

12,13,18

Гексагональные двумерные слои соединений $A_N B_{8-N}$ на полупроводниках

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 17 ноября 2015 г.
В окончательной редакции 2 декабря 2015 г.)

С использованием параболической модели электронного спектра подложки и низкоэнергетической аппроксимации закона дисперсии для двумерных гексагональных соединений $A_N B_{8-N}$ исследована зависимость плотности состояний эпитаксиального слоя от величины запрещенной зоны субстрата и ширины щели графеноподобного соединения (ГПС) в свободном состоянии, их взаиморасположения и безразмерной константы связи слой–подложка C . Показано, что при превышении константой C определенных критических значений плотность состояний эпитаксиального слоя испытывает качественные изменения. Рассматривались как плоские, так и измятые эпитаксиальные слои. Приведены оценки перераспределения заряда при трансформации плотности состояний ГПС.

1. Введение

В последнее время значительное внимание уделяется теоретическому описанию графеноподобных соединений (ГПС) [1–8] и слоистых структур, созданных на их основе [9–15]. В отличие от бесщелевых графена, силицена и германена, бинарные соединения $A_N B_{8-N}$ при $A \neq B$ в свободном состоянии обладают запрещенной зоной. Именно это обстоятельство делает соединения $A_N B_{8-N}$ перспективными элементами приборных структур. Обращаясь к таким структурам, следует рассматривать, однако, не свободные 2D листы, а эпитаксиальные слои, сформированные на твердотельных подложках. В предыдущей работе [16] мы решили общую задачу об адсорбции монослоя $A_N B_{8-N}$ и рассмотрели случай металлической подложки. Здесь мы обратимся к полупроводниковому субстрату, т. е. к гетероструктурам ГПС/объемный полупроводник. Как и в работе [16], будем использовать подход, основанный на теории функций Грина и методе сильной связи [17], что дает возможность получить аналитические выражения для электронного спектра и плотности состояний эпитаксиальных слоев.

Согласно работам [1,5,6] (см. также приведенные там ссылки на более ранние публикации), некоторые ГПС, находясь в свободном состоянии, имеют не плоскую (flat — F), а измятую (buckled — B) структуру, где атомы A и B располагаются в двух достаточно близко расположенных плоскостях. С другой стороны, расчеты [4] показывают, что плоская структура выгодна во всех рассмотренных случаях. Здесь мы в общем виде рассмотрим оба случая.

Во избежание недоразумений, следует подчеркнуть, что все рассматриваемые здесь гетероструктуры явля-

ются в настоящее время гипотетическими. Исключение составляет только гексагональный нитрид бора (h -BN): теоретически изучались двух- и трехслойные системы графен / h -BN [11] и h -BN/графен/ h -BN [13]. Отметим еще один момент: соединение $A_N B_{8-N}$, неустойчивое в свободном 2D состоянии, может обрести устойчивость в виде эпитаксиального слоя, как это имеет место для металлической подложки [6,7].

2. Общие соотношения

В соответствии с общей теорией [17,18], функции Грина $g^{A(B)}$ невзаимодействующих между собой адатомов A и B можно представить в виде

$$g^{A(B)}(\omega) = (\Omega_{a(b)} + i\Gamma_{a(b)}(\omega))^{-1}, \quad (1)$$

где ω — энергетическая переменная, $\Omega_{a(b)} = \omega - \tilde{\epsilon}_{a(b)}$, $\tilde{\epsilon}_{a(b)} = \epsilon_{a(b)} + \Lambda_{a(b)}(\omega)$, $\epsilon_{a(b)}$ — энергия p -орбитали атома $A(B)$, $\Gamma_{a(b)}(\omega) = \pi V_{a(b)}^2 \rho_{sub}(\omega)$ — функция уширения (полуширина) квазиуровня адатома $A(B)$, $V_{a(b)}$ — матричный элемент взаимодействия атома $A(B)$ с подложкой, $\rho_{sub}(\omega)$ — плотность состояний подложки, $\Lambda_{a(b)}(\omega) = P \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_{a(b)}(\omega') d\omega'}{\omega - \omega'}$ — функция сдвига квазиуровня адатома $A(B)$, P — символ главного значения. Предполагается, что все адатомы A находятся в эквивалентных кристаллографических позициях на подложке, то же относится и к адатомам B . Включив взаимодействие t (энергию перехода) между p_z -орбиталями ближайших атомов A и B и используя уравнения Дайсона [17,18], получим диагональные функции Грина $G^{AA(BB)}$

взаимодействующих между собой адатомов A и B

$$G^{AA(BB)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{\Omega_{b(a)} + i\Gamma_{b(a)}(\omega)}{(\Omega_a + i\Gamma_a(\omega))(\Omega_b + i\Gamma_b(\omega)) - t^2 f^2(\mathbf{k})}, \quad (2)$$

где

$$f(\mathbf{k}) = \sqrt{3 + 2 \cos(k_x a \sqrt{3}) + 4 \cos(k_x a \sqrt{3}/2) \cos(3k_y a/2)},$$

a — расстояние между ближайшими соседями, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор для движения электрона в плоскости листа. Электронный спектр системы определяется из уравнения $\Omega_a \Omega_b = t^2 f^2(\mathbf{k})$, что дает

$$E_{\pm}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega) \pm R(\omega, \mathbf{k}),$$

$$R(\omega, \mathbf{k}) = \sqrt{\Delta^2(\omega) + t^2 f^2(\mathbf{k})}, \quad (3)$$

где среднее значение энергии $\varepsilon(\omega) = (\tilde{\varepsilon}_a + \tilde{\varepsilon}_b)/2$, а полуширина щели $\Delta(\omega) = (\tilde{\varepsilon}_a - \tilde{\varepsilon}_b)/2$, знак минус отвечает валентной π -зоне, знак плюс — π^* -зоне проводимости. Отметим, что $\Omega_{a(b)} = \omega - \varepsilon(\omega) \mp \Delta(\omega)$.

Плотность состояний эпитаксиальных ГПС в расчете на атом равна

$$\rho_{AB}(\omega) = \rho_A(\omega) + \rho_B(\omega),$$

$$\rho_{A(B)}(\omega) = -\frac{1}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} G^{AA(BB)}(\omega, \mathbf{k}). \quad (4)$$

В низкоэнергетическом приближении $f(\mathbf{k}) \approx (3a/2)|\mathbf{q}|$, где $\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}$ и волновой вектор точки Дирака $\mathbf{K} = a^{-1}(2\pi/3\sqrt{3}, 2\pi/3)$ [19]. Тогда можно показать [16], что плотность состояний эпитаксиального ГПС имеет вид

$$\tilde{\rho}_{AB}(\omega) = \frac{1}{\pi\sqrt{3}t} \tilde{I}(\omega), \quad (5)$$

$$\tilde{I}(\omega) = \frac{\Gamma_a(\omega) + \Gamma_b(\omega)}{4\pi t} \ln \frac{|\xi^4 + \tilde{b}\xi^2 + \tilde{c}|}{\tilde{c}}$$

$$+ \frac{\Gamma_a(\omega)\Omega_b^2 + \Gamma_b(\omega)\Omega_a^2 + [\Gamma_a(\omega) + \Gamma_b(\omega)]\Omega_a\Omega_b}{2\pi t C(\omega)}$$

$$\times \left(\arctg \frac{2\xi^2 + \tilde{b}}{2C(\omega)} - \arctg \frac{\tilde{b}}{2C(\omega)} \right) \quad (6)$$

где

$$\tilde{b} = 2[\Gamma_a(\omega)\Gamma_b(\omega) - \Omega_a\Omega_b],$$

$$\tilde{c} = \Omega_a^2\Omega_b^2 + \Gamma_a^2(\omega)\Gamma_b^2(\omega) + \Gamma_a^2(\omega)\Omega_b^2 + \Gamma_b^2(\omega)\Omega_a^2,$$

$$C(\omega) = \Gamma_a(\omega)\Omega_b + \Gamma_b(\omega)\Omega_a,$$

$$\xi = t\sqrt{2\pi\sqrt{3}}$$

— энергия обрезания (см. подробнее [16]). Отметим, что плотность состояний свободного ГПС есть

$$\rho_{AB}^0(\Omega) = \begin{cases} \frac{I_0(\Omega)}{\pi\sqrt{3}t}, & \Delta \leq |\Omega| \leq R, \\ 0, & |\Omega| < \Delta, \quad |\Omega| > R, \end{cases} \quad (7)$$

где $I_0(\Omega) = |\Omega|/t$, $\Omega = \omega - \varepsilon$, $\varepsilon = (\varepsilon_a + \varepsilon_b)/2$, $\Delta = |\varepsilon_a - \varepsilon_b|/2$, $R = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$ [16].

Для дальнейшего анализа необходимо задать плотность состояний подложки $\rho_{\text{sub}}(\omega)$. В качестве $\rho_{\text{sub}}(\omega)$ для полупроводниковой подложки выберем модель, использованную в работе [20], но в приближении бесконечно широких зоны проводимости и валентной зоны [21]

$$\rho_{\text{sub}}(\omega) = \begin{cases} A\sqrt{-\omega - E_g/2}, & \omega < -E_g/2; \\ A\sqrt{\omega - E_g/2}, & \omega > E_g/2; \\ 0, & |\omega| \leq E_g/2, \end{cases} \quad (8)$$

где A — коэффициент с размерностью $eV^{-3/2}$, нуль энергии помещен в центр запрещенной зоны подложки. Тогда функции уширения $\Gamma_{a(b)}(\omega) = \pi V_{a(b)}^2 \rho_{\text{sub}}(\omega)$, а функция сдвига $\Lambda_{a(b)}(\omega) = AV_{a(b)}^2 \bar{\Lambda}(\omega)$, где

$$\bar{\Lambda}(\omega) = \begin{cases} F_-(\omega), & \omega < -E_g/2, \\ F_-(\omega) - F_+(\omega), & -E_g/2 \leq \omega \leq E_g/2, \\ -F_+(\omega), & \omega > E_g/2 \end{cases} \quad (9)$$

и $F_{\pm} = \pi\sqrt{\pm\omega + E_g/2}$. Вид функции $\bar{\Lambda}(\omega)$ приведен в работе [20].

3. Плоские эпитаксиальные слои

Согласно методу связывающих орбиталей (МСО) [22–24], входящие в выражения для $\Gamma_{a(b)}$ и $\Lambda_{a(b)}$ матричные элементы $V_{a(b)} = \eta^{a(b)}(\hbar^2/m_0 d_{a(b)}^2)$, где множитель $\eta^{a(b)}$ задается атомными орбиталями, определяющими σ -связь адатома с подложкой, d_a и d_b — расстояниями между адатомами A и B и поверхностью подложки. В случае адатомов в σ -связи участвуют p_z -орбитали, в случае подложки — sp^3 -орбитали, так что $\eta^a = \eta^b$. Полагая для плоских слоев $d_a = d_b = d$, получаем $V_a = V_b = V$, откуда следует $\Gamma_a(\omega) = \Gamma_b(\omega) = \Gamma(\omega)$, $\Lambda_a(\omega) = \Lambda_b(\omega) = \Lambda(\omega)$. Из (3) получаем $E_{\pm}(\omega, \mathbf{k}) = \varepsilon(\omega) \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 f^2(\mathbf{k})}$, где $\varepsilon(\omega) = \varepsilon + \Lambda(\omega)$, так что зоны эпитаксиальных ГПС отличаются от зон свободных ГПС ($V = \Lambda(\omega) = 0$) только сдвигом $\Lambda(\omega)$, тогда как ширина щели по-прежнему равна $2\Delta = |\varepsilon_p^A - \varepsilon_p^B|$, где $\varepsilon_p^{A(B)}$ — энергия p -состояния атома $A(B)$. Тогда вместо (6) получим

$$I(\tilde{\Omega}) = \frac{\Gamma(\omega)}{2\pi t} \ln \frac{|\xi^4 + b\xi^2 + c|}{c}$$

$$+ \frac{\tilde{\Omega}}{\pi t} \left(\arctg \frac{2\xi^2 + b}{4\Gamma(\omega)\tilde{\Omega}} - \arctg \frac{b}{4\Gamma(\omega)\tilde{\Omega}} \right), \quad (10)$$

где $b = -2[\tilde{\Omega}^2 - \Delta^2 - \Gamma^2(\omega)]$, $c = (\tilde{\Omega}^2 - \Delta^2)^2 + \Gamma^2(\omega) \times [\Gamma^2(\omega) + 2\Delta^2 + 2\tilde{\Omega}^2]$, $\tilde{\Omega} = \omega - \varepsilon(\omega)$.

На рис. 1 представлены основные возможные варианты взаимного расположения энергетических зон моно-слоя ГПС и полупроводниковой подложки в отсутствие

взаимодействия между ними ($V = 0, \Lambda(\omega) = 0$). Если рассматривать эти диаграммы как аналоги гетеропереходов, то случаи *a* и *b* отвечают охватывающим (straddling) переходам типа I; случай *c* — ступенчатому (staggered) переходу типа II; случай *d* — разорванному (broken) переходу типа III [25]. Включим теперь взаимодействие V и рассмотрим плотности состояний эпитаксиальных ГПС. При этом главная задача состоит в том, чтобы установить, как влияет взаимодействие на диаграммы, изображенные на рис. 1.

В дальнейшем нас будут интересовать области энергии, близкие к щели ГПС и запрещенной зоне субстрата. В последнем случае, т.е. в области энергий $|\omega| \leq E_g/2$, функция $\Gamma(\omega)$ тождественно обращается в нуль, так что первое слагаемое в выражении (10) исчезает. Исчезает и второе слагаемое, если числители аргументов арктангенсов имеют один и тот же знак, т.е. удовлетворяют неравенству $b(2\xi^2 + b) > 0$. При этом плотность состояний эпитаксиального ГПС равна нулю. Приведенное неравенство удовлетворяется в случае $|\tilde{\Omega}| < \Delta, |\tilde{\Omega}| > R$, где $\tilde{\Omega} = \omega - \varepsilon - \pi AV^2(\sqrt{-\omega + E_g/2} - \sqrt{\omega + E_g/2})$ и $R = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}$. В области энергий, отвечающих неравенству

$$\Delta \leq |\tilde{\Omega}| \leq R, \tag{11}$$

плотность состояний (10) совпадает с выражением (7) при замене в нем Ω на $\tilde{\Omega}$.

Для дальнейшего анализа удобно перейти к безразмерным величинам, приняв за единицу энергию перехода t и положив: $x = \omega/t, X = \tilde{\Omega}/t = x - e - \lambda$,

$e = \varepsilon/t, e_g = E_g/t, \gamma = \Gamma/t, \lambda = \Lambda/t, \delta = \Delta/t, r = R/t = \sqrt{2\pi\sqrt{3} + \delta^2}$, выражения для функций $\gamma(x)$ и $\lambda(x)$ приведены в Приложении, п. 1. Там же показано, что константа связи слоя ГПС–6H-SiC-подложка есть $C = \pi AV^2/\sqrt{t} \sim v^2$, где $v = V/t$. Таким образом, сильной связи слой–подложка отвечает неравенство $C \gg 1$, слабой — неравенство $C \ll 1$. Отметим, что в приведенном виде выражение (10) для $I(\tilde{\Omega})$ в интервале $|x| \leq e_g/2$ переходит в $|X|$, так что условие (11) сводится к неравенству

$$\delta \leq |x - eC(\sqrt{-x + e_g/2} - \sqrt{x + e_g/2})| \leq r. \tag{12}$$

На рис. 2 и 3 представлены приведенные плотности состояний $I(x)$. Мы положили $e_g = 2$, что для среднего значения энергии перехода $t \sim 1.5$ eV [16] соответствует запрещенной зоне 6H-SiC, и рассмотрели случаи $\delta = 1.5$ ($2\delta > e_g$) и $\delta = 0.5$ ($2\delta < e_g$). Константы связи $C = 0.2, 1, 5$ моделируют режимы слабого, промежуточного и сильного взаимодействий слой–подложка. Значения $e = 0, -0.6, -1.4$ выбраны таким образом, чтобы в отсутствие взаимодействия соответствовать диаграммам, изображенным на рис. 1.

Начнем обсуждение полученных результатов с области $|x| \leq e_g/2$, где приведенная плотность состояний $I(x) = |X|$. Графический способ решения неравенства (12), продемонстрированный на рис. 4, состоит в том, что точки пересечения модуля функции $X(x)$ с прямыми δ (точки $\mp x_\delta$) и r (точки $\mp x_r$) определяют границы щелей в области $|x| \leq e_g/2$. Полагая $C = C' + c'$, где $C' \gg c'$ и $x_\delta = -\bar{x}_\delta + e_g/2$, где $\bar{x}_\delta \ll e_g/2$, получим $\bar{x}_\delta \approx c'\sqrt{e_g}$. Таким образом, начальное сужение области запрещенных состояний линейно по константе взаимодействия.

Для случая $e = 0$ (рис. 4, *a*) легко показать, что отличная от нуля плотность состояний в области запрещенной зоны подложки возникает при условии

$$C \geq C' = \frac{\delta - e_g/2}{\sqrt{e_g}}. \tag{13}$$

Для случая $2\delta > e_g$, изображенного на рис. 2, *a*, $C' = 1/2\sqrt{2}$. Поэтому при $C = 0.2 < C'$ область запрещенной зоны подложки остается неизменной. С ростом константы связи C тангенс угла наклона функции $|X|$ возрастает (см. Приложение, п. 1), и при $C = 1 > C'$ „плотность состояний ГПС“ своими внутренними границами (потолок валентной зоны и дно зоны проводимости) выдвигается в запрещенную зону подложки¹. В результате ширина запрещенной зоны системы сужается. В общем случае при $C > C'$ щель в плотности состояний эпитаксиального ГПС имеет координаты $(-x_\delta, x_\delta)$.

¹ Следует подчеркнуть, что говорить в данном случае о плотности состояний ГПС можно лишь условно, причем исключительно в целях упрощения интерпретации изменения плотности состояний с ростом константы связи. Отметим также, что при $C = C'$ внутренние границы плотности состояний ГПС совпадают с границами запрещенной зоны подложки. Или, другими словами, ширина щели эпитаксиального слоя совпадает с шириной запрещенной зоны подложки.

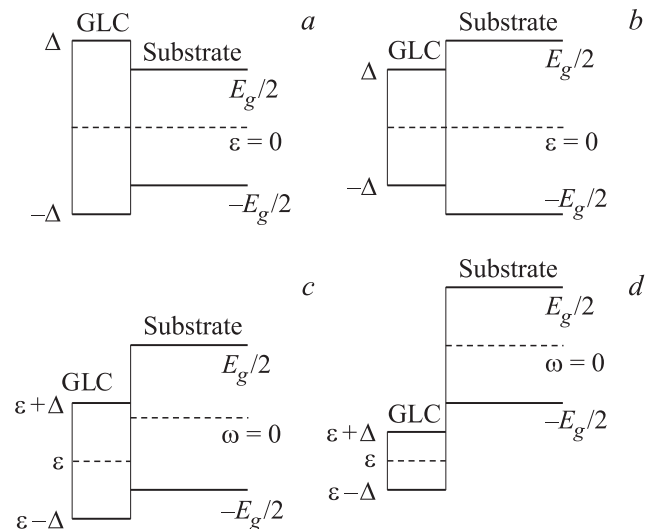


Рис. 1. Характерные случаи взаимного расположения энергетических зон для слоя ГПС (GLC) с шириной щели 2Δ и полупроводниковой подложки с шириной запрещенной зоны E_g в отсутствии взаимодействия между ними. Сплошными горизонтальными линиями обозначены потолок валентной зоны и дно зоны проводимости, штриховыми линиями — центр щели ε и центр запрещенной зоны, принятый за нуль энергии. *a* и *b* — охватывающие переходы (тип I), *c* — ступенчатый переход (тип II), *d* — разорванный переход (тип III).

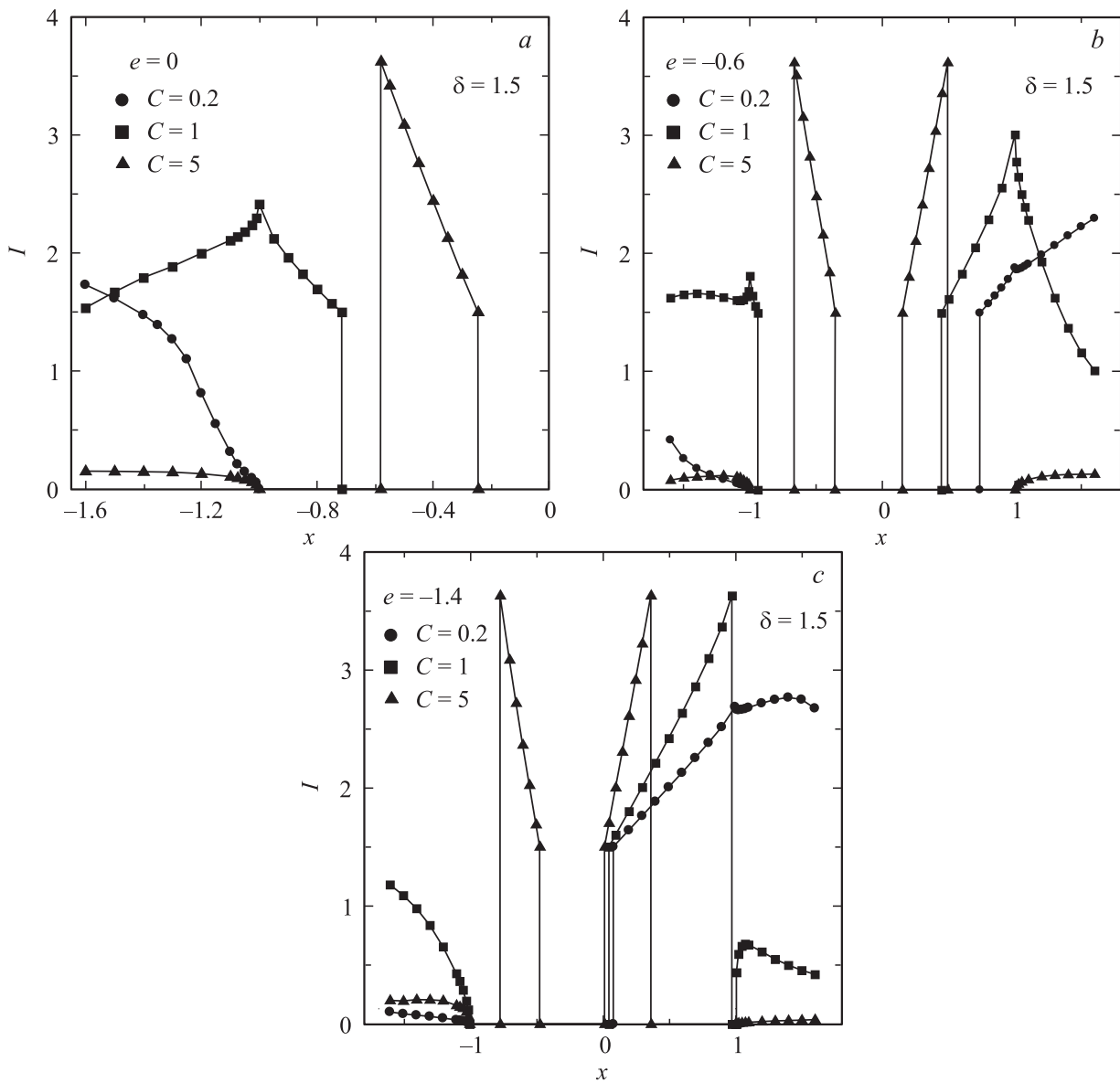


Рис. 2. Безразмерная плотность состояний $I(x)$ для $\delta = 1.5$ при $e = 0$ (a), -0.6 (b), -1.4 (c) и $C = 0.2$ (кружки), 1 (квадраты), 5 (треугольники). Для симметричного случая $e = 0$ приведена только левая половина рисунка.

При достижении константой связи C значения

$$C'' = \frac{r - e_g/2}{\sqrt{e_g}}, \quad (14)$$

внешние границы плотности состояний ГПС (дно валентной зоны и потолок зоны проводимости) совпадают с соответствующими границами запрещенной зоны подложки. Дальнейший рост C приводит к ситуации, изображенной на рис. 2, a для $C = 5 > C'' = (\sqrt{2\pi\sqrt{3} + 2.25} - 1)/\sqrt{2}$: вся „плотность состояний ГПС“ располагается внутри запрещенной зоны. В общем случае при $C > C''$ в области запрещенной зоны подложки имеются три щели: центральная с координатами $(-x_\delta, x_\delta)$ и две боковые $(-e_g/2, -x_r)$ и $(x_r, e_g/2)$. Полагая $x_\delta \ll 1$, получим $x_\delta \approx \delta/(1+C)$, так что с

увеличением константы взаимодействия встроенная в запрещенную зону подложки „плотность состояний ГПС“ смещается в область низких энергий.

Перейдем теперь к случаю, когда по-прежнему $e = 0$, но $2\delta < e_g$, так что неравенство (13) всегда выполняется (рис. 3, a). При $C = 0$ границы центральной щели $(-x_\delta, x_\delta)$ совпадают с потолком валентной зоны и дном зоны проводимости свободного ГПС, т.е. с координатами $(-\delta, \delta)$. В случае $C \ll 1$, положив $x_\delta = \delta - \bar{x}_\delta$, где $\bar{x}_\delta \ll \delta$, получим $\bar{x}_\delta = C(\sqrt{\delta + e_g/2} - \sqrt{-\delta + e_g/2})$, т.е. линейное по константе взаимодействия сужение запрещенной зоны. Дальнейшее увеличение C ведет к продвижению границ $(-x_\delta, x_\delta)$ в область малых энергий (рис. 2, a при $C = 0.2$ и $C = 1$). При $C = C'' = (\sqrt{2\pi\sqrt{3} + 0.25} - 1)/\sqrt{2}$, ко-

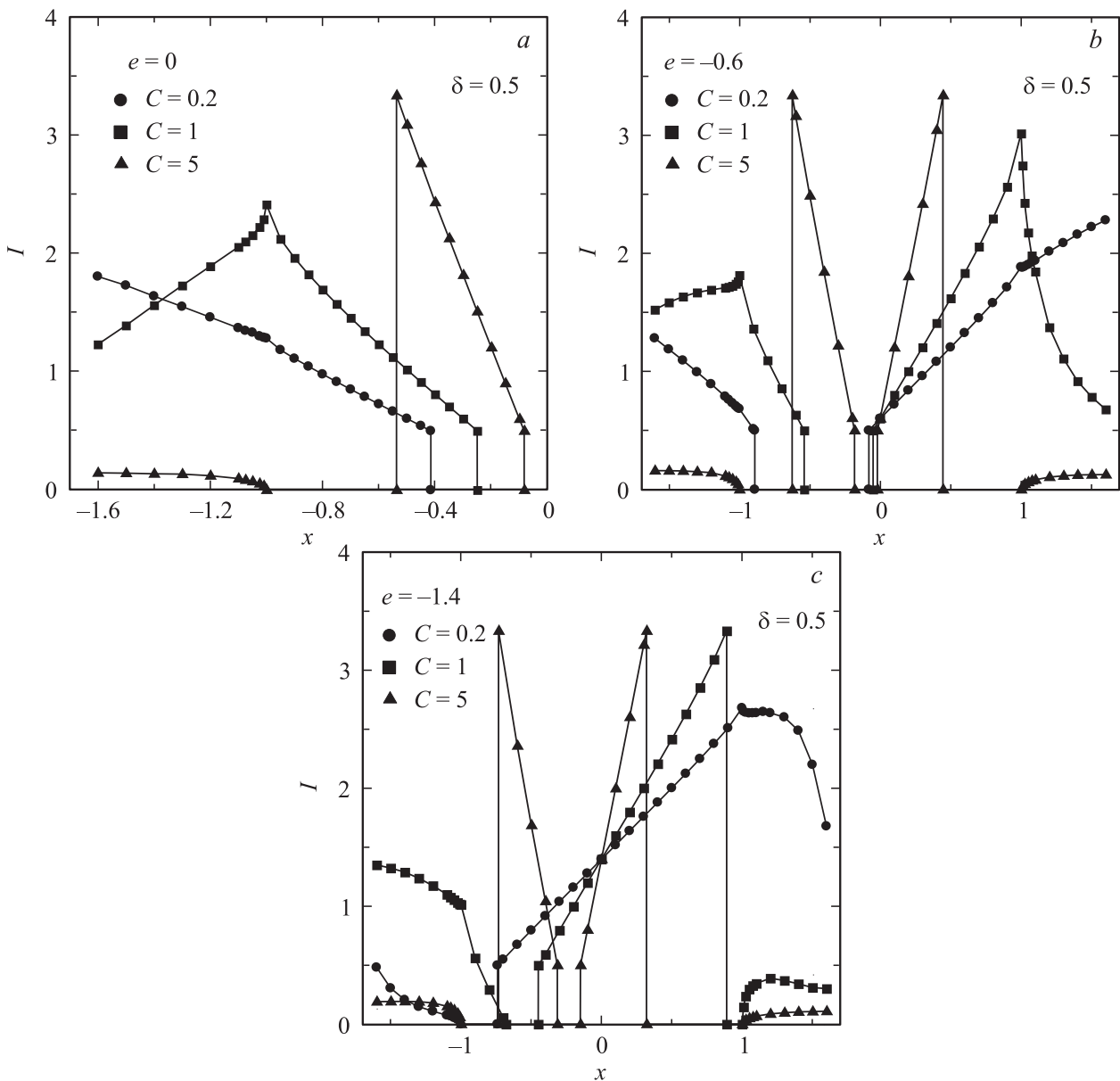


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но для $\delta = 0.5$.

ординаты $(-x_r, x_r)$, определяющие дно валентной зоны и зоны проводимости „плотности состояний ГПС“, совпадают с границами запрещенной зоны подложки $(-e_g/2, -e_g/2)$. При $C = 5 > C''$ „плотность состояний ГПС“ располагается внутри запрещенной зоны подложки, содержащей три щели, как и в случае $2\delta > e_g$ (рис. 2,а).

Рассмотрим теперь случай $e \neq 0$ (рис. 2 и 3, b и c). Воспользовавшись рис. 4, b и c, легко показать, что вместо условий (13) и (14) теперь получаем

$$C \geq C'_\pm = \frac{\delta \pm e - e_g/2}{\sqrt{e_g}}, \quad C''_\pm = \frac{r \pm e - e_g/2}{\sqrt{e_g}}, \quad (15)$$

где знак плюс относится к положительной области энергий, а минус — к отрицательной. При $e < 0$ име-

ем $C'_+ < C'_-$, $C''_+ < C''_-$. Следствием последних неравенств является начинающееся при меньших константах связи (и поэтому более значительное) продвижение „плотности состояний ГПС“ от дна зоны проводимости подложки в область ее запрещенной зоны (рис. 2 и 3, b и c). Отсюда для координат $(-x_{\delta-}, x_{\delta+})$ и $(-x_{r-}, x_{r+})$ имеем $x_{\delta+} < x_{\delta-}$ и $x_{r+} < x_{r-}$.

Отметим, что ширины W плотностей состояний эпитаксиальных слоев ГПС, смещенных в область запрещенной зоны подложки (рис. 2 и 3 для $C = 5$), гораздо уже соответствующих значений W_0 для свободных ГПС. Действительно, при $\delta = 1.5$ имеем в относительных единицах $W_0 = r - \delta \approx 2.12$, при $\delta = 0.5 - W_0 \approx 2.84$.

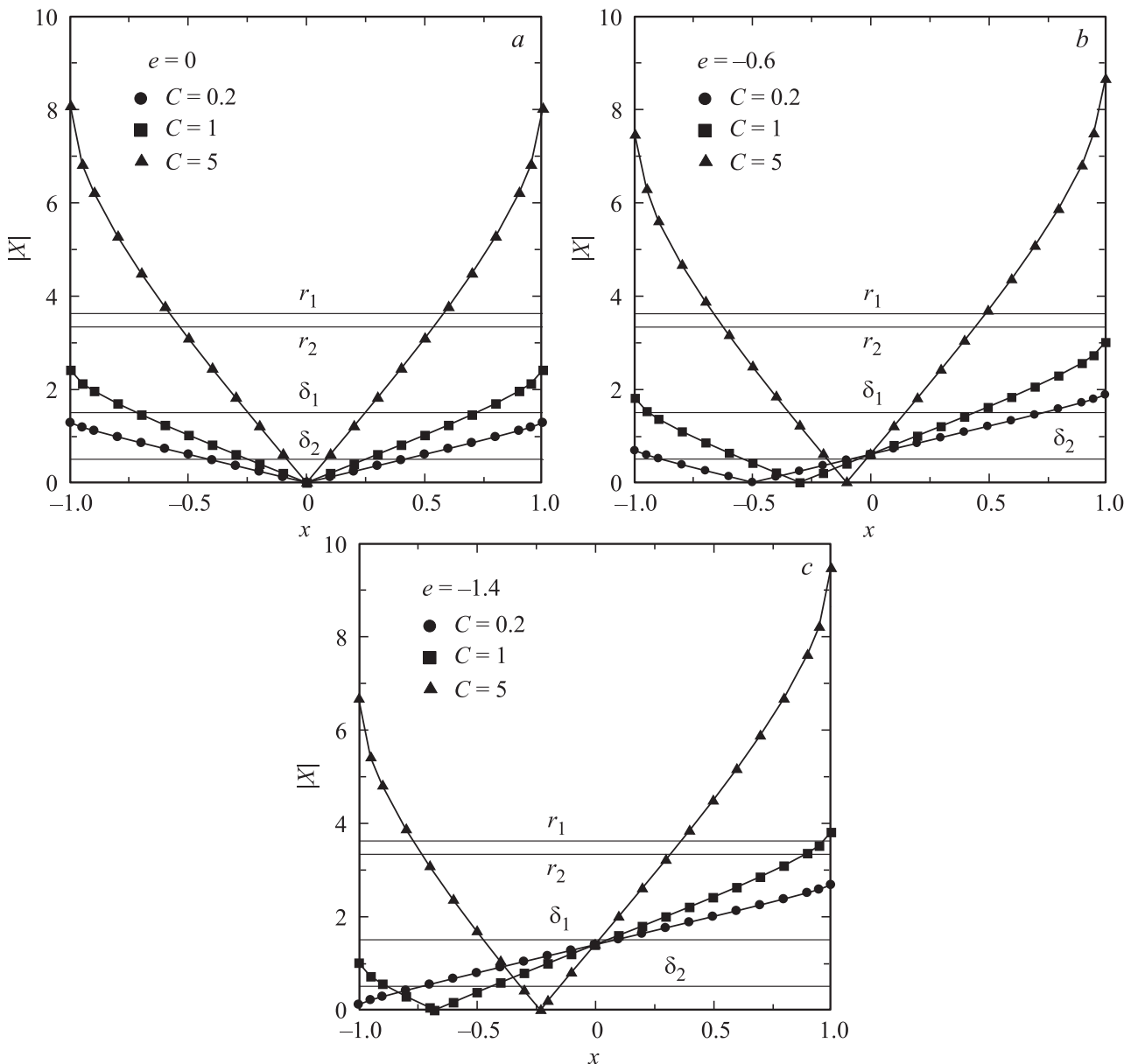


Рис. 4. К решению неравенства (12). Тонкие прямые линии соответствуют значениям $r_{1,2} = \sqrt{\xi^2 + \delta_{1,2}^2}$, $\delta_1 = 1.5$, $\delta_2 = 0.5$. Остальные обозначения те же, что и на рис. 2.

Рис. 2 и 3 отвечают зонным диаграммам, изображенным на рис. 1, *a, b, c*. Для иллюстрации случая, изображенного на рис. 1, *d*, необходимо и достаточно положить $(-e) > r + C\sqrt{e_g} + e_g/2$. При этом $|X| > r$, так что запрещенная зона подложки пуста.

Особенности плотности состояний эпитаксиального ГПС в области разрешенных состояний вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны субстрата рассмотрены в Приложении, п. 2, где дано объяснение зависимостям, представленным на рис. 2 и 3.

Отметим, что все приведенные на рис. 2–4 зависимости симметричны относительно одновременной замены x на $-x$ и e на $-e$.

4. Измятые эпитаксиальные слои

Перейдем теперь к измятым эпитаксиальным слоям соединений $A_N B_{8-N}$.

Пусть, аналогично [16], $\Gamma_a = \Gamma$, $\Gamma_b = \vartheta\Gamma$ и $\Lambda_a = \Lambda$, $\Lambda_b = \vartheta\Lambda$, где ϑ — фактор измятости. Так как $\Gamma_{a(b)}$ и $\Lambda_{a(b)}$ пропорциональны $V_{a(b)}^2$ и $V_{a(b)} \propto d_{a(b)}^{-2}$, неравенство $\vartheta < 1$ ($\vartheta > 1$) означает, что адатом B более (менее) удален от поверхности, чем адатом A . Отметим, что в рамках принятой модели с тем же основанием можно считать, что двумерный слой плоский, а „измята“ поверхность подложки, как это, например, имеет место для ионных кристаллов [25].

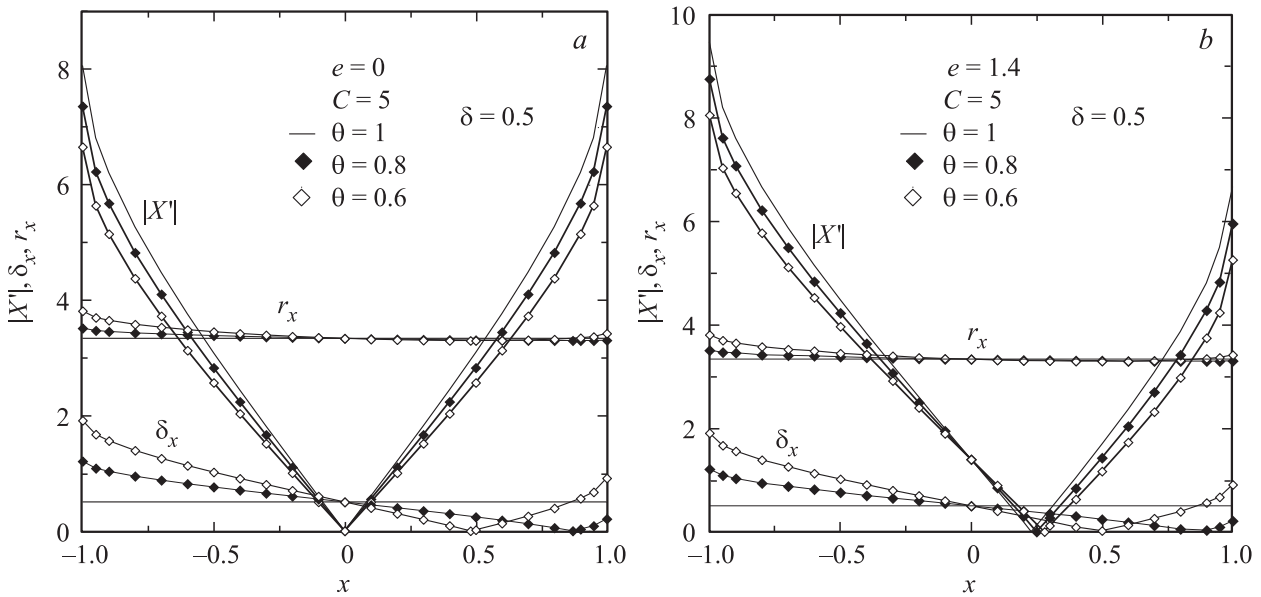


Рис. 5. К решению неравенства (17) для $C = 5, \delta = 0.5, e = 0$ (a) и $e = 1.4$ (b). Тонкие линии отвечают гладкой структуре ($\vartheta = 1$), темные ромбы — $\vartheta = 0.8$, светлые ромбы — $\vartheta = 0.6$; $\delta_x = \hat{\Delta}/t, r_x = \hat{R}/t$.

С учетом измятости плотность состояний ГПС имеет вид

$$\rho'_{AB}(\hat{\Omega}) = \frac{1}{\pi\sqrt{3}t} I'(\hat{\Omega}),$$

$$I'(\hat{\Omega}) = \frac{\Gamma(\omega)(1 + \vartheta)}{4\pi t} \ln \frac{|\xi^4 + b'\xi^2 + c'|}{c'}$$

$$+ \frac{\hat{\Omega}}{\pi t} \left(\text{arctg} \frac{2\xi^2 + b'}{2\Gamma(\omega)[(1 + \vartheta)\hat{\Omega} + (1 - \vartheta)\hat{\Delta}]} - \text{arctg} \frac{b'}{2\Gamma(\omega)[(1 + \vartheta)\hat{\Omega} + (1 - \vartheta)\hat{\Delta}]} \right), \quad (16)$$

где

$$c' = (\hat{\Omega}^2 - \hat{\Delta}^2)^2 + \vartheta^2\Gamma^4(\omega) + \Gamma^2(\omega)[(1 + \vartheta^2)\hat{\Omega}^2 + (1 + \vartheta^2)\hat{\Delta}^2 + 2(1 - \vartheta)\hat{\Omega}\hat{\Delta}],$$

$$b' = 2(\vartheta\Gamma^2 + \hat{\Delta}^2 - \hat{\Omega}^2), \quad 2\hat{\Delta} = |2\Delta + (1 - \vartheta)\Lambda(\omega)|,$$

$$\hat{\Omega} = \omega - \varepsilon - ((1 + \vartheta)/2)\Lambda(\omega).$$

$$\Lambda(\omega) = \pi AV^2(\sqrt{-\omega + E_g/2} - \sqrt{\omega + E_g/2}).$$

Условие существования конечной плотности состояний измятых слоев ГПС в области запрещенной зоны подложки, аналогичное неравенству (11) для плоских слоев, имеет вид $\hat{\Delta} \leq |\hat{\Omega}| \leq \hat{R}$, где $\hat{R} = \sqrt{\xi^2 + \hat{\Delta}^2}$. Полагая $1 - \vartheta = 2\alpha \ll 1$ и $\alpha C \ll \delta_x$, в безразмерном виде получим

$$\delta_x^2 \leq X^2 + 2\alpha\lambda(X - \lambda) \leq r_x^2, \quad (17)$$

где, как и выше, $X = x - e - \lambda$ (плоский слой) и $\delta_x = \hat{\Delta}/t, r_x = \hat{R}/t$. При $e = 0$ произведение $\lambda(X - \lambda) < 0$, так что $|X'| < |X|$, где $X' = x - e - ((1 + \vartheta)/2)\lambda(x)$ (измятый слой). Такой результат

усиливает вероятность выполнения правого неравенства и ослабляет таковую для левого. По аналогии со случаем, представленным на рис. 4,а, приходим к следующим выводам. В режиме слабой связи $C \ll 1$, когда для плоского слоя ГПС в запрещенной зоне подложки какие-либо состояния отсутствуют (примером может служить случай $C = 0.2, \delta = \delta_1$ на рис. 4,а), такие состояния отсутствуют и для измятого слоя. С увеличением C в областях $|x| \sim 1$, близких к краям запрещенной зоны, возможен случай, когда для плоского слоя возникают решения $\delta_1 < |X|$ (пример — случай на рис. 4,а), а для измятого листа по-прежнему имеем $|X'| < \delta_1$. При этом для плоского слоя область запрещенных состояний сужается (рис. 3,а), а для измятого слоя остается неизменной. В режиме сильной связи $C \gg 1$, когда оба условия (17) выполняются как для плоского, так и для измятого слоя (пример — рис. 4,а для $C = 5$), ширина зон разрешенных состояний для плоского слоя уже, чем для измятого. Легко также представить ситуацию, когда по мере возрастания C для измятого слоя ГПС правое неравенство (17) еще выполняется, а для плоского слоя уже не справедливо. Это означает, что в первом случае в плотности состояний имеется только центральная щель, тогда как во втором к ней добавляются две боковые щели, примыкающие к границам разрешенных зон (рис. 3,а).

В случаях, когда условие $\alpha C \ll \delta_x$ не выполняется, ситуация усложняется, хотя $|X'| < |X|$ по-прежнему (рис. 5). Во-первых, для измятых слоев ГПС симметрия плотности состояний относительно изменения знака x нарушается вследствие асимметрии δ_x и r_x . Во-вторых, в режиме сильной связи узкозонного слоя с подложкой зависимости δ_x и r_x от ϑ существенно нелинейны.

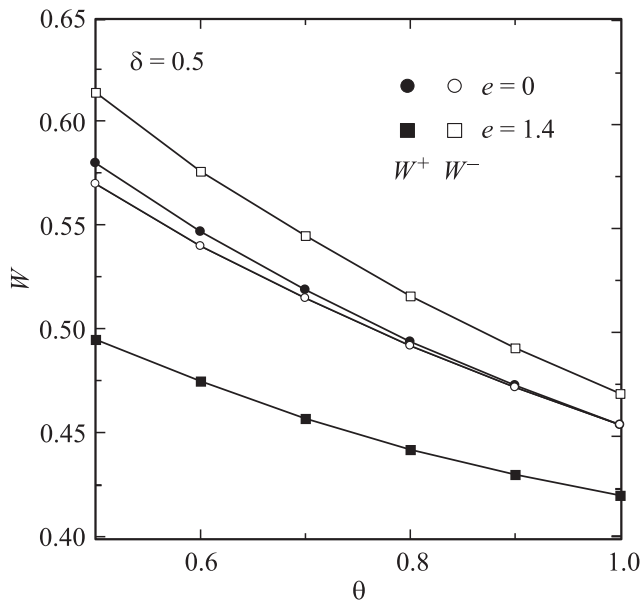


Рис. 6. Зависимость ширин зон проводимости W_+ и валентной зоны W_- эпитаксиального слоя от фактора измятости ϑ для $e = 0$ (темные и светлые кружки) и $e = 1.4$ (темные и светлые квадраты).

Расчеты для случая $C = 5, \delta = 0.5$ показывают (рис. 6), что с увеличением измятости (уменьшением ϑ) зоны разрешенных состояний, расположенных внутри запрещенной зоны подложки, расширяются, а щели соответственно сужаются. При $e = 0$ различие ширин валентной зоны W_- и зоны проводимости W_+ малы, тогда как при $e = 1.4$ разница существенна. Различаются и величины сдвигов зон, отвечающие уменьшению фактора ϑ от 1 до 0.5: при $e = 0$ дно зоны проводимости почти не смещается, оставаясь в точке $r_{\delta+} \approx 0.083$, в то время как потолок валентной зоны сдвигается от $r_{\delta-} \approx -0.091$ до $r_{\delta-} \approx -0.142$; при $e = 1.4$ дно зоны проводимости смещается от $r_{\delta+} \approx 0.313$ до $r_{\delta+} \approx 0.394$, потолок валентной зоны сдвигается от $r_{\delta-} \approx 0.150$ до $r_{\delta-} \approx 0.189$. В первом случае ширина центральной щели увеличивается от 0.174 до 0.225, во втором — от 0.163 до 0.205. Таким образом, учет измятости может приводить к качественным изменениям плотности состояний эпитаксиального слоя ГПС в области запрещенной зоны подложки. Отметим, что и в данном случае ширины плотности состояний эпитаксиальных слоев значительно меньше, чем слоев свободных.

Обсудим теперь особенности плотности состояний измятого листа ГПС в областях энергий вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны субстрата. Положив $x = \pm(e_g/2) \pm v$ ($v \ll e_g$), по аналогии с плоскими слоями для режима сильной связи $C \gg 1$ получим $I'(v) \propto (1 + \vartheta)\sqrt{v}$. Режим слабой связи $C \ll 1$ рассмотрен в Приложении, п. 3. Анализ показывает, что учет измятости приводит только к количественным отличиям от плоского случая.

До сих пор мы считали, что измятость влияет только на матричные элементы связи слой–подложка $V_{a(b)}$. В теории адсорбции, однако, учитывается, что уровень адатома $\epsilon_{a(b)}$ испытывает кулоновский сдвиг $V_{im}^{a(b)} = e_0^2/4d_{a(b)}^2$, где e_0 — заряд электрона [18]. Отсюда следует, что разность сдвигов равна $V_{im}^a - V_{im}^b = V_{im}^a(1 - \sqrt[4]{\vartheta})$. Теперь ширина щели определяется выражением $2\Delta + V_{im}^a(1 - \sqrt[4]{\vartheta})$. В принципе, рассмотренная поправка сравнительно мала: при $d_a = 2 \text{ \AA}$ и $\vartheta = 0.8$ получаем $V_{im}^a(1 - \sqrt[4]{\vartheta}) \approx 0.1 \text{ eV}$. Однако в случае графена (и других бесщелевых в свободном состоянии ГПС) такая поправка приводит к качественным изменениям — появлению наведенной подложкой щели.

5. Оценки перераспределения заряда

Будем считать, что субстрат и ГПС в свободном состоянии являются собственными полупроводниками. В случае, когда середина щели ГПС совпадает с серединой запрещенной зоны субстрата, через которую проходит уровень Ферми E_F , переход заряда между подложкой и эпитаксиальным слоем отсутствует. Возможно, однако, перераспределение электронов между различными областями разрешенных состояний эпитаксиального слоя ГПС.

При нулевой температуре среднее число заполнения n_{AB} на один атом в слое есть

$$n_{AB} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{AB}(\omega) d\omega = \frac{1}{\pi\sqrt{3}} \int_{-\infty}^{\infty} I(x) dx, \quad (18)$$

где $e_F = E_F/t$ — приведенный уровень Ферми, который в соответствии с предположением равен нулю.

Рассмотрим числа заполнения плоских слоев для случаев, представленных на рис. 2, а и 3, а. В режимах слабой ($C = 0.2$) и промежуточной ($C = 1$) связи $I(x)$ отличается от нуля в интервале от $-\infty$ до $e_V = E_V/t$, где E_V — энергия потолка валентной зоны ГПС (см. сноску 1). Интегрирование (18) в этих пределах дает $n_{AB} = n_{val} = 1$, где n_{val} — вклад в число заполнения от области энергий, соответствующей валентной зоне эпитаксиального слоя. В режиме сильной связи ($C = 5$) число заполнения $n_{AB} = n_{val} + n_{gap}$, где n_{gap} — вклад в число заполнения от ненулевой плотности состояний в области нижней половины щели. Расчет значений n_{gap} по формуле (18) приведен в Приложении, п. 4. Для случаев, изображенных на рис. 2, а и 3, а для $C = 5$ вклад $n_{gap} \approx 0.15$. Удобно, однако, использовать аппроксимацию, основанную на практически линейной зависимости $|X|$ от x (рис. 2 и 3). Тогда для случая,

² Это сдвиг вызван силами изображения электрона адсорбируемого атома в подложке. Для простоты мы опускаем здесь множитель $(\epsilon_S - 1)/(\epsilon_S + 1)$, где ϵ_S — статическая диэлектрическая проницаемость подложки. Не учитываем также возможное электростатическое поле, создаваемое несущими некоторый заряд поверхностными атомами подложки.

когда плотность состояний лежит в области $x^{**} < e_F$, вместо (П12), (П13) можно записать

$$J \approx \frac{r + \delta}{2} (x^{**} - x^*). \quad (19)$$

Если уровень Ферми лежит в интервале $x^* < e_F < x^{**}$ (частично заполненная полоса), то в формулу (19) вместо x^{**} нужно ввести e_F . Для случаев, представленных на рис. 2, *a* и 3, *a* для $C = 5$, формула (19) дает $n_{\text{gap}} \approx 0.16$.

Воспользовавшись оценкой (19), вычислим значения n_{gap} для случаев $e \neq 0$ и $C = 5$ (рис. 2 и 3, *b* и *c*), по-прежнему считая, что $e_F = 0$. При $\delta = 1.5$ для полностью заполненных валентных зон ГПС получаем $n_{\text{gap}}^{\text{val}} \approx 0.15$ для $e = -0.6$ и $n_{\text{gap}}^{\text{val}} \approx 0.14$ для $e = -1.4$; при $\delta = 0.5$ имеем $n_{\text{gap}}^{\text{val}} \approx 0.16$ для $e = -0.6$ и $n_{\text{gap}}^{\text{val}} \approx 0.15$ для $e = -1.4$. Для случаев $\delta = 0.5$, $e = -0.6$ и $e = -0.14$ уровень Ферми пересекает зону проводимости. Соответствующие числа заполнения есть $n_{\text{gap}}^{\text{con}} \approx 0.006$ и $n_{\text{gap}}^{\text{con}} \approx 0.053$. Воспользовавшись формулой (18) и аппроксимацией (П9) для вычисления вклада от валентной зоны, получим $n_{\text{val}} \propto C(\xi^2/X_{-0}^2)$.

Дальнейшие упрощения возможны, если выполняется неравенство $\max\{|x_r|, |x_\delta|\} \ll e_g/2$. Тогда для режима сильной связи ($C \gg 1$) получим $J \sim \pi\sqrt{3}/C\sqrt{2e_g}$, так что $n_{\text{gap}} \sim (C\sqrt{2e_g})^{-1}$. При $C = 5$ и $e_g = 2$ имеем $n_{\text{gap}} \sim 0.1$. Это грубая оценка вклада полностью заполненной и расположенной в запрещенной зоне полосы разрешенных состояний в суммарное число заполнения эпитаксиального слоя ГПС. Из этой оценки следует, в частности, что в режиме сильной связи конкретные значения параметров e и δ достаточно слабо влияют на величину n_{gap} .

До сих пор мы рассматривали плоские слои. Для перехода к измятым слоям константу C нужно умножить на $(1 + \vartheta)/2$ (в том числе, и при нахождении значений x^* и x^{**}).

В настоящей работе мы не рассматриваем переход заряда между слоем ГПС и субстратом, так как задавали плотность состояний подложки в виде (8), т.е. в приближении бесконечно широких зон, и пользовались низкоэнергетическим приближением.

Заключение

Итак, главный вывод настоящей работы состоит в том, что достаточно сильное взаимодействие ГПС с полупроводниковой подложкой приводит к сложной электронной структуре системы, которую невозможно описать путем простого наложения энергетических диаграмм ее компонентов (как это сделано на рис. 1). Следовательно, для таких систем нельзя полагаться на простые схемы (правила) построения зонных диаграмм типа Шокли–Андерсона [25]. Такие схемы были разработаны для контакта двух „объемных“ полупроводников, хотя даже в этом случае для описания

интерфейса иногда приходится вводить промежуточный (третий) слой. В случае гетеропереходов, образованных 2D-соединениями с объемными полупроводниками, более адекватными ситуации представляются адсорбционные модели монослойных покрытий (см., например, [18]). Это замечание относится и к ван-дер-ваальсовым вертикальным структурам [26,27], построенным из 2D-слоев.

Мы рассмотрели основные типы гетероструктур, исходя из диаграмм рис. 1 и варьируя константу взаимодействия слой–подложка C . Было показано, что при достижении константой связи C значений C'_\pm и C''_\pm , определяемых формулами (15), вместо одной запрещенной зоны в системе могут возникнуть три области запрещенных состояний, между которыми, естественно, возможны электронные переходы. Это, в принципе, открывает возможность как экспериментальной проверки, так и создания приборов, рабочий диапазон которых определяется не только подбором пары ГПС–полупроводник, но и применяемой технологией гетероэпитаксии, с помощью которой можно существенно изменять величину константы взаимодействия от типичных для ковалентной связи значений (ГПС как буферный слой) до энергий ван-дер-ваальсовой связи (квазисвободное ГПС).

Отметим, что измятость слоев ГПС, обладающих щелью в свободном состоянии, не ведет к каким-либо качественным изменениям электронной структуры системы по сравнению с плоским ГПС. Однако для исходно бесщелевых двумерных структур измятость может приводить к возникновению наведенной подложкой щели. Еще раз подчеркнем, что в рамках используемой нами модели случаи измятый слой–плоская подложка и плоский слой–измятая подложка эквивалентны.

Приложение

1. В приведенном виде функции $\Gamma(\omega)$ и $\Lambda(\omega)$ принимают вид

$$\gamma(x) = C \begin{cases} \sqrt{-x - e_g/2}, & x < -e_g/2, \\ \sqrt{x - e_g/2}, & x > e_g/2, \\ 0, & |x| \leq e_g/2, \end{cases} \quad (\text{П1})$$

$$\lambda(x) = C \begin{cases} \sqrt{-x + e_g/2}, & x < -e_g/2, \\ \sqrt{-x + e_g/2} - \sqrt{x + e_g/2}, & x \leq e_g/2, \\ -\sqrt{x + e_g/2}, & x > e_g/2, \end{cases} \quad (\text{П2})$$

где $C = \pi AV^2/\sqrt{t}$. По оценкам работы [20] для подложки 6H-SiC величина $A \approx 0.2 \text{ eV}^{-3/2}$. Согласно [16], значения t меняются от 0.64 для InSb до 2.28 eV для BN. $C \approx (V/t)^2$. Беря среднее значение $t \approx 1.5 \text{ eV}$, можем записать $C = (\pi At^{3/2})v^2 \sim v^2$, где $v = V/t$.

С учетом (П1) и (П2), легко показать, что $(dX/dx)_{x \rightarrow 0} = 1 + C(2/e_g)^{3/2}$, $(dX/dx)_{|x| > e_g/2} = 1 + C/2 \times (|x| + e_g/2)^{3/2}$.

2. В приведенном виде плотность состояний (10) может быть представлена в виде

$$I(x) = I_1(x) + I_2(x),$$

$$I_1(x) = \frac{\gamma}{2\pi} \ln \frac{\xi^4 + \xi^2 \bar{b} + \bar{c}}{\bar{c}},$$

$$I_2(x) = \frac{|X|}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{2\xi^2 + \bar{b}}{4\gamma|X|} - \operatorname{arctg} \frac{\bar{b}}{4\gamma|X|} \right), \quad (\text{П3})$$

где $\bar{b} = 2(-X^2 + \delta^2 + \gamma^2)$, $\bar{c} = (X^2 - \delta^2)^2 + \gamma^2(\gamma^2 + 2\delta^2 + 2X^2)$, $X = x - e - \lambda(x)$.

Исследуем поведение функции $I(x)$ в областях потолка валентной зоны и дна зоны проводимости, положив $x = \pm(e_g/2) \pm \nu$ ($\nu \ll e_g$), где знак плюс относится к зоне проводимости, а знак минус — к валентной зоне. Тогда $\gamma = C\sqrt{\nu}$ и

$$X_{\pm} \approx -e \pm (C\sqrt{e_g} + e_g/2) \pm \nu(1 + C/2\sqrt{2e_g}). \quad (\text{П4})$$

С точностью до ν получим

$$I_{1\pm}(\nu) = \frac{C\sqrt{\nu}}{\pi} \ln \left| \frac{r^2 - X_{\pm 0}^2}{X_{\pm 0}^2 - \delta^2} \right|, \quad (\text{П5})$$

где $X_{\pm 0}$ есть X_{\pm} при $\nu = 0$ и по-прежнему $r^2 = \xi^2 + \delta^2$. Здесь и ниже мы исключаем комбинации параметров, соответствующие нулям и полюсам аргумента логарифма.

Пусть далее $4\gamma|X| \approx 4C\sqrt{\nu}|x_{\pm 0}| \ll 1$. При $X_{\pm 0}^2 < \delta^2$ или $X_{\pm 0}^2 > r^2$ получаем с точностью до ν

$$I_{2\pm}(\nu) \approx \frac{2C\sqrt{\nu}}{\pi} \frac{\xi^2 X_{\pm 0}^2}{(X_{\pm 0}^2 - \delta^2)(X_{\pm 0}^2 - r^2)}; \quad (\text{П6})$$

при $\delta^2 < X_{\pm 0}^2 < r^2$ имеем

$$I_{2\pm}(\nu) \approx |X_{\pm 0}| - \frac{2C\sqrt{\nu}}{\pi} \frac{\xi^2 X_{\pm 0}^2}{(X_{\pm 0}^2 - \delta^2)(r^2 - X_{\pm 0}^2)}. \quad (\text{П7})$$

При $|X| \gg \max\{\xi, \delta, e_g\}$, т.е. для больших энергий, соответствующих зонам разрешенных состояний, получаем

$$I(x) \approx I_2(x) \approx \frac{2\gamma(x)}{\pi} \frac{\xi^2}{X^2}, \quad (\text{П8})$$

где учтено, что $I_1(x) \sim I_2(x)(\xi/X)^2 \ll I_2(x)$.

Рассмотрим режим слабой связи, взяв в качестве примера случай $e = 0$ и $c = 0.2$ и $X_{\pm 0}^2 \sim (e_g/2)^2 = 1$ (рис. 2, а, 3, а и 4, а). В случае рис. 2, а, когда $X_{\pm 0}^2 < \delta^2$ (рис. 4, а), плотность состояний $I(\nu)$ описывается суммой выражений (П6) и (П7), так что $I(\nu) \propto \sqrt{\nu}$. В случае рис. 3, а, когда $\delta^2 < X_0^2 < r^2$ (рис. 4, а), $I(\nu)$ является суммой выражений (П6) и (П8), так что $I(\nu) \propto A_1\sqrt{\nu} - A_2\nu$, где $A_{1,2}$ — положительные константы.

Перейдем к режиму сильной связи, примером которого является случай $C = 5$ (рис. 2, а и 3, а), когда $X_{\pm 0}^2 > r^2$ (рис. 4, а). Полагая $C \gg 1$ и $X_{\pm 0}^2 \gg r^2$, суммируя (П6) и (П7), получим

$$I_{\pm}(\nu) \approx \frac{2C\sqrt{\nu}}{\pi} \frac{\xi^2}{X_{\pm 0}^2}. \quad (\text{П9})$$

При $e \neq 0$ зеркальная симметрия относительно нулевой энергии нарушается. Например, при $e < 0$ имеем $X_{+0}^2 > X_{-0}^2$, так что из (П9) следует неравенство $I_+(\nu) < I_-(\nu)$, что подтверждается рис. 2, с и 3, с.

Отметим, что для всех значений параметров при $x = \pm e_g/2$ на графиках $I(x)$ наблюдается корневая особенность.

3. Рассмотрим особенности плотности состояний измятого листа эпитаксиального ГПС (см. (16)) в областях энергий вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны субстрата. Положив $x = \pm(e_g/2) \pm \nu$ ($\nu \ll e_g$), по аналогии с плоскими слоями получим $I'_{1\pm}(\nu) \approx ((1 + \vartheta)/2)I_{1\pm}(x)$, где $I_{1\pm}(x)$ дается выражением (П6). При этом мы пренебрегли зависимостью величины логарифма (как слабо меняющейся функции) от значения фактора измятости ϑ .

Проанализируем теперь второе слагаемое, в безразмерном виде равное

$$I'_2(X') = \frac{X'}{\pi} \left(\operatorname{arctg} \frac{2\xi^2 + \bar{b}'}{2\gamma[(1 + \vartheta)X' + (1 - \vartheta)\delta_x]} - \operatorname{arctg} \frac{\bar{b}'}{2\gamma[(1 + \vartheta)X' + (1 - \vartheta)\delta_x]} \right), \quad (\text{П10})$$

где $X' = x - e - ((1 + \vartheta)/2)\lambda$, $\delta_x = |\delta + ((1 - \vartheta)/2)\lambda|$, $\bar{b}' = 2(\vartheta\gamma^2 + \delta_x^2 - X'^2)$, $\bar{c}' = (X'^2 - \delta_x^2)^2 + \vartheta^2\gamma^4 + \gamma^2[(1 + \vartheta^2)X'^2 + (1 + \vartheta^2)\delta_x^2 + 2(1 - \vartheta)X'\delta_x]$. Легко показать, что в линейном приближении по ν для оценок можно использовать выражения (П7) и (П8), домножив C на $(1 + \vartheta)/2$ и заменив в (П7) $|X|$ на $|X'|$.

4. Согласно (18), для вклада в число заполнения от плотности состояний, находящейся в нижней половине щели (т.е. в области $x < e_F = 0$), имеем

$$n_{\text{gap}} = \frac{1}{\pi\sqrt{3}} J(x^*, x^{**}), \quad J(x^*, x^{**}) = \int_{x^*}^{x^{**}} |X| dx, \quad (\text{П11})$$

где, как и ранее, $X = x - e - \lambda(x)$, $x^*(x^{**})$ — нижняя (верхняя) граница плотности состояний. В общем случае, когда $e \neq 0$ и функция X меняет знак в интервале $|x| \leq e_g/2$, область интегрирования в (П11) нужно разбить на интервалы (x_r, x_0) и (x_0, x_s) , где x_0 определяется из уравнения $X = 0$. Для каждого такого интервала (n', x'') можно записать

$$J = \left| \frac{x^2}{2} - ex + \frac{2}{3} C[(x + e_g/2)^{3/2} - (-x + e_g/2)^{3/2}] \right|_{x'}^{x'}. \quad (\text{П12})$$

Легко показать, что при $C = 0$ (свободный слой), когда $x_r = -r + e$ и $x_\delta = -\delta + e$, интеграл $J = \pi\sqrt{3}$, так что число заполнения равно единице. Для случая, представленного на рис. 2, а, $x_r \approx -0.58$, $x_\delta \approx -0.25$ и, в соответствии с (П12), $n_{\text{gap}} \approx 0.15$; в случае рис. 3, а имеем $x_r \approx -0.54$, $x_\delta \approx -0.08$ и $n_{\text{gap}} \approx 0.15$.

Все приведенные в данном разделе формулы относятся к плоским слоям. Для того чтобы перейти к измятым слоям, константу C нужно умножить на $(1 + \vartheta)/2$.

Список литературы

- [1] H. Sahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R.T. Senger, S. Ciraci. *Phys. Rev. B* **80**, 155 453 (2009).
- [2] T. Suzuki, Y. Yokomizo. *Physica E* **40**, 2820 (2010).
- [3] S. Wang. *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 064 602 (2010).
- [4] H.L. Zhuang, R.G. Hennig. *Appl. Phys. Lett.* **101**, 153 109 (2012).
- [5] G. Mukhopadhyay, H. Behera. *World J. Eng.* **10**, 39 (2013).
- [6] H.L. Zhuang, A.K. Singh, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **87**, 165 415 (2013).
- [7] A.K. Singh, H.L. Zhuang, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **89**, 245 431 (2014).
- [8] C.-J. Tong, H. Zhang, Y.-N. Zhang, H. Liu, L.-M. Liu. *J. Mater. Chem. A* **2**, 17 971 (2014).
- [9] R.M. Feenstra, D. Jena, G. Gu. *J. Appl. Phys.* **111**, 043 711 (2012).
- [10] J. Beheshtian, D.A. Sadeghi, M. Neek-Amal, K.H. Michel, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **86**, 195 433 (2012).
- [11] M. Neek-Amal, F.M. Peeters. *Appl. Phys. Lett.* **104**, 041 909 (2014).
- [12] V. Zoliomi, J.R. Wallbank, V.I. Fal'ko. *2D Materials* **1**, 011 005 (2014).
- [13] A. Hashmi, J. Hong. *J. Appl. Phys.* **115**, 194 304 (2014).
- [14] J.E. Padilha, A. Fazzio, A.J.R. da Silva. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 066 803 (2015).
- [15] G. Gumbs, A. Iurov, D. Huang, W. Pan. *J. Appl. Phys.* **118**, 054 303 (2015).
- [16] С.Ю. Давыдов. *ФТТ*, **58**, 4, 779 (2016).
- [17] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. *Элементарное введение в теорию наносистем*. Изд-во „Лань“, Спб. (2014). 192 с.
- [18] С.Ю. Давыдов. *Теория адсорбции: метод модельных гамильтонианов*. Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, Спб. (2013). 235 с. twirpx.com/file/1596114/
- [19] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, R.S. Novoselov, A.K. Geim. *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [20] С.Ю. Давыдов. *ЖТФ* **84**, 1, 155 (2014).
- [21] С.Ю. Давыдов. *ФТП* **48**, 49 (2014).
- [22] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел*. Мир, М. (1983). Т. 1. 382 с.
- [23] W.A. Harrison. *Phys. Rev. B* **31**, 2121 (1985).
- [24] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. *Метод связывающих орбиталей в теории полупроводников*. Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, Спб. (2007). 96 с. twirpx.com/file/1014608/
- [25] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. *Поверхности и границы раздела полупроводников*. Мир, М. (1990). 488 с.
- [26] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature* **499**, 420 (2013).
- [27] И.В. Антонова. *ФТП* **50**, 67 (2016).