Keywords: envelope wave function, impurities in semiconductors, the effective mass method, effective Hamiltonian

For citation: Glinskii G. F., Smirnova V. A. The Theory of Local Conditions in the Semiconductor Crystals Taking into Account the Full Dispersion Law in the Bands // LETI Transactions on Electrical Engineering & Computer Science. 2026. Vol. 19, no. 7. P. 34–44. doi: 10.32603/2071-8985-2026-19-7-34-44.

Conflict of interests. The authors declare no conflicts of interests.

Funding: The research was conducted as part of project no. FSEE-2025-0007 (state assignment of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation no. 075-00003-25-00 dated 25.12.2024).

Введение. В настоящее время наиболее распространенным приближенным методом расчета энергетического спектра и волновых функций электрона в полупроводниковых кристаллах при наличии плавно изменяющегося в пространстве внешнего поля является метод огибающих волновых функций. В рамках данного подхода предполагается, что все величины, входящие в эффективный гамильтониан, зависящие от волнового вектора $\mathbf{k}$ (Фурье-образ внешнего потенциала, огибающая волновая функция) локализованы в небольшой области $\mathbf{k}$ -пространства [1], [2] вблизи экстремума рассматриваемой зоны так, что в этой области закон дисперсии может быть описан параболическим законом посредством введения эффективной массы. Однако данный метод позволяет рассчитать значения энергии и волновые функции лишь для нескольких нижних локальных состояний электронов и дырок. При этом, используемое в данном подходе приближение не учитывает того факта, что разность волновых векторов $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, от которой зависит Фурье-образ примесного потенциала, выходит за пределы первой зоны Бриллюэна. Более того при выводе уравнения Шредингера для огибающих волновых функций, в качестве базиса удобно использовать блоховские состояния объемного кристалла. В этом случае матричные элементы, описывающие процессы рассеивания носителей заряда на примесном потенциале $V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, зависящие от $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$, – это периодические функции с периодом обратной решетки кристалла. Данная периодичность матричных элементов – важное свойство блоховских состояний, и пренебрежение ею приводит к существенным погрешностям при расчете как энергетического спектра, так и волновых функций в рамках метода огибающих волновых функций.

В данной статье представлен новый подход к построению эффективного однозонного гамильтониана для расчета электронных и дырочных примесных состояний в рамках метода огибающих волновых функций. Такой подход позволяет

учесть все особенности закона дисперсии носителей заряда во всей зоне Бриллюэна, а также необходимое условие периодичности этого гамильтониана в обратном $\mathbf{k}$ -пространстве. Использование данного эффективного гамильтониана позволяет с высокой точностью рассчитать энергетический спектр примесных состояний электронов и дырок, а также огибающие волновые функции всех состояний, сформированных рассматриваемой зоной.

Расчет зонной структуры объемного кристалла методом псевдопотенциала. Запишем уравнение Шредингера для электрона в объемном кристалле в операторном виде [3]:

$$\hat{H}^{(0)}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle,$$

где $\hat{H}^{(0)}$ – гамильтониан объемного кристалла; E – энергетический спектр носителя заряда. В операторном виде гамильтониан данной задачи имеет вид

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U(\hat{\mathbf{x}}),$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса; $\hat{\mathbf{x}}$ – оператор координаты; m_0 – масса свободного электрона; $U(\mathbf{x})$ – периодический кристаллический потенциал:

$$U(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = U(\mathbf{x}).$$

В качестве базиса для решения задачи будем использовать состояния с определенным волновым вектором (импульсом) $|\mathbf{q}\rangle = |\mathbf{b} + \mathbf{k}\rangle$, где $\mathbf{b}$ – векторы обратной решетки кристалла; $\mathbf{k}$ – волновой вектор электрона, пробегающий дискретный ряд значений в зоне Бриллюэна. Данный базис удовлетворяет следующим условиям ортонормированности и полноты:

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \mathbf{b}' + \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}; \\ \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{k}} |\mathbf{b} + \mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{b} + \mathbf{k}| = 1, \end{array} \right.$$

где $\delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}$ и $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ – символ Кронекера. Переход к координатному базису осуществляется с помощью унитарной матрицы и соответствует обычному дискретному преобразованию Фурье:

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{b} + \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\mathbf{b} + \mathbf{k})\mathbf{x}}, \quad (1)$$

где V – конечный объем кристалла, а на волновые функции электрона в координатном представлении накладываются циклические периодические условия Борна–Кармана.

Уравнение Шредингера в выбранном базисе имеет вид

$$\sum_{\mathbf{b}', \mathbf{k}'} \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \hat{H}^{(0)} | \mathbf{b}' + \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{b}' + \mathbf{k}' | \Psi_{n\mathbf{k}''} \rangle = E \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \Psi_{n\mathbf{k}''} \rangle,$$

где n – квантовые числа, номерующие энергетические зоны объемного кристалла. Так как матрица гамильтониана в базисе с определенным волновым вектором $|\mathbf{b} + \mathbf{k}\rangle$ диагональна по индексам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$, то задача распадается на множество независимых задач для различных значений волнового вектора $\mathbf{k}$, играющего в данном случае роль параметра:

$$\sum_{\mathbf{b}'} \hat{H}_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'}^{(0)}(\mathbf{k}) A_{\mathbf{b}', n}(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) A_{\mathbf{b}, n}(\mathbf{k}).$$

Здесь

$$\langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \Psi_{n\mathbf{k}'} \rangle = \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = A_{\mathbf{b}, n}(\mathbf{k}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

– волновые функции электрона в базисе с определенным волновым вектором. Переход к координатному представлению волновой функции осуществляется Фурье-преобразованием с использованием матрицы (1):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle &= \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{b}} \langle \mathbf{x} | \mathbf{b} + \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | \Psi_{n\mathbf{k}} \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{b}} e^{i(\mathbf{b} + \mathbf{k})\mathbf{x}} A_{\mathbf{b}, n}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (2)$$

где $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{b}} e^{i\mathbf{b}\mathbf{x}} A_{\mathbf{b}, n}(\mathbf{k})$ – периодическая часть блоховской волновой функции, которая удовлетворяет условию $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x} + \mathbf{a})$, где $\mathbf{a}$ – произвольный вектор трансляции кристалла. Волновая функция в координатном представлении (2) имеет вид блоховской волновой функции.

В качестве примера на рис. 1 представлен результат расчета зонной структуры одномерного модельного кристалла, где E_0 – единица измерения энергии, a_0 – постоянная кристаллической решетки.

Важное свойство блоховских состояний – их периодичность в $\mathbf{k}$ -пространстве. В отличие от состояний с определенным волновым вектором, в блоховских состояниях вектор $\mathbf{k}$ – это квазиволновой вектор, определенный с точностью до произвольного вектора обратной решетки кристалла $\mathbf{b}$:

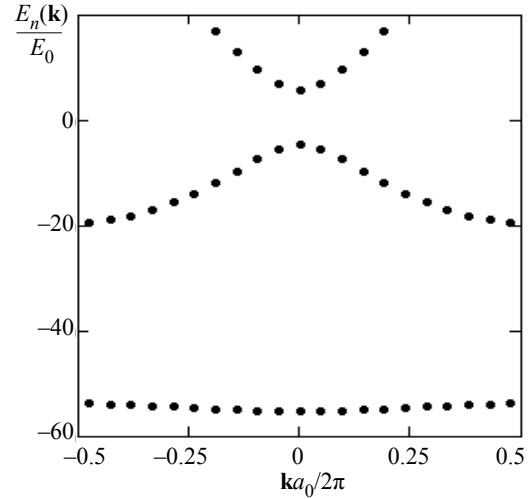


Рис. 1. Зонная структура модельного одномерного кристалла
Fig. 1. Band structure of model one-dimensional crystal

$$|\Psi_{n, \mathbf{k}}\rangle = |\Psi_{n, \mathbf{k} + \mathbf{b}}\rangle. \quad (3)$$

Таким образом, все матричные элементы, входящие в гамильтониан примесной задачи, полученные в блоховском базисе, должны удовлетворять аналогическому условию периодичности в $\mathbf{k}$ -пространстве.

Точное решение задачи при наличии плавного внешнего потенциала. Перейдем к точному решению задачи об электронных состояниях в кристалле при наличии плавного внешнего потенциала (потенциала примеси) в рамках многозонной модели. В качестве базиса для решения уравнения Шредингера используем блоховские состояния объемного кристалла $|\Psi_{n, \mathbf{k}}\rangle$. Данный

подход позволяет рассчитать энергетический спектр электрона и его волновые функции для плавного примесного потенциала произвольной формы. На рис. 2 в качестве примера представлен наиболее общий случай внешнего потенциала $V(x)$, соответствующий донору и акцептору, разнесенных в пространстве (пунктирная линия проведена для наглядности и указывает положения в пространстве донора и акцептора). Потенциал донорной примеси задается с помощью плавной функции с отрицательной амплитудой, а акцепторные примеси – с положительной амплитудой. Для простоты восприятия на приведенных рисунках амплитуда внешнего потенциала несколько увеличена.

Гамильтониан электрона в кристалле с примесью имеет вид

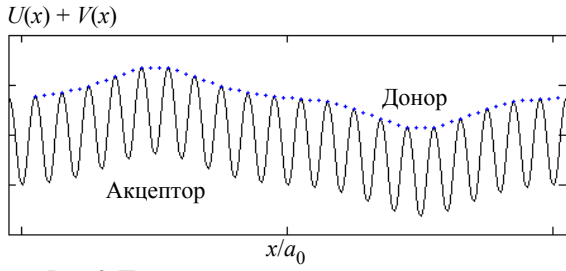


Рис. 2. Потенциал структуры – кристаллический потенциал с включенными донорными и акцепторными центрами, разделенными в пространстве

Fig. 2. The potential of the structure – crystal potential with donor and acceptor impurity

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + U_{\text{кр}}(\hat{\mathbf{x}}) + V(\hat{\mathbf{x}}),$$

где $V(\hat{\mathbf{x}})$ – оператор внешнего потенциала. Первые два слагаемых представляют собой гамильтониан объемного кристалла:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\hat{\mathbf{x}}). \quad (4)$$

Вид внешнего потенциала $V(\mathbf{x})$ может быть выбран произвольно. Результаты расчета, приведенные далее, выполнены для модельной одномерной задачи, в которой донорная и акцепторные примеси разделены в пространстве. В качестве функции внешнего примесного потенциала выбиралась функция вида

$$V(x) = V_0 e^{-x^2/d^2},$$

где V_0 – параметр, определяющий амплитуду внешнего потенциала; d – параметр, определяющий его ширину.

Гамильтониан электрона в кристалле с плавным внешним потенциалом (4) в базисе блоховских состояний имеет вид

$$\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | [\hat{H}_0 + V(\hat{\mathbf{x}})] | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle.$$

Блоховские состояния – это собственные состояния оператора $\hat{H}_0$. Гамильтониан объемного кристалла в блоховском базисе диагонален:

$$\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H}_0 | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = E_n(\mathbf{k}) \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}.$$

Оператор внешнего потенциала в блоховском базисе

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle &= \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \mathbf{b} + \mathbf{k} \rangle \times \\ &\times \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \mathbf{b}' + \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{b}' + \mathbf{k}' | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') A_{\mathbf{b}'n'}(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{b} + \mathbf{k} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \mathbf{b}' + \mathbf{k}' \rangle &= \\ &= \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} V(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{x}} = V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \end{aligned}$$

– Фурье-образ функции внешнего потенциала. В результате будем иметь

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle &= E_n(\mathbf{k}) \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \\ &+ \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') A_{\mathbf{b}'n'}(\mathbf{k}'). \end{aligned} \quad (6)$$

Уравнение Шредингера в блоховском базисе имеет вид

$$\sum_{n, \mathbf{k}'} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \hat{H} | \Psi_{n'\mathbf{k}'} \rangle \langle \Psi_{n'\mathbf{k}'} | \Psi_l \rangle = E_l \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | \Psi_l \rangle,$$

где l – собственный индекс искомого состояния. Таким образом решение рассматриваемой задачи сводится к поиску собственных векторов и собственных чисел матрицы (6). Данная задача решалась численным методом.

На рис. 3 представлен энергетический спектр электронов при различных значениях параметра w , определяющего ширину примесных донорных и акцепторных потенциалов. Для наглядности на графике также показана выделенная область, соответствующая ширине зоны объемного кристалла, формирующей данные донорные и акцепторные примесные состояния.

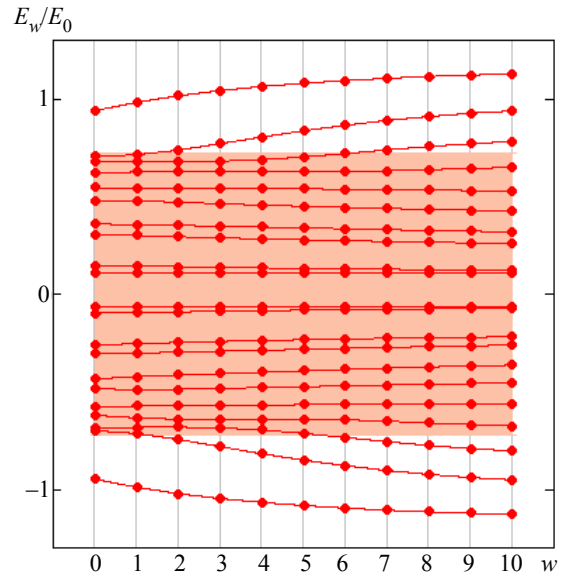


Рис. 3. Энергетический спектр электрона при различных значениях ширины примесного потенциала (точное решение)

Fig. 3. The energy spectrum of electron for different values of impurity potential

Параметры примесного потенциала определялись следующим образом:

$$d_w = d_{\min} + \Delta dw,$$

где w – параметр, определяющий ширину примесного потенциала, $w = 0, 1, \dots, 10$; d_w – параметр, определяющий его ширину); $d_{\min} = 2a_0$ – минимальная ширина потенциала; $\Delta d = 0.2a_0$ – шаг ее изменения. На рис. 4 в качестве примера представлены результаты расчета волновых функций электрона и дырки вблизи дна и потолка рассматриваемой зоны (для состояний с номерами $v = 0$, $v = 20$), соответствующие локализованным донорным и акцепторным состояниям, а также внутризонного состояния электрона ($v = 10$).

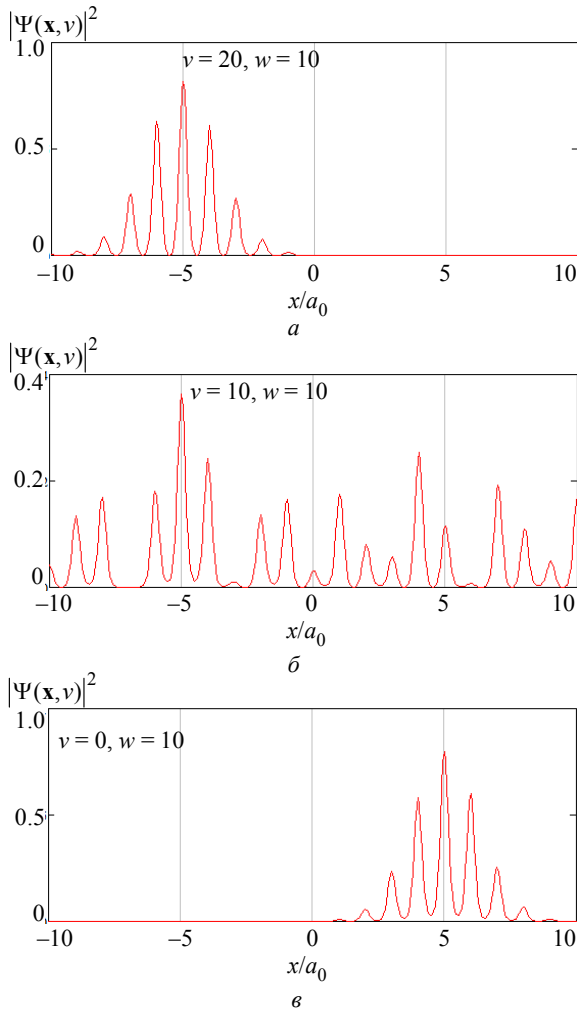


Рис. 4. Волновые функции электрона в кристалле в присутствии внешнего поля: a – электрон на доноре; b – свободный электрон в зоне; c – дырка на акцепторе

Fig. 4. Electron wave functions in the crystal with external field: a – electron on the donor; b – free electron in the band; c – holes in the acceptor

На рис. 5, a показан вклад блоховских состояний, принадлежащих различным зонам, в формирование рассматриваемых примесных состояний.

Вклад других зон пренебрежимо мал. На рис. 5, b показаны волновые функции в $\mathbf{k}$ -пространстве для различных уровней локальных состояний. Как видно из графиков, волновые функции донорных и акцепторных состояний локализируются в $\mathbf{k}$ -пространстве вблизи дна и потолка рассматриваемой зоны соответственно. На этом же рисунке показан закон дисперсии нижней зоны объемного кристалла.

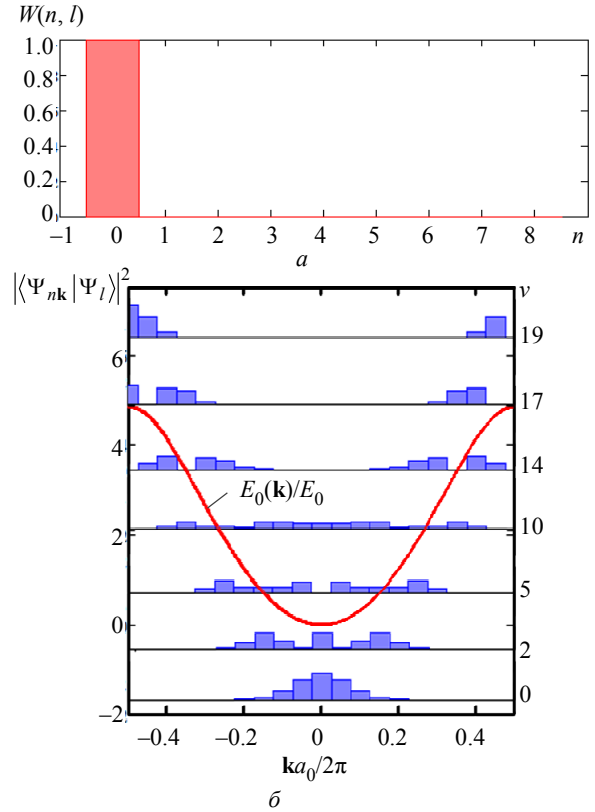


Рис. 5. a – вклад блоховских состояний с номером n в формирование рассматриваемых точных электронных состояний; b – волновые функции электронов в $\mathbf{k}$ -представлении для состояний v
Fig. 5. a – contribution of Bloch states with number n for generation electron states; b – wave functions of electron in the $\mathbf{k}$ -space for states v

Метод огибающих волновых функций в рамках однозонной модели (общепринятый подход). Наиболее распространенный метод расчета локальных состояний в полупроводниковых кристаллах – это метод эффективной массы. В рамках этого метода точная дисперсионная зависимость $E_n(\mathbf{k})$ рассматриваемой зоны, входящая в состав гамильтониана (6), раскладывается в ряд по степеням волнового вектора $\mathbf{k}$:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\partial E_n}{\partial k_i}(0)k_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j}(0)k_i k_j + \dots$$

В этом разложении удобно положить $E_n(0) = 0$. Второе слагаемое также имеет нулевое значение, поскольку в точке экстремума $\frac{\partial E_n}{\partial k_i}(0) = 0$. Только третье слагаемое является первым ненулевым слагаемым этого ряда. Введем обозначение $\frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_i \partial k_j}(0) = \gamma_{i,j}$ – тензор, пропорциональный тензору обратной эффективной массы. Таким образом, для расчета используется параболическое приближение закона дисперсии электрона. Данное приближение хорошо описывает дисперсию только вблизи экстремумов рассматриваемой зоны. На рис. 6 представлено параболическое приближение закона дисперсии в областях вблизи точек экстремумов, в центре зоны Бриллюэна и на ее границе.

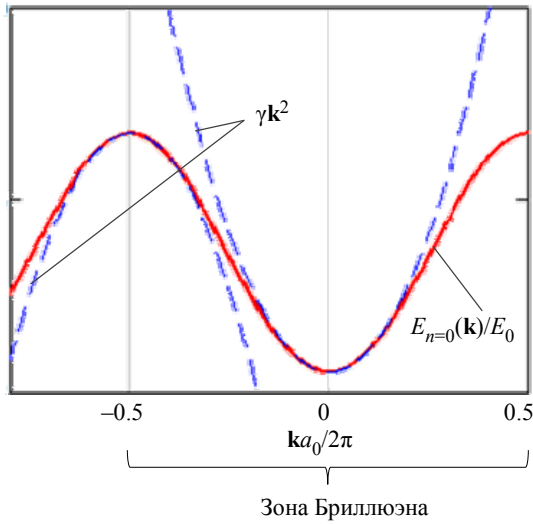


Рис. 6. Параболическое приближение (штриховая линия) точного закона дисперсии (сплошная линия) вблизи экстремумов
Fig. 6. The parabolic approximation (dashed line) of exact dispersion law (solid line)

В рамках однозонной модели матричные элементы оператора внешнего потенциала на блоховских состояниях рассматриваемой зоны n имеют вид

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{n\mathbf{k}'} \rangle = \\ = \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') A_{\mathbf{b}'n}(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (7)$$

где $V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ – Фурье-образ примесного потенциала. Далее предполагается, что этот потенциал представляет собой плавную функцию,

слабо изменяющуюся в пределах элементарной ячейки кристалла [1], [2]. В этом случае Фурье-образ не выходит за границы зоны Бриллюэна и может быть приближенно представлен в виде

$$V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \approx V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'}. \quad (8)$$

Таким образом, приближенно

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{n\mathbf{k}} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{n\mathbf{k}'} \rangle = \\ = \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \delta_{\mathbf{b}\mathbf{b}'} A_{\mathbf{b}'n}(\mathbf{k}') = \\ = V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \sum_{\mathbf{b}} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) A_{\mathbf{b}n}(\mathbf{k}'). \end{aligned}$$

Значения волновых векторов $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ считаются малыми и близкими друг к другу, поэтому приближенно выполняется следующее соотношение:

$$\sum_{\mathbf{b}} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) A_{\mathbf{b}n}(\mathbf{k}') \approx \sum_{\mathbf{b}} A_{n\mathbf{b}}^*(\mathbf{k}) A_{\mathbf{b}n}(\mathbf{k}) = 1.$$

Таким образом, матричные элементы внешнего примесного потенциала в рамках метода эффективной массы имеют вид

$$\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{n\mathbf{k}'} \rangle = V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

а эффективный гамильтониан может быть записан как

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^n = \gamma \mathbf{k}^2 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + V(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (9)$$

Данный гамильтониан соответствует макроскопической теории, поскольку содержит только макроскопический параметр кристалла – эффективную массу электрона, которая может быть определена из эксперимента.

Метод огибающих волновых функций в рамках однозонной модели (новый подход). В настоящей статье предлагается новый подход к определению эффективного однозонного макроскопического гамильтониана электрона в кристалле в присутствии плавного внешнего поля. Данный метод отталкивается от точных матричных элементов гамильтониана (6), соответствующих рассматриваемой зоне n . Однако предлагаемый подход требует введения других приближений, отличающихся от тех, которые вводились в рамках общепринятого метода эффективной массы. Фурье-образ функции внешнего потенциала, входящий в состав точных матричных элементов примесного потенциала рассматриваемой зоны (7), можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \\
 &= \frac{1}{V} \int_V d\mathbf{x} V(\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{b}-\mathbf{b}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{x}} = [\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{a} + \mathbf{y}] = \\
 &= \frac{1}{N\Omega} \sum_{\mathbf{a}} \int_{\Omega} d\mathbf{y} V(\mathbf{a} + \mathbf{y}) e^{-i(\mathbf{b}-\mathbf{b}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{a}+\mathbf{y})},
 \end{aligned}$$

где N – количество элементарных ячеек кристалла в структуре; Ω – объем элементарной ячейки кристалла. Здесь непрерывная координата $\mathbf{x}$ представлена как сумма координаты ячейки кристалла $\mathbf{a}$ и непрерывной координаты $\mathbf{y}$ внутри этой ячейки. Далее, раскладывая функцию $V(\mathbf{a} + \mathbf{y})$ в ряд по $\mathbf{y}$, получим

$$V(\mathbf{a} + \mathbf{y}) = V(\mathbf{a}) + \frac{\partial V}{\partial y_i}(\mathbf{a})y_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial y_i \partial y_j}(\mathbf{a})y_i y_j + \dots$$

Считая потенциал плавным, ограничимся приближением

$$V(\mathbf{a} + \mathbf{y}) \approx V(\mathbf{a}).$$

Введение данного приближения соответствует усреднению примесного потенциала внутри каждой элементарной ячейки кристалла. Таким образом получим

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') &= \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} V(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{b}-\mathbf{b}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{a}+\mathbf{y})} = \\
 &= \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \xi(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}').
 \end{aligned}$$

В этом уравнении

$$\tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{a}} V(\mathbf{a}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}}$$

– Фурье-образ функции $V(\mathbf{a})$ от дискретной переменной $\mathbf{a}$, который в общем случае отличается от Фурье-образа $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ (8) функции непрерывной переменной $\mathbf{x}$. Функция $\xi(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{y} e^{-i(\mathbf{b}-\mathbf{b}'+\mathbf{k}-\mathbf{k}')(\mathbf{a}+\mathbf{y})}$ в блоховском базисе

принимает вид

$$\Delta_{nn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \sum_{\mathbf{b}, \mathbf{b}'} A_{nb}^+(\mathbf{k}) \xi(\mathbf{b} - \mathbf{b}' + \mathbf{k} - \mathbf{k}') A_{nb'}(\mathbf{k}').$$

Численный расчет показывает, что величина $\Delta_{nn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ близка к 1 (рис. 7) и может быть опущена при расчете.

Таким образом матричные элементы примесного потенциала с учетом введенных приближений нашей теории будут иметь вид

$$\langle \Psi_{n\mathbf{k}} | V(\hat{\mathbf{x}}) | \Psi_{n\mathbf{k}'} \rangle = \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (10)$$

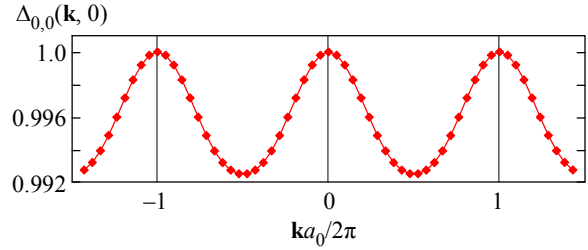


Рис. 7. Численный расчет значений функции $\Delta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$

Fig. 7. Numerical calculation values of $\Delta_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$

Нетрудно показать, что разность волновых векторов, входящая в состав Фурье-образа (10), вопреки устоявшемуся мнению [1], [2] выходит за границы зоны Бриллюэна и распространяется в соседние зоны. Кроме того, точные матричные элементы (5), рассчитанные в рамках многозонной модели, удовлетворяют условию периодичности в $\mathbf{k}$ -пространстве (3). Предложенный нами Фурье-образ (10) в отличие от общепринятого Фурье-образа (8) обладает периодичностью в обратном пространстве. Это различие продемонстрировано на рис. 8, где точные матричные элементы примесного потенциала для одномерной модельной задачи сравниваются с приближенными матричными элементами, рассчитанными нами и в рамках общепринятого подхода.

Как следует из этих данных, матричные элементы (10), рассчитанные в рамках нашего приближения, удовлетворяют условию периодичности в $\mathbf{k}$ -пространстве. В свою очередь, матричные элементы, рассчитанные в рамках обычного подхода, совпадают с точным результатом только в пределах зоны Бриллюэна.

Таким образом в рамках нового подхода можно не ограничиваться параболическим приближением в законе дисперсии рассматриваемой зоны и введением эффективной массы электрона, а рассматривать точный закон дисперсии во всей зоне Бриллюэна. Эффективный гамильтониан в рамках данного подхода принимает вид

$$H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^n = E(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (11)$$

Соответствующее уравнение Шредингера:

$$\sum_{\mathbf{k}'} H_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^n \langle \mathbf{k}' | F_l \rangle = E_l \langle \mathbf{k} | F_l \rangle,$$

где $\langle \mathbf{k}' | F_l \rangle$ – огибающая волновая функция в $\mathbf{k}$ -представлении. Данное уравнение представляет собой задачу на поиск собственных чисел и собственных столбцов матрицы гамильтониана.

Расчет огибающих волновых функций. Эффективные однозонные гамильтонианы (9) и (11) записаны в $\mathbf{k}$ -представлении. Эквивалентной

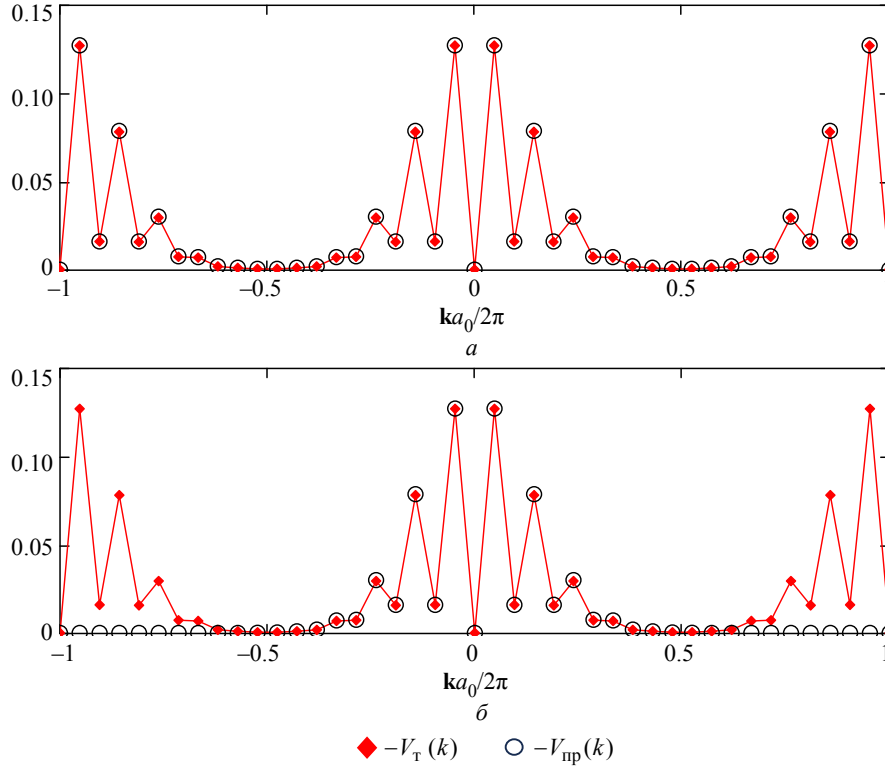


Рис. 8. Сравнение точных матричных элементов $V_T(k)$ с приближенными $V_{\text{пр}}(k)$: а – наш подход; б – общепринятый метод эффективной массы

Fig. 8. Contrast of exact $V_T(k)$ and approximate $V_{\text{пр}}(k)$ matrix elements:
 а – our method; б – the standard effective mass method

формой может служить их запись в **а**-представлении, где **а** – векторы, определяющие координаты ячейки кристалла. Переход между этими двумя представлениями осуществляется с помощью унитарной матрицы преобразования:

$$\langle \mathbf{a} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}. \quad (12)$$

Таким образом, огибающие волновые функции в **а**-представлении должны быть найдены с помощью матрицы перехода (12):

$$F_l(\mathbf{a}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \langle \mathbf{k} | F_l \rangle.$$

Огибающие волновые функции могут быть найдены только в дискретных точках прямого пространства **а**. Данное условие принципиально, поскольку только векторы **к** и **а** являются сопряженными величинами относительно преобразования Фурье.

Сравнение полученных результатов. В этом разделе представлены результаты расчета энергетического спектра E_v и волновых функций электрона, найденных с помощью описанных приближенных методов, а также их сравнение с точным расчетом. На рис. 9 и 10 показано сравнение

результатов расчета энергетического спектра электрона приближенными методами (кружки) с точным результатом (точки) при разных значениях ширины внешнего потенциала, сплошным цветом обозначена ширина зоны объемного кристалла:

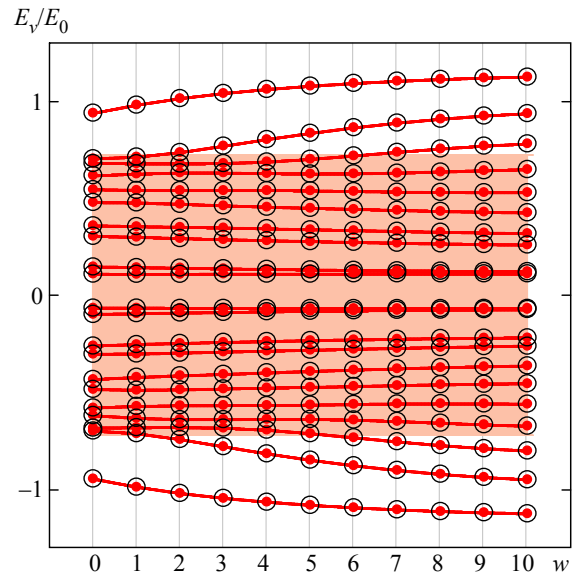


Рис. 9. Сравнение точного энергетического спектра электрона с расчетом нашим методом

Fig. 9. Contrast of exact and approximate electron spectrum in our method

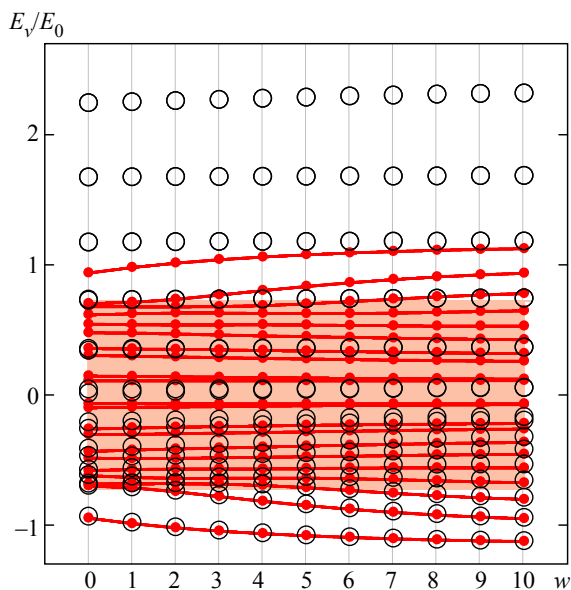


Рис. 10. Сравнение точного энергетического спектра электрона с расчетом общепринятым методом
Fig. 10. Contrast of exact and approximate electron spectrum in standard effective mass method

Как видно из рис. 10, общепринятый подход позволяет получать приемлемые результаты только для нижних уровней энергии, так как не учитывает эффектов непараболичности в законе дисперсии рассматриваемой зоны, которые вблизи потолка зоны приводят к изменению знака эффективной массы. Предлагаемый нами подход (рис. 9) позволяет рассчитать с высокой точностью энергетический спектр электронов и дырок во всей рассматриваемой области энергий даже в случае узкого (единицы элементарных ячеек) внешнего потенциала.

На рис. 11 и 12 представлены волновые функции электрона и дырки вблизи дна и потолка рассматриваемой зоны, соответствующие донорным и акцепторным состояниям, а также внутрizonная волновая функция сплошного спектра.

Данные графики (рис. 11) демонстрируют превосходное совпадение волновых функций электрона, рассчитанных в рамках нового подхода к методу

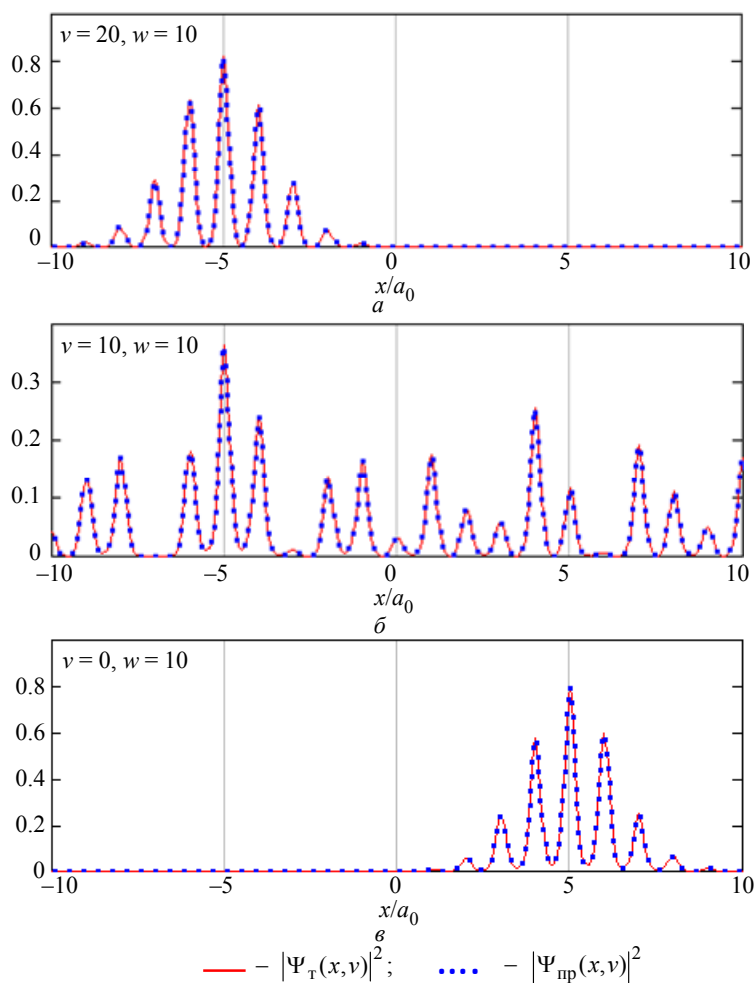


Рис. 11. Сравнение точных волновых функций электрона (сплошные линии) с волновыми функциями, полученными в рамках нового метода огибающих волновых функций (точечные линии)
Fig. 11. Comparison of the exact wave functions of an electron (solid lines) with the wave functions obtained using the new envelope wave function method (point lines)

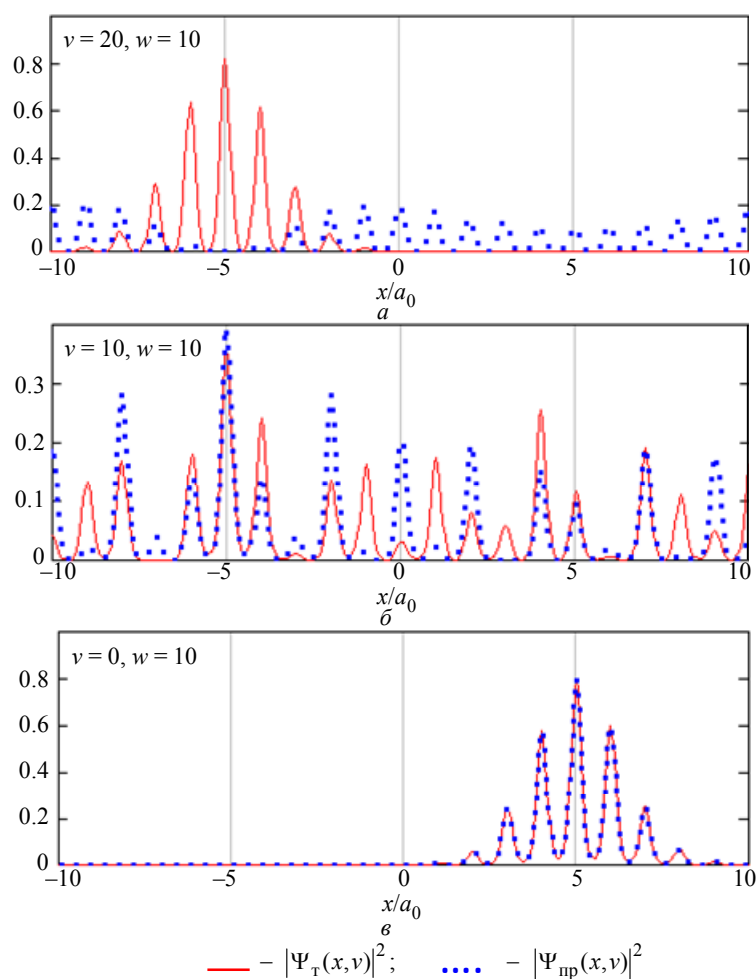


Рис. 12. Волновые функции электрона, полученные в рамках общепринятого метода эффективной массы (точечная линия) и их сравнение с точным результатом (сплошная линия)
 Fig. 12. The wave functions of an electron obtained using the generally accepted effective mass method (dotted line) and their comparison with the exact result (solid line)

оггибающих волновых функций, с результатами точного расчета во всей исследуемой области энергий. Для сравнения на рис. 12 представлены аналогичные результаты расчета общепринятым методом и их сравнение с точным расчетом.

Таким образом, метод эффективной массы позволяет рассчитать только несколько нижних электронных состояний для доноров и верхних дырочных состояний для акцепторов посредством введения соответствующих эффективных масс.

Заключение. В статье представлен новый метод определения эффективного гамильтониана электрона в полупроводниковом кристалле при

наличии плавного внешнего поля. Данный метод позволяет с единых позиций исследовать энергетический спектр и волновые функции носителей заряда во всем рассматриваемом диапазоне энергий. В основе метода лежат учет периодичности эффективного гамильтониана в $\mathbf{k}$ -пространстве, а также полный учет дисперсии носителей заряда в объемном полупроводниковом кристалле. Показано, что данный эффективный гамильтониан позволяет рассчитать энергетический спектр и волновые функции электронов и дырок, практически совпадающие с точными результатами численных расчетов.

Список литературы

1. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // Phys. Rev. 1955. Vol. 97, no. 4. P. 869–883. doi: 10.1103/physrev.97.869.
2. Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.

3. Глинский Г. Ф. Полупроводники и полупроводниковые наноструктуры: симметрия и электронные состояния. СПб., Технолит, 2008. 324 с.

Информация об авторах

Глинский Геннадий Федорович – д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры микро- и нанoeлектроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».

E-mail: genaglinskii@mail.ru

<https://orcid.org/0000-0002-4952-9664>

Смирнова Василиса Александровна – аспирант кафедры микро- и нано- электроники СПбГЭТУ «ЛЭТИ».

E-mail: vasic.99@mail.ru

References

1. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // Phys. Rev. 1955. Vol. 97, no. 4. P. 869–883. doi: 10.1103/physrev.97.869.

2. Bir G. L., Pikus G. E. Simmetrija i deformacionnye jefekty v poluprovodnikah. M.: Nauka, 1972. 584 s. (In Russ.).

3. Glinskij G. F. Poluprovodniki i poluprovodnikovye nanostruktury: simmetrija i jelektronnye sostojanija. SPb., Tehnolit, 2008. 324 s. (In Russ.).

Information about the authors

Gennady F. Glinskii – Dr Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: genaglinskii@mail.ru

<https://orcid.org/0000-0002-4952-9664>

Vasilisa A. Smirnova – postgraduate student, Department of Micro- and Nanoelectronics, Saint Petersburg Electrotechnical University.

E-mail: vasic.99@mail.ru

Статья поступила в редакцию 29.12.2025; принята к публикации после рецензирования 05.05.2026; опубликована онлайн 28.09.2026.

Submitted 29.12.2025; accepted 05.05.2026; published online 28.09.2026.
