

Чернівецький державний університет
ім. Ю. Федьковича

На правах рукопису
УДК 621.315.592

Дугаєв Віталій Костянтинівич

**Кореляції і домішки в вузькозонних
напівпровідниках та низькорозмірних структурах**

(01.04.10 - фізика напівпровідників і діелектриків)

АВТОРЕФЕРАТ

**дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук**

Чернівці 1996

АВ35.948

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Чернівецькому відділенні Інституту проблем матеріалознавства Національної Академії наук України.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Сизов Федір Федорович

доктор фізико-математичних наук, професор
Лукіянець Богдан Антонович

доктор фізико-математичних наук, професор
Мельничук Степан Васильович

Провідна організація: Інститут фізики Національної Академії наук
України

Захист відбудеться 29 листопада 1996 р. о 15 год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д.07.01.06 при Чернівецькому державному університеті ім. Ю.Федьковича за адресою: 274012, м.Чернівці, вул. Коцюбинського, 2.

З дисертацією можна ознайомитися в бібліотеці Чернівецького державного університету ім. Ю.Федьковича (вул. Л.Українки, 23).

Автореферат розісланий " ____ " _____ 1996 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

М.В. Курганецький

ЛННБ України ім.В.Стефаника



00739722 (U)

ДВ - 35. 970

3

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми досліджень. В дисертаційній роботі розглянуто коло питань, пов'язаних з електронними кореляціями в напівпровідниках з домішками. Такі кореляції є відповідальними за ефекти, що виникають внаслідок взаємодії між електронною та домішковою підсистемами. Електронні кореляції в підсистемі вільних носіїв струму обумовлюють ефективну міждомішкову взаємодію. В свою чергу, через систему домішок, які дають флуктуючий випадковий потенціал, виникають ефективні взаємодії в самій електронній підсистемі.

Центральне місце в дисертації посідає проблема магнітних кореляцій, які зумовлюють непряму обмінну взаємодію між магнітними домішками в вузькозонні напівпровідниках. Ця проблема має важливе значення для напівпровідників, легованих магнітними домішками (так званих напівмагнітних напівпровідників). Інтерес до напівмагнітних напівпровідників зараз досить великий, що насамперед пов'язано з можливістю ефективно впливати на енергетичний спектр, оптичні та фотоелектричні властивості напівпровідників через систему магнітних домішок і керувати цими властивостями за допомогою зовнішнього магнітного поля. Слід зазначити, що серед напівмагнітних напівпровідників досить добре вивчені напівпровідники типу A_2B_6 і набагато менше зроблено в області вузькозонних напівпровідників з релятивістським спектром типу A_4B_6 . Окрім цього, менше уваги приділялось вивченню властивостей цих напівпровідників при високих концентраціях магнітних домішок. Саме тому в дисертації основну увагу приділено розгляду напівпровідників типу A_4B_6 , а також магнітним взаємодіям в них, що стають важливими при досить високих концентраціях домішок.

Останнім часом особливий інтерес викликають напівпровідникові низькорозмірні структури і надгратки. Сучасна нанотехнологія досягла в цьому вражаючих успіхів. Тому стає необхідним поширити розгляд будь-яких напівпровідникових сполук на відповідні низькорозмірні структури і гетероструктури. В дисертаційній роботі окремо розглядаються структури з квантовими ямами на основі напівпровідників типу A_4B_6 і їх твердих розчинів.

Ця проблема важлива зараз сама по собі з точки зору їх електронного спектру. В дисертації також детально розглянуто особливості магнітної взаємодії в системах з квантовими ямами.

Взаємодія електронів з домішками в напівпровідниках є відповідальною за виникнення специфічних кореляцій в електронній підсистемі, що приводять до локалізації електронів, причому ефективна розмірність системи відіграє тут дуже важливу роль. В цілому локалізація - велика і складна проблема. В дисертації розглянуті окремі її питання, пов'язані з кореляційними ефектами в тонких плівках, а також з кінетичними властивостями кореляційних функцій при наявності зовнішнього електромагнітного поля та фононів.

Кілька років тому гарячою точкою фізики твердого тіла стала проблема магнітних багаточарових структур. Наявність в них гігантського магнітоопору (порядку 100 %) в слабких магнітних полях обіцяє великі перспективи таких систем у приладах магнітного запису. В дисертації представлено теорію гетероконтакту в такій структурі, яка базується на врахуванні взаємодії електронів з домішками на границі розділу різних сполук.

Таким чином, увага в дисертаційній роботі концентрувалась на найбільш актуальних проблемах, які пов'язані з електронними кореляціями і домішками в вузькозонних напівпровідниках та низькорозмірних системах. Ці проблеми були і є в центрі уваги в наукових журналах і конференціях протягом останніх десяти років. Цим визначається **актуальність** даної роботи.

Метою роботи є проведення комплексного дослідження і визначення вирішальної ролі, яку відіграють електронні кореляції в вузькозонних напівпровідниках і низькорозмірних структурах з домішками і дефектами.

Завдання, які розв'язуються в дисертаційній роботі, наступні:

- розробити теоретичний апарат для опису низькорозмірних структур на основі напівпровідників A_4B_6 ;
- дослідити особливості обмінної взаємодії в напівпровідниках з магнітними домішками;
- дослідити механізм непрямої взаємодії між домішками в сегнетоелектричних кристалах і напівпровідникових твердих розчинах;

- дослідити кореляційні ефекти при локалізації електронів в тонких плівках, знайти кінетичні рівняння для кореляційних функцій;
- дослідити роль кореляційних ефектів при дифузії домішок в низькорозмірних структурах;
- дослідити вплив взаємодії з домішками на електричний опір в гетероструктурах;
- дослідити кореляції в квазідвовимірній випадково викривленій структурі.

Загальна методика досліджень. Автор користувався різними загальноновизнаними методами теоретичної фізики: функціями Гріна, фейнманівськими діаграмами, методом функціональних інтегралів. Крім того, широко використовувались комп'ютерні розрахунки, але тільки в тих випадках, коли було неможливо всі розрахунки довести до кінця в аналітичному вигляді. Р окремих випадках автором були розвинуті власні методи. Наприклад, у першій главі при розгляді квантових ям було використано метод, в принципі ачалогічний відомому $k \cdot p$ -методу, але пристосований до рішення конкретної задачі. В четвертій главі було розроблено метод знаходження кінетичних рівнянь для електронних кореляторів, який використовує техніку Келдиша для нерівноважних процесів, але на рівні функціональних інтегралів, як це робиться в теорії слабкої локалізації. Широко використовувалось також самоузгоджене наближення та метод середнього поля, в основному в рамках методу функціонального інтегрування.

Наукова новизна.

- Вперше побудовано ефективний гамільтоніан на основі запропонованого методу розгляд квантоворозмірних структур, вузькозонних напівпровідників;
- Вперше розраховано ефективну взаємодію магнітних домішок в квантових ямах і інверсних гетероконтактах на основі напівпровідників типу A_4B_6 ;
- Показано важливу роль електронних кореляцій при спінодальному розпаді твердих розчинів вузькозонних напівпровідників;
- Вперше розраховано квантову поправку до провідності і магнітоопір в тонкій плівці;
- Вперше знайдено кінетичні рівняння для електронних кореляторів в теорії локалізації;

- Побудовано послідовну теорію гетероконтакту з випадковими розсіювачами на поверхні розділу,
- Вперше побудовано теорію електронної системи у випадку двовимірної випадково викривленої поверхні.

Теоретична цінність роботи полягає в тому, що розроблені автором методи вирішення проблеми можуть бути використані при дослідженні інших задач теорії напівпровідників, металів і напівметалів, а саме, при дослідженні енергетичного спектру в квантових ямах на основі вузькозонних кристалів A_2B_6 та A_3B_5 , магнітних кореляцій в таких структурах, при розрахунках гігантського магнітоопору в мультішарах з магнітними та немагнітними металами, локалізаційних поправок в системах із стохастичними збуреннями кінетичної природи.

Практична цінність роботи полягає, по-перше, у можливості використання розробленої загальної теорії при розгляді конкретних задач фізики вузькозонних напівпровідників, а по-друге, у можливості безпосереднього використання отриманих результатів при аналізі експериментальних даних і розробці електронних приладів на основі квантоворозмірних структур.

Так, результати першої глави по дослідженню енергетичного спектру низькорозмірних систем є важливими безпосередньо для оптичних досліджень, а знайдений ефективний гамільтоніан може бути використаний, наприклад, для вивчення транспортних властивостей в квантових ямах. Розроблений метод дослідження спектру може бути також використаний для широкозонних напівпровідників типу A_2B_6 і A_3B_5 при великих імпульсах електронів.

Результати другої глави по магнітних взаємодіях закливі для аналізу експериментальних даних по напівмагнітних напівпровідниках типу A_4B_6 . Зокрема, отримані результати показують можливість існування фази спінового скла в об'ємних кристалах, що узгоджується з експериментом. Аналогічні результати для низькорозмірних систем в майбутньому будуть мати цінність при детальному експериментальному дослідженні таких систем.

Результати дослідження можливості спінодального розпаду (глава 3) напівпровідникових твердих розчинів підтверджують загальноприйнятую думку про нестійкість тих сполук (твердих

розчинів), в яких ширина електронної забороненої зони є близькою до нуля.

На захист вносяться:

1. Ефективний гамільтоніан, що описує електрони і дірки в квантових ямах на основі напівпровідників типу A_4B_6 .
2. Результати розрахунків енергетичного спектру в квантових точках на основі напівпровідників A_4B_6 .
3. Теорія взаємодії магнітних домішок у вузькозонних об'ємних напівпровідниках типу A_4B_6 , а також квантових ямах та і зверхних гетероконтактах на основі цих напівпровідників і їх твердих розчинів.
4. Висновок про суттєвий внесок електронної підсистеми при термодинамічному розгляді спінодального розпаду напівпровідникових твердих розчинів.
5. Результати розрахунку коефіцієнта дифузії в низькорозмірній системі при наявності випадкових силових полів, а також при взаємодії з електронною підсистемою.
6. Формули для магнітоопору в тонких плівках в слабких магнітних полях.
7. Кінетичне рівняння в теорії локалізації.
8. Теорія проходження електричного струму через металічні гетероконтакти при наявності локалізованих на контакті дефектів і домішок.
9. Теорія електропровідності для двовимірної випадково-викривленої поверхні.

Публікації і особистий внесок дисертанта. За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 31 наукову роботу, перелік яких наведено в кінці автореферату.

Дисертантом проведені нові теоретичні обчислення в цих роботах. Розраховано енергетичний спектр і хвильові функції електронів в квантових ямах, розраховано енергію магнітної взаємодії домішок і непряму обмінну взаємодію немагнітних домішок, коефіцієнти дифузії в низькорозмірних структурах, квантові поправки до провідності в тонких плівках, знайдено кінетичне рівняння в теорії слабкої локалізації, розраховано контактний опір в системі двох металів з домішками а поверхні

розділу, розраховано час релаксації електронів при русі вздовж випадково викривленої поверхні.

Анотація роботи. Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на таких конференціях і нарадах: V і VI Всесоюзних конференціях з фізико-хімічних властивостей легування напівпровідникових матеріалів (Москва, 1982; Москва, 1988); VI, VII і VIII Всесоюзних симпозиумах по напівпровідниках з вузькою забороненою зоною і напівметалах (Львів, 1982; Львів, 1986; Львів, 1991); XI і XV нарадах з теорії напівпровідників (Ужгород, 1983; Львів, 1992); XI Всесоюзній конференції з фізики сегнетоелектриків (Чернівці, 1986); VIII конференції по конденсованій речовині (Будапешт, 1988); XXV Всесоюзній нараді по фізиці низьких температур (Ленінград, 1988); IV Всесоюзній конференції з термодинаміки і матеріалознавства напівпровідників (Москва, 1989); III Всесоюзній конференції з моделювання вирощування кристалів (Рига, 1990); Республіканській конференції з фізики і хімії поверхні і границь розділу вузькощільних напівпровідників (Львів, 1990); V міжнародній конференції з фізики електронно-оптичних мікроструктур і мікроприладів (Геракліон, Греція, 1990); III Всесоюзній конференції з матеріалознавства халькогенідних напівпровідників (Чернівці, 1991); XXI, XXII і XXIII міжнародних школах по фізиці напівпровідникових сполук (Яшовець, Польща, 1992, 1993, 1994); VII міжнародній конференції з вузькозонних напівпровідників (Саусемптон, Великобританія, 1992); II Українській конференції з матеріалознавства і фізики напівпровідникових фаз змінного складу (Ніжин, 1993); I Міжнародній конференції з матеріалознавства халькогенідів і напівпровідників з структурою алмазу (Чернівці, 1994); Міжнародній школі-семінарі з фізичних проблем матеріалознавства напівпровідників (Чернівці, 1995); засіданнях Ученої ради Інституту теоретичної фізики ім. Л.Д.Ландау (Чорноголовка, 1984, 1985).

Структура і об'єм дисертації. Дисертація складається з вступу, семи глав, висновків і списку цитованої літератури. Робота викладена на 237 сторінках, включає 39 рисунків і список літератури, що містить 226 джерел.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обговорюється актуальність теми, коротко описано зміст роботи, сформульовано положення, що виносяться на захист, наукову і практичну цінність задач, що розв'язуються в дисертації.

У першій главі розроблено теоретичний апарат для опису квантово-розмірних структур на основі вузькозонних напівпровідників типу A_4B_6 .

Детально розглянуто випадок прямокутної квантової ями, яка моделюється параметром ширини забороненої зони $2\Delta(z)$ в гамільтоніані моделі Дірака. Спочатку знайдено хвильові функції для руху вздовж вісі z (перпендикулярно до площини ями), коли імпульс руху в площині ями дорівнює нулю, $k_{\perp}=0$. Використовуючи ці функції як базис, знайдено ефективний гамільтоніан, що описує носії в квантовій ямі. Для першої (найближчої) пари квантово-розмірних рівнів ефективний гамільтоніан H є прямою сумою двох гамільтоніанів (2+1)-вимірної квантової електродинаміки з протилежними знаками параметру ширини забороненої зони $2e_0$, де e_0 , $-e_0$ - перша пара розмірно-квантованих рівнів

$$H = H_I \oplus H_{II}, \quad H_{I,II} = \pm e_0 \sigma_z + v(\sigma_x^I x + \sigma_y^I y), \quad (1)$$

σ_a - матриці Паулі, v - параметр міжзонної взаємодії. Показано, що рівняння для квантово-розмірних рівнів ϵ складається з двох рівнянь

$$\frac{\gamma(\Delta_0 + \epsilon)}{\kappa_0(\Delta_1 + \epsilon)} = \operatorname{tg}(\kappa_0 L), \quad (2)$$

$$-\frac{\kappa_0}{\kappa_1} \frac{\Delta_1 + \epsilon}{\Delta_0 + \epsilon} = \operatorname{tg}(\kappa_0 L), \quad (3)$$

де $\kappa_0 = \sqrt{e^2 - \Delta_0^2} / v$, $\kappa_1 = \sqrt{\Delta_1^2 - e^2} / v$, Δ_0 і Δ_1 - відповідно параметри забороненої зони всередині ями і зовні, L - напівширина квантової ями, v - параметр міжзонної взаємодії. Рівняння (2), (3) визначають дві системи рівнів. В одній системі (2) хвильові функції для рівнів в зоні провідності включають парну функцію від z для першої біспінорної компоненти $\phi(z)$ і непарну - для другої $\chi(z)$, в другій (рівняння (3)) - непарну для $\phi(z)$ і парну для $\chi(z)$. Для рівнів в валентній зоні все навпаки - в системі (2) функції $\phi(z)$ непарні, а $\chi(z)$ - парні, а в системі (3) ϕ парні і χ непарні.

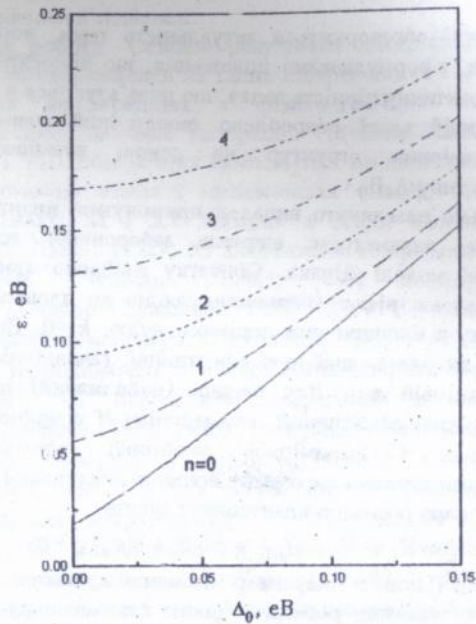


Рис.1. Залежність енергії квантово-розмірних рівнів в квантовій ямі від параметра Δ_0 при $L=2 \cdot 10^{-6}$ см.

Енергії квантово-розмірних рівнів в квантовій ямі знайдено шляхом чисельних розрахунків. На рис.1 представлено залежність енергій квантово-розмірних рівнів від параметра Δ_0 .

За допомогою знайденого ефективного гамільтоніану розглянутий також енергетичний спектр в квантовій ямі в перпендикулярному магнітному полі B . Енергії магнітних рівнів для кожної відповідної пари розмірно-квантованих рівнів даються наступними формулами

$$\epsilon_l = \frac{g_v - g_c}{4} \mu_B B \pm \left[\left(\epsilon_0 - \frac{g^*}{2} \mu_B B \right)^2 + \frac{2v^2 eB}{\hbar c} n \right]^{1/2}, \quad (4)$$

$$\epsilon_l = -\frac{g_v - g_c}{4} \mu_B B \pm \left[\left(\epsilon_0 + \frac{g^*}{2} \mu_B B \right)^2 + \frac{2v^2 eB}{\hbar c} n \right]^{1/2}, \quad (5)$$

де g_v , g_c - фактори Ланде для зон валентної та провідності, $g^* = (g_c + g_v)/4$, $n=0,1,2,\dots$

Розглянуто також задачу про енергетичний спектр в квантових точках для структур на основі напівпровідників типу A_4B_6 . Від попередньої задачі це відрізняється тим, що параметр $\Delta(r)$ в гамільтоніані Дірака є сферично-симетричним. При цьому задача в цілому може не бути сферично-симетричною за рахунок можливої анізотропії вихідного гамільтоніану.

В ізотропному випадку знайдено рівняння для квантоворозмірних рівнів квантової ями, а самі енергії рівнів розраховано чисельно як функції від розміру квантової ями (радіусу квантової точки R).

Скremo розглянуто випадок, коли квантова яма складається із взаємно інвертованих напівпровідників, тобто, коли параметр $\Delta(r)$ має різні знаки всередині і зовні ями. Знайдено енергетичні рівні, які попадають в заборонену зону для напівпровідника з меншим значенням $|\Delta|$, а також хвильові функції таких станів, які насправді виявляються граничними станами, оскільки в основному зосереджені поблизу границі частинки. При $R \rightarrow \infty$ енергія найнижчого рівня граничних станів прямує до нуля, і відповідний стан відповідає *вейлівському* стану.

У випадку сильної анізотропії вихідного гамільтоніану використовується адіабатичне наближення. Спочатку знайдено хвильові функції швидкого руху - перпендикулярно до вісі енергетичного еліпсоїда, а також рівняння для відповідних квантових рівнів, які є функціями від координати повільного руху. Чисельний розрахунок дає залежність енергії швидкого руху від розміру квантової точки R і від z . Цю залежність можна лінеаризувати в області найменших енергій, що приводить до ефективного релятивістського гамільтоніана, який описує повільний рух, з параболічною залежністю параметра енергетичної шілини

$\lambda(z) \sim z^2$. Знайдено аналітичне рішення задачі про квантування руху вздовж вісі витягнутості еліпсоїда.

У цій же главі розглянуто питання про енергетичний спектр домішок в неінвертованій квантовій ямі напівпровідників A_4B_6 . При цьому розглядається випадок, коли ширина ями досить вузька, - порядку або менше масштабу потенціалу домішки всередині цієї ями. Тоді задача зводиться до двовимірної релятивістської моделі з короткодіючими домішками, для якої знайдено відповідні домішкові рівні як функції від величини ефективного потенціалу домішки. На відміну від рішення для аналогічної тривимірної задачі, домішки з малим потенціалом дають рівні, енергія яких є експоненційно малою.

У другій главі розглядаються взаємодії з напівпровідниках типу A_4B_6 з магнітними домішками.

Насамперед розглядається взаємодія в об'ємних (тризмірних) кристалах. Вихідним є анізотропний (в загальному випадку) гамільтоніан типу Дірака, який описує носії однієї L -долини. Взаємодія з магнітною домішкою береться контактною $s-d$ - взаємодією, яка в загальному випадку може бути описана за допомогою двох констант зв'язку g_1 і g_2 (матричні елементи потенціалу взаємодії на хвильових функціях зон провідної і валентної). Взаємодія двох магнітних домішок на відстані R в другому порядку теорії збурень описується діаграмою типу петлі. Важливим моментом у всіх розрахунках є те, що обмінна взаємодія через носії однієї L -долини зберігає напрямок у k -просторі, яким визначається положення цієї долини. Сумарний внесок всіх долин включає сумування по різних долинах. Анізотропія окремої долини може бути виключена із розрахунків за допомогою одночасного масштабного перетворення в реальному і оберненому просторах.

Важливо зазначити, що основною особливістю обмінної взаємодії у вузькощілинних напівпровідниках являється наявність взаємодії через збудження віртуальних електрон-діркових пар (вузькозонний аналог механізму *Блоембергена-Роуленда*), яке тим більш істотне, чим менше ширина забороненої зони. Тому було розраховано саме внесок у взаємодію магнітних домішок при відсутності легування (хімпотенціал $\mu=0$, тобто знаходиться всередині забороненої зони), і при температурі $T=0$.

Характерним масштабом відстані для взаємодії є величина v/Δ , (для напівпровідників A_4B_6 параметр міжзонної взаємодії $v=5 \cdot 10^{-8}$ еВ·см). На великих відстанях, $R \gg v/\Delta$, взаємодія спінів S_1, S_2 має такий вигляд

$$E(R) = w_{\text{сп}} S_{1\alpha} S_{2\beta}, \quad (6)$$

$$w_{\text{сп}} = \frac{\Delta^{5/2} e^{-2R\Delta/v}}{2\pi^{5/2} v^{7/2} R^{5/2}} \left[\left(\frac{g_1^2 + g_2^2}{2} + \frac{g_1 g_2}{3} \right) \delta_{\alpha\beta} - \frac{c}{3} \gamma_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta \right] \quad (7)$$

де $\xi_\alpha = R_\alpha/R$. Переважає антиферомагнітна взаємодія окремих пар. Взаємодія включає поряд з гайзенбергівським також і псевдодіпольний член. Висновок про антиферомагнітний знак взаємодії є важливим для пояснення можливості існування фази спінового скла, яку було знайдено експериментально в кристалах $SnTe$, легованих марганцем.

При малих відстанях, $R \ll v/\Delta$, переважає феромагнітна взаємодія, і також існує псевдодіпольний внесок.

Було розглянуто питання про можливі типи упорядкування магнітних моментів в парах в залежності від відстані R і співвідношення між константами зв'язку g_1 і g_2 . Як виявилось, при $R > v/\Delta$ і $g_1/g_2 > 0$ найменша енергія відповідає антиферомагнітно впорядкованим парам з моментами, перпендикулярними до вектора ξ , що з'єднує пари, а при $g_1/g_2 < 0$ - з моментами, що колінеарні з ξ .

При $R < v/\Delta$ феромагнітно впорядковані пари мають моменти, перпендикулярні до ξ при $g_1/g_2 > 0$, або спрямовані вздовж ξ при $g_1/g_2 < 0$.

Розглянуто вплив легування на взаємодію. У цьому випадку взаємодія складається з двох внесків. Перший з них відповідає випадку $\mu=0$ (тому його можна вважати внеском від кристалічної грапки), а другий, пов'язаний із звичайним механізмом РККІ, - від збудження електрон-дірочних пар поблизу фермі-поверхні. При $R \gg k_F^{-1}$ (k_F - імпульс електронів на фермі-поверхні) і достатньо сильному легуванні, $k_F \gg \Delta/v$, цей внесок має вигляд

$$w_{\text{сп}}^{(1)} = \frac{k_F^2}{8\pi^3 v R^3} \left[\frac{(g_1 - g_2)^2}{2} \delta_{\alpha\beta} + 2g_1 g_2 \gamma_{\alpha\beta} \right] \cdot \cos(2k_F R) \quad (8)$$

і містить псевдодіпольний член, що зумовлено наявністю сильної кристалічної спин-орбітальної взаємодії. В формулі (7) тензор $\gamma_{\alpha\beta}$

побудовано з векторів ξ та η , де η - вектор напрямку відповідної L -долини.

Розглянуто також вплив температури $T \neq 0$ на взаємодію в об'ємних нелегованих напівпровідниках A_4B_6 . Взаємодія при цьому зменшується за рахунок того, що ефективно зменшується фазовий об'єм для збудження віртуальних електрон-дірочних пар. У формулі для взаємодії з'являється температурний фактор $\exp(-\pi^2 T^2 R / v \Delta)$.

Окремо розглядається випадок, коли модель Дірака є поганим наближенням для опису енергетичного спектра напівпровідників A_4B_6 . Це - інвертовані структури, прикладом яких є тверді розчини $Pb_{1-x}Sn_xTe$ з $x > 0,35$. У цьому випадку для розрахунків використовується гамільтоніан Діммока, що включає квадратичні імпульсу члени. Розрахунки взаємодії для гамільтоніана Діммока було проведено чисельними методами. Важливим результатом є наявність осциляцій у взаємодії для сильно інвертованої структури, коли мінімальна енергетична щільність визначається відмінням від нуля імпульсом $k_{\text{min}} \approx (m \Delta)^{1/2} / \hbar$. При цьому навіть у відсутності легування з'являються осциляції взаємодії з періодом $\sim k_0^{-1}$.

Далі у другій главі проведено розрахунки взаємодії магнітних домішок в квантових ямах напівпровідників типу A_4B_6 . Для цього використовується ефективний гамільтоніан електронів у квантовій ямі, який було побудовано у першій главі.

Спочатку розглядається випадок, коли пара домішок знаходиться точно всередині квантової ями. Проведений розрахунок дає залежність взаємодії від відстані між домішками. Окремо розглядаються пари з магнітними моментами вздовж і перпендикулярно до площини квантової ями. Результат для взаємодії на великих відстанях $R \gg v / e_0$ ($e_v - e_c$ - найближча пара розмірно-квантованих рівнів) має такий вигляд

$$w_{\alpha\beta} = \frac{N_v \tilde{g}^2 e_0^{3/2} \exp(-2R e_0 / v)}{2\pi^{3/2} v^{5/2} R^{3/2}} \xi_\alpha^\beta \eta_\alpha^\beta \quad (9)$$

$$w_{zz} = - \frac{N_v \tilde{g}^2 e_0^{1/2} \exp(-2R e_0 / v)}{4\pi^{3/2} v^{3/2} R^{5/2}} \quad (10)$$

де $\alpha, \beta = x, y$, N_v - число долин, \tilde{g} - ефективна константа взаємодії домішок в квантовій ямі.

Для того, щоб розрахувати взаємодію магнітних домішок, які знаходяться не точно в центрі квантової ями, розроблено такий

математичний апарат, коли окремо розглядається кожна магнітна домішка. Для довільного положення цієї домішки в квантовій ямі розраховано просторовий розподіл магнітної густини, який зумовлений *магнітним вакуумним екрануванням* (по аналогії з вакуумним екрануванням заряду в квантовій електродинаміці). Цей розподіл є лінійною комбінацією симетричного і антисиметричного розподілу

$$\tilde{m}(\vec{x}, z) = \tilde{m}^{(s)}(\vec{x})\Phi_1(z) + \tilde{m}^{(a)}(\vec{x})\Phi_2(z), \quad (10)$$

де $\Phi_1(z)$ і $\Phi_2(z)$ - парна і непарна хвильові функції електрона в квантовій ямі, які було знайдено в главі 1. Симетрична та антисиметрична частини магнітної густини визначаються відповідними константами зв'язку g_s, g_a (константи взаємодії домішки з симетричною та антисиметричною частинами магнітної густини), які розраховуються по таких формулах

$$g_s(z_0) = \frac{g}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dz [\Delta(z - z_0) + \Delta(z + z_0)] [\Phi_1^2(z) + \Phi_2^2(z)] \quad (11)$$

$$g_a(z) = g \int_{-\infty}^{\infty} dz [\Delta(z - z_0) - \Delta(z + z_0)] \Phi_1(z)\Phi_2(z) \quad (12)$$

де $\Delta(z)$ - функція "загравочного" розподілу магнітної густини окремої домішки. Чисельний розрахунок констант зв'язку представлено на рис.2.

Таким чином, магнітна домішка в квантовій ямі через константи зв'язку g_s і g_a взаємодіє з симетричною і антисиметричною магнітною густиною. Розроблений апарат поглиблює уявлення про фізичні процеси, що супроводжують механізм взаємодії магнітних домішок через збудження віртуальних електрон-дірочних пар.

Розглянуто також випадок, коли магнітні домішки знаходяться в інвертованому гетероконтакті. В цій ситуації, як було вперше показано *Волковим і Панкратовим*, на границі існуються специфічні безщілинні *вейлівські* збудження. Обмінна взаємодія домішок через такі збудження носить дальнодіючий характер. В дисертаційній роботі розраховано взаємодію домішок через *вейлівські* збудження.

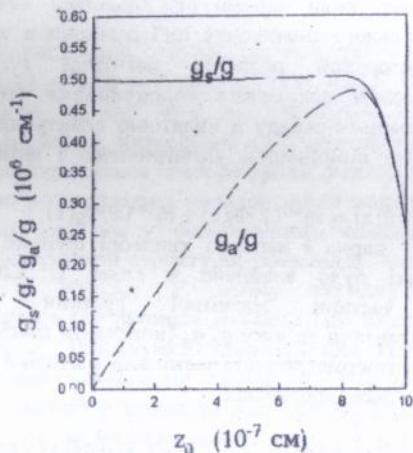


Рис.2. Залежність констант зв'язку від положення домішки в квантовій ямі ($\Delta_0=0.01$ еВ, $\epsilon_p=0.04$ еВ, $L=10^{-6}$ см).

При цьому застосовано метод, який було використано у першій главі для знаходження енергетичного спектру електронів і дірок в квантових ямах.

Розрахунок показав, що при $\mu=0$ (у відсутності легування) взаємодія носить феромагнітний характер і залежить від відстані як $1/R^3$. Магнітне впорядкування в окремих парах виявляється різним в залежності від співвідношення констант зв'язку. При $0 < g_2/g_1 < 2,46$ енергетично вигідне феромагнітне впорядкування з магнітними моментами вздовж ξ . В усіх інших випадках основний стан відповідає феромагнітно впорядкованим моментам, що спрямовані перпендикулярно до площини гетероконтакту.

Безцілинний характер вейлівського спектру для інвертованого гетероконтакту не дозволяє повністю знехтувати легуванням. Тому було проведено розрахунки взаємодії для інвертованого гетероконтакту при наявності слабого легування. Виявилось, що взаємодія складається із двох незалежних один від одного внесків.

Перший з них це внесок гратки, який було розраховано при $\mu=0$, а другий виникає від обміну електрон-дірочними парами поблизу фермі-поверхні і має осцилюючий характер - веде себе як $\cos(2k_F R - \varphi)/R^2$. Таким чином, для тих пар домішок, для яких $R \gg k_F^{-1}$, взаємодія буде зумовлена переважно обміном електрон-дірочними збудженнями поблизу фермі-поверхні (т.п.у РККІ), а для тих пар, для яких відстань $R \ll k_F^{-1}$ (їх буде багато при слабкому легуванні), буде переважати обмін вейлівськими збудженнями.

У третій главі також розглянуто непряму взаємодію домішок, але вже іншої, немагнітної природи.

Насамперед розраховано непряму взаємодію домішок з участю оптичних фононів. При цьому використано той факт, що в деяких вузькозонних напівпровідниках типу A_3B_5 ($SbTe$, $PbGeTe$) мають місце фазові переходи сегнетоелектричного типу, що супроводжуються пом'якшенням певних фононних мод. Поблизу точки фазового переходу енергія збудження таких фононів дуже мала, тому можна очікувати, що внесок у взаємодію буде достатньо суттєвим. Розрахована в дисертації взаємодія аналогічна обміну електронними збудженнями і пов'язана з розсіюванням фононів на домішках.

Формули для енергії взаємодії мають такий вигляд. При низьких температурах, $T \ll \omega$ (ω - певна гранична енергія фононів, порядку дебаєвської)

$$E(R) = - \frac{\xi^2(2c + \omega_0 R)}{12\pi^3 c^4 R^3} \exp\left(-\frac{c\omega_0 R}{c}\right) \quad (13)$$

а при високих температурах, $T \gg \omega$

$$E(R) = - \frac{\xi^2 T}{4\pi^2 c^4 R^2} \exp\left(-\frac{2\omega_0 R}{c}\right) \quad (14)$$

де ξ - константа електрон-фононного зв'язку, ω_0 і c - параметри фононного спектру, що береться у вигляді $\omega_k = \sqrt{\omega_0^2 + c^2 k^2}$ (спектр м'яких фононів). Взаємодія домішок має характер притягання.

У третій главі розглянуто також взаємодію через збудження електрон-дірочних пар, яка виникає в задачі про спінодальний розпад напівпровідникових твердих розчинів. Замість окремих домішок тут фігурує концентраційний розподіл твердого розчину, а ефективний гамільтоніан, що описує цей розподіл, включає в себе

взаємодію через обмін електрон-дірочними збудженнями в електронній підсистемі. Знайдена нами формула для температури спінодального розпаду має такий вигляд:

$$T = \left(|V_0| - \frac{\alpha^2}{2T} p \right) c(1-c) \quad (15)$$

де p дає внесок від електронної підсистеми:

$$p = -iSp \int \frac{dE \cdot d^3k}{(2\pi)^4} \hat{\rho} \left[E - \left(\Delta - \frac{\hbar^2 v^2}{2m} \right) \tau_z + \mu_e \right]^{-1} \hat{\rho} \left[E - \left(\Delta - \frac{\hbar^2 v^2}{2m} \right) \tau_z + \mu_e \right]^{-1} \quad (16)$$

V_0 - потенціал атомів, що складають одну з компонент твердого розчину, c - концентрація для цієї компоненти. Тут розглядається напівпровідник з параболічним спектром електронів і дірок. Матричні елементи взаємодії з електронною підсистемою складають матрицю ρ , α - відповідна константа зв'язку. Внесок у взаємодію від електронної підсистеми зростає, коли мінімальна енергія збудження електрон-дірочних пар мала. Це приводить до зменшення температури спінодального розпаду в напівпровідниковому твердому розчині з малою енергією збудження електрон-дірочних пар, тобто, коли енергетична щільність в електронному спектрі наближається до нуля. Ефект є вираженням сильніше в низькорозмірній системі, оскільки має флуктуаційну природу.

У четвертій главі розглядаються електронні кореляції в задачах про локалізацію електронів в домішкових системах. В рамках теорії слабкої локалізації *Альтшулера-Аронова-Ларкіна-Хмельницького* локалізація проявляється в квантових поправках до провідності, які в свою чергу розраховуються через певні корелятори типу густина-густина (дифузони) та корелятори флуктуацій надпровідної густини (куперони).

В дисертаційній роботі розроблено теорію для кореляторів куперонного типу в достатньо тонкій плівці (коли довжина вільного пробігу електрона l набагато більше товщини плівки d), виходячи з дифузійного рівняння для такого корелятора. При цьому вважалось, що розсіювання електрона на поверхні плівки є дифузійним. Розраховано магнітоопір в тонкій плівці, який визначається квантовими поправками і має певні особливості у порівнянні з

магнітоопором для товстих плівок. Формули для квантових поправок до магнітопровідності в тонкій плівці мають такий вигляд

$$\Delta G(H) = G(H) - G(0) = \begin{cases} \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln\left(1 + \frac{ld^3}{16L_H^4} \frac{\tau_\varphi}{\tau}\right), & L_\varphi \frac{L_H^2}{d} \gg l \quad (17) \\ \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \ln\left(1 + \frac{d^2}{3L_H^2} \frac{\tau_\varphi}{\tau}\right), & L_\varphi l \gg \frac{L_H^2}{d} \quad (18) \\ \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \frac{\pi L_\varphi d^3 \tau_\varphi}{48L_H^4 \tau} & l, \frac{L_H^2}{d} \gg L_\varphi \quad (19) \end{cases}$$

де H - магнітне поле, L_H - магнітна довжина, τ_φ - час збою фази хвильової функції (визначається непружними процесами), τ - час релаксації імпульса електрона. Наведена теорія показує можливість зміни нахилу на залежності магнітоопору від логарифма поля при певному значенні магнітного поля, а також дозволяє шляхом вимірів магнітоопору знаходити час релаксації для непружних процесів. Експерименти, які були проведені *Беенакером, ван Гоутеном та ін.*, підтвердили наявність передбачених теорією особливостей. В роботах цих же авторів теорія було розвинуто на випадок дзеркального розсіювання електронів на поверхні плівки.

В цій же главі розроблено загальну кінетичну теорію і знайдено кінетичні рівняння для кореляторів різного типу в електронних системах з домішками. Теорія базується на використанні техніки *Келдиша* для нерівноважних процесів. В рамках наближення слабкої локалізації для вироджених напівпровідників і металів, тобто при виконанні умови $k_F l \gg 1$, в роботі знайдено ефективний лагранжіан, який описує низькоенергетичні збудження в квазідвовимірній системі з домішками при наявності зовнішніх електромагнітних полів та фононів. Полем, що описує всі можливі флуктуації електронної густини різного типу (електронні, магнітні, надпровідні), являється матричне поле Q безмежної розмірності в наступних просторах: часовому, келдишевському (подвоєння часового простору пов'язане з необхідністю розрізняти причинні та антипричинні функції Гріна), реплічному (репліки використовуються як допоміжний апарат для проведення усереднення по випадковому полю домішок) та зарядовому (яке враховує фазу хвильової функції електрона). Симетрія матриць Q відповідає *симетричним просторам* в квантовій теорії поля, які будуються за допомогою певної виділеної матриці Q_0

шляхом всіх можливих перетворень типу $Q = T^{-1} Q_0 T$, де T - довільна унітарна матриця в просторі Q -матриць. В даному випадку матриця Q_0 знаходиться з умови екстремума (перевала) лагранжіана. Низькоенергетичні збудження в системі відповідають слабо неоднорідним в просторі і часі унітарним перетворенням T . Для таких слабо неоднорідних Q -полів знайдено ефективний лагранжіан в дифузійному наближенні. Він має такий вигляд

$$L = \pi v \int d\vec{r} Sp \left\{ \left(\hbar \sigma_z \frac{\partial}{\partial t} + i \Sigma + ie \Phi \right) Q_0(t, \vec{r}) \right. \\ \left. + \frac{1}{4} D \left(\nabla Q_0 - \frac{ie}{c} A[\sigma_z, Q_0] \right)^2 + \frac{1}{8} D \frac{e H \tau_z}{\hbar c m} \sigma_z Q_0 [\nabla_x Q_0, \nabla_y Q_0] \right\} \quad (20)$$

де v - густина станів на поверхні Фермі, D - коефіцієнт дифузії електронів, Σ - масовий оператор електрон-фононої взаємодії, A і Φ - векторний і скалярний потенціали електромагнітного поля, шпур включає інтегрування по часу. Останній член в (20) пов'язаний з магнітним полем H . Цей член має топологічний характер, і його існування приводить до квантування константи Холла. Ефективний лагранжіан (20) узагальнює теорію слабкої локалізації для нестационарних і непру...них процесів. Варіація (20) по малих відхиленнях матриці Q від перевальної приводить до кінетичних рівнянь для дифузонів та куперонів. В дисертаційній роботі знайдено також загальні рівняння для провідності через флуктуації Q -матриці.

У п'ятій главі розглянуто дифузію домішок в низькорозмірній системі при наявності випадкових силових полів або при взаємодії домішок з електронною підсистемою.

У першому випадку в системі домішок виникають ефективні кореляції, що приводять до ренормування коефіцієнта дифузії. Для розв'язання цієї задачі використано метод ренормгрупи, причому розглянуто як чисто двовимірний випадок, так і випадок нецілої розмірності простору $d=2-\epsilon$, що дозволяє використати ϵ -розклад. Показано, що для анізотропних кореляцій випадкових полів рішення рівнянь ренормгрупи дають різні закони дифузії при певних відрізках часу. Наприклад, для двовимірного випадку ренормований коефіцієнт дифузії при сильній анізотропії в області $\xi < \xi_c$ буде таким

$$D_{\perp}(\xi) = D^0 \exp\left[-\frac{4(\bar{g}_1^0)^2 \xi}{1 + 2\bar{g}_1^0 \xi}\right] \quad (21)$$

$$D_{\parallel}(\xi) = D^0 \exp\left[-4(\bar{g}_2^0)^2 \xi(1 + \bar{g}_1^0 \xi)\right],$$

а в області $\xi > \xi_0$:

$$\begin{aligned} D_{\perp}(\xi) &= D^0 \exp\left[-4(\bar{g}_2^0)^2 \xi(1 + \bar{g}_1^0 \xi)\right] \\ D_{\parallel}(\xi) &= D^0 \exp\left[-\frac{4}{\xi_0} + \frac{4(\xi_0 - \xi)}{\xi \xi_0}\right] \end{aligned} \quad (22)$$

де D^0 - заправочний коефіцієнт дифузії, g_1^0 і g_2^0 - заправочні константи, що визначають кореляції анізотропної випадкової сили гаусового типу, знак гільда означає ренормування відповідних

констант з $\xi=0$. $\xi = \ln \frac{q_{\max}}{q}$, $q = \max\left\{q_0, \left(\frac{\omega}{D}\right)^{1/2}\right\}$, q_0, ω - імпульс і частота, які входять у ефективну взаємодію дифузійних кореляторів, $\xi_0 = (g_1^0)^{1/3} (g_2^0)^{2/3}$. Розрахунок парного корелятора зміщення домішки, що визначає закон її руху, у випадку сильної анізотропії буде таким:

а) при $t \ll \tau \exp(1/g_0)$:

$$\langle x^2(t) \rangle = D^0 t \exp\left[-4(\bar{g}_1^0)^2 \ln \frac{t}{\tau}\right] \quad \langle y^2(t) \rangle = D^0 t \exp\left[-4(\bar{g}_1^0)^2 \ln \frac{t}{\tau}\right] \quad (23)$$

б) при $\exp(1/g_1^0) \ll t/\tau \ll \exp(1/\xi_0)$:

$$\langle x^2(t) \rangle = D^0 t \exp\left[-4(\bar{g}_1^0)^2 \ln^2 \frac{t}{\tau}\right] \quad \langle y^2(t) \rangle = D^0 t \exp(-2\bar{g}_1^0) \left[1 + \frac{1}{\ln \frac{t}{\tau}}\right] \quad (24)$$

в) при $t > \tau \exp(1/\xi_0)$:

$$\begin{aligned} \langle x^2(t) \rangle &= D^0 t \exp\left[-8(\bar{g}_1^0)^{1/3} (\bar{g}_2^0)^{2/3} \left[1 + \frac{4}{\ln \frac{t}{\tau}}\right]\right] \\ \langle y^2(t) \rangle &= D^0 t \exp\left(-2\bar{g}_1^0\right) \left[1 + \frac{4}{\ln \frac{t}{\tau}}\right] \end{aligned} \quad (25)$$

де τ - мінімальний масштаб часу (час одного стрибка). Таким чином, ефективні кореляції в системі домішок приводять до відхилення від

дифузійного закону руху частинки. Проаналізовано також рухливість домішок при наявності певного постійного поля. Теорія приводить до можливості певних аномалій дифузії у низькорозмірній системі.

У цій же главі досліджувалась низькорозмірна дифузія частинок (наприклад, іонів інтеркалату у шаруватих кристалах) при наявності кулонівської взаємодії з двовимірними електронами в провідних шарах, що знаходяться на певній відстані від дифундуючих частинок. Було розглянуто два протилежних випадки. У першому з них вважалось, що частинки рухаються високо над бар'єром, і тому можна повністю знехтувати кристалічним потенціалом. Дифузія у цьому випадку повністю визначається взаємодією з електронами. Знайдено залежність коефіцієнта дифузії і рухливості частинки від заповнення електронних зон. Формули для рухливості будуть такими

$$\mu = \mu_0 \times \begin{cases} \kappa^2 / \pi \kappa_F^2, & \kappa \gg \kappa_F \\ 2/\pi, & \kappa \ll \kappa_F \end{cases} \quad (26)$$

- у випадку $a\kappa_F \ll 1$, та

$$\mu = .4\mu_0 a\kappa_F \times \begin{cases} 1, & a\kappa \ll 1 \\ 2a^2\kappa^2, & a\kappa \gg 1 \end{cases} \quad (27)$$

- у випадку $a\kappa_F \gg 1$, де $\mu_0 = a_B^2/4h$, $2a$ - розмір міжшарового простору, в якому рухається частинка, κ - обернений радіус екранування заряду в системі двовимірних електронів. Рухливість виявляється немонотонною функцією від імпульса Фермі з мінімумом, положення якого залежить від співвідношення між a і $1/\kappa$.

У другому випадку, який було розглянуто в роботі, вважалось, що дифузія проходить в основному шляхом квантового тунелювання через потенційні бар'єри (випадок низьких температур). В цій ситуації взаємодія з електронами впливає на ймовірність тунелювання. Було знайдено поправку до ймовірності квантового переходу між окремими мінімумами

$$\Delta_{eff} = \Delta_0 \exp\left(-\frac{x_0^2 \hbar \omega_0}{16\pi \kappa_F a^3 E_0}\right) = \Delta_0 \left(1 - \frac{x_0^2 \hbar \omega_0}{16\pi \kappa_F a^3 E_0}\right) \quad (28)$$

де Δ_0 - ймовірність переходу у відсутності взаємодії з електронами, x_0 - відстань між мінімумами потенціалу, ω_0 - частота коливання частинки в мінімумі, $E_0 = \hbar^2/mc^2$.

У шостій главі розглянуто задачу про проходження електронів через контакт двох металів при наявності на поверхні розділу цих металів дефектів або домішок. Такі дефекти і домішки створюють певне двовимірне флукутуюче поле, що впливає на коефіцієнти проходження та віддзеркалення електронів від енергетичного бар'єру на поверхні розділу. Задача стала актуальною останнім часом у зв'язку з відкриттям явища гігантського магнітоопору в магнітних металічних мультішарах. Представлений в дисертаційній роботі розрахунок контактної опору в металічній гетеросистемі базується на використанні кінетичних рівнянь для електронів в кожному з контактуючих матеріалів.

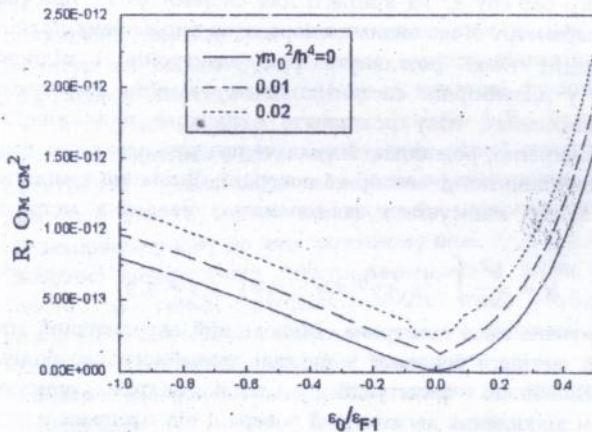


Рис.3. Залежність контактної опору $Cr-Fe$ від ϵ_0 для різних значень параметру γ

Принципова проблема полягає в розробці послідовного метода знаходження граничних умов для функцій розподілу електронів при наявності випадкових полів, що описуються певними кореляторами,

локалізованими на границі розділу металів. У представленому рішенні граничні умови знайдено методом, який був раніше запропонований *Фальковським* для поверхні металу, але цей метод поширено на випадок гетероконтакту. Виявляється, що граничні умови для функцій розподілу електронів мають вигляд кінетичних рівнянь на самій поверхні розділу. Було знайдено рішення всіх рівнянь у першому порядку теорії збурень по кореляторах випадкових полів.

Кінцеві розрахунки контактного опору виконані чисельно з використанням параметрів, що характерні для металічних магнітних мультишарів, таких як *Cr-Fe*, *Cu-Fe* та *Cu-Co*. На рис.3 представлено залежність контактного опору від параметру величини енергетичного бар'єру ϵ_0 на контакті для системи *Cr-Fe* при різних значеннях параметру γ , що визначає корелятор випадкових полів.

У сьомій главі розглянуто рух електронів і відповідну провідність у двовимірній системі, причому замість флуктуючих полів потенціального типу розглянуто випадкове поле кінетичної природи. Конкретно, розглядається задача про рух електрона вздовж випадково викривленої двовимірної поверхні. Вихідний гамільтоніан для такої задачі записується за допомогою введення метричного тензора g^{ij}

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^2x \sqrt{g} g^{ij} (\partial_i \psi^\dagger) (\partial_j \psi), \quad i, j = x, y \quad (29)$$

де m - ефективна маса електрона. Відповідний енергетичний спектр для плоскої метрики береться у вигляді звичайного параболічного спектру. Випадкові флуктуації у такій системі описуються корелятором відхилення двовимірної поверхні від площини у кожній точці (x, y) . Було використано самоузгоджене наближення за методом *Saito*. Показано, що в системі виникає певна ефективна взаємодія електронів з кореляторами флуктуацій метрики. Внесок такої взаємодії у власно-енергетичну частину для електронів може бути представлений за допомогою звичайних діаграм.

Було знайдено транспортний час релаксації електронів, що визначає провідність системи. Ймовірність переходів для електрона з імпульсом \mathbf{k} при зміні імпульса на величину \mathbf{Q} виявляється такою

$$\omega_k(Q) = A \frac{\hbar^3 f_0^4 k^4 \exp(-a^2 Q^2)}{m^2 a^2} \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-Q}) \quad (30)$$

де f_0 - характерний масштаб зміщення поверхні у напрямку вісі z , a - характерний масштаб кореляцій метрики, A - чисельний коефіцієнт. Оцінка величини часу релаксації при $f_0 = 3a_0$, $k = a_0^{-1}$, $a = 10a_0$ (де a_0 - характерний масштаб довжини; для металічної поверхні a_0 - це постійна гратки) дає для металічної поверхні $\tau_k \sim 10^{-12}$ сек.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Розроблено теоретичний апарат для опису низькорозмірних структур на основі вузькозонних напівпровідників типу A_4B_6 . Розраховано енергетичний спектр та хвильові функції електронів в квантовій ямі на основі напівпровідників A_4B_6 . Встановлено, що спектр складається з двох серій рівнів різної симетрії. Знайдено ефективний гамільтоніан для опису електронів та дірок в квантовій ямі, а також електронний енергетичний спектр в перпендикулярному до ями магнітному полі.
2. Знайдено енергетичний спектр електронів і дірок в квантових точках на основі напівпровідників типу A_4B_6 . Показано можливість існування в квантових точках на основі матеріалів із взаємно інвертованими зонами граничних станів, енергія яких попадає в заборонену зону напівпровідника з меншим значенням ширини зони.
3. Розраховано енергетичний спектр домішок і дефектів у вузькій квантовій ямі на основі напівпровідників A_4B_6 . Показано, що домішкові рівні існують при як завгодно малому потенціалі домішки.
4. Побудовано теорію взаємодії магнітних домішок в кристалах, квантових ямах та інверсних гетероконтактах на основі напівпровідників типу A_4B_6 . Показано можливість існування фази спінового скла в кристалах, що дозволило пояснити експериментальні дані. Показано можливість осциляційної магнітної взаємодії в нелегованих об'ємних кристалах з

інвертованим спектром. Знайдено можливі типи магнітного впорядкування в домішкових парах. Досліджено особливості взаємодії магнітних домішок в інверсних гетероконтактах - далекодія та можливість їх феромагнітного впорядкування.

5. Показано існування механізму непрямой взаємодії домішок через обмін фононами з напівпровідниках типу A_2B_2 з сегнето-електричними переходами. Показано, що взаємодія приводить до притягання немагнітних домішок між собою.
6. Показано, що непряма взаємодія через обмін електронами відіграє важливу роль в термодинаміці спінодального розпаду напівпровідникових твердих розчинів, особливо у випадку, коли енергетична щільність в електронному спектрі є малою. Показано, що внесок електронної підсистеми сприяє спінодальному розпаду твердих розчинів на основі вузькозонних напівпровідників.
7. Розраховано дифузійні корелятори і знайдено магнітоопір, що зумовлений квантовими поправками, в тонкій металічній плівці в поодовжньому магнітному полі. Знайдено особливості магнітоопору в тонких плівках, що було підтверджено подальшими експериментами і теоретичними розробками інших авторів.
8. Побудовано загальну теорію кінетичних рівнянь в теорії слабкої локалізації. Знайдено ефективний лагранжیان неупорядкованої системи при наявності зовнішніх електромагнітних полів і фононів, а також кінетичні рівняння для флуктуацій електронних збуджень та парних кореляторів різного типу (дифузонів та куперонів).
9. Проведено розрахунки коефіцієнта дифузії і рухливості частинки, що рухається в низькорозмірній системі в полі анізотропних випадкових сил. Показано, що вплив ефективних кореляцій в системі приводить до того, що закон руху частинки може суттєво відрізнятись від звичайного дифузійного закону.
10. Проведено розрахунки коефіцієнта дифузії та рухливості частинки, що рухається у квазидвовимірному просторі і взаємодіє з електронною підсистемою низької розмірності. Показано можливість аномальної дифузії, пов'язаної виключно із взаємодією інтеркальованих домішок з електронами в шаруватих кристалах при високих температурах.

11. Побудовано теорію проходження електронів через гетероконтакт двох металів з дефектами або домішками, зосередженими на границі розділу. Проведено розрахунки контактної опору для гетеросистем, що складаються з магнітних та немагнітних металів (магнітні мультішари). Показано важливість використання послідовної теорії для розрахунку гігантського магнітоопору в таких системах.
12. Побудовано теорію руху електрона вздовж двовимірної випадково-кривої поверхні. Р. зраховано ймовірності електронних переходів та транспортний час релаксації, пов'язаної з розсіюванням на випадкових викривленнях поверхні.

Основні результати дисертаційної роботи викладені в наступних публікаціях:

1. Литвинов В.И., Дугаев В.К. Особенности магнитной восприимчивости вблизи точки сегнетоэлектрического фазового перехода в узкощелевых полупроводниках типа A_4B_6 // ЖЭТФ. - 1979. - Т.77. - N 1. - С.335-342.
2. Дугаев В.К., Товстюк К.Д. Примесные состояния в узкощелевых полупроводниках типа A_4B_6 // ФТП. - 1980. - Т.14. - N 12. - С.2371-2374.
3. Литвинов В.И., Дугаев В.К. Магнитные свойства экситонного диэлектрика с реальным спектром // ЖЭТФ. - 1981. - Т.81. - N 5. - С.1803-1810.
4. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Tovstyuk K.D. Interaction and spontaneous formation of defects in the vicinity of the phase transition point in crystals // Phys. Lett. A. - 1982. - V.92. - N 4. - P.186-188.
5. Дугаев В.К. Теория примесных состояний в полупроводниках A_4B_6 // Физич. основы полупров. материаловед.-Киев: Наукова думка, 1982.-С.115-126.
6. Дугаев В.К., Хмельницкий Д.Е. Магнитосопротивление металлических пленок при низкой концентрации примесей в

- параллельном магнитном поле // ЖЭТФ. - 1984. - Т.86. - N 5. - С.1784-1790.
7. Дугаев В.К., Хмельницкий Д.Е. *Кинетическое уравнение в теории локализации* // ЖЭТФ. - 1986. - Т.90. - N 5. - С.1871-1884.
 8. Дугаев В.К. *Взаимодействие примесей в полупроводниках, испытывающих структурный фазовый переход* // Физич. основы полупров. материаловед.-Киев: Наукова думка, 1986. - С.116-119.
 9. Дугаев В.К. *Термодинамика взаимодействующих примесей при квазихимических реакциях в твердом теле* // Физ. электроника.- 1987.-N 35.-С 3-7.
 10. Дугаев В.К., Петров П.П. *Косвенное взаимодействие примесей, обладающих дипольным моментом, в бесщелевых полупроводниках* // УФЖ. - 1988. - Т.33. - N 9. - С.1403-1407.
 11. Дугаев В.К., Петров П.П. *Энергетический спектр носителей в узкой квантовой яме в бесщелевом полупроводнике* // ФТП.- 1988. - Т.22. - N 3. - С.519-521.
 12. Дугаев В.К., Петров П.П. *Энергетический спектр носителей, описываемых моделью Дирака, в квантовой яме* // ФТП.-1989.- Т.23. - N 3. - С.488-492.
 13. Dugaev V.K., Petrov P.P. *Spinodal decomposition in semiconductor alloys* // Phys. Stat. Sol. (b).- 1989.- V.153.- N 1.- P.115-122.
 14. Dugaev V.K., Kosyachenko S.V. *Random walks in the presence of oriented random forces*// J. Phys. A.-1989.-V.22.-N 13.-P.2597-2600.
 15. Дугаев В.К., Петров П.П. *Косвенное взаимодействие экранированных диполей в узкощелевых полупроводниках типа A_4B_6* // ФТП. - 1989. - Т.31. - N 8. - С.229-232.
 16. Дугаев В.К., Петров П.П. *Уровни, создаваемые короткодействующим потенциалом примесей, в квантовых ямах на основе полупроводников типа $A_4\bar{B}_6$* // ФТП.-1989.-Т.23.- N 12. - С.2238-2240.
 17. Dugaev V.K., Litvinov V.I. *Low-temperature spin glass in IV-VI semimagnetic semiconductors* // Phys. Rev. B.- 1990.- V.41. - N 1.- P.788-790.
 18. Dugaev V.K., Tovstyuk K.D. *Particularities of diffusion in two-dimensional systems with random forces* // Phys. Stat. Sol. (b)- 1990. - V.160. - N 1. - P.415-422.

19. Дугаев В.К., Петров П.П. *Неустойчивости в системе примесей с взаимодействием, обусловленным фононным обменом* // УФЖ. - 1990. - Т.35. - N 9. - С.1381-1385.
20. Дугаев В.К., Литвинов В.И. *Взаимодействие магнитных примесей в халькогенидах свинца и полуманитных полупроводниках на их основе* // Неорг. матер. - 1992. - Т.28. - N 12. - С.2317-2321.
21. Дугаев В.К., Литвинов В.И., Петров П.П. *Электронный энергетический спектр в квантовых точках для халькогенидов свинца и их твердых растворов* // Неорг. матер. - 1992. - Т.28. - N 12. - С.2327-2330.
22. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Petrov P.P., Mironov O.A., Naschekina O.N., Oszwaldowski M. *Energy spectrum in quantum dots of lead and tin chalcogenides semiconducting compounds* // Acta Phys. Polon. A. - 1992. - V.82. - N 5. - P.797-780.
23. Dugaev V.K., Petrov P.P., Mironov O.A., Oszwaldowski M. *Energy spectrum in quantum dots of IV-VI narrow-gap semiconductors* // Semicond. Sci. Technol. - 1993. - V.8. - N 1. - P.252-254.
24. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Oszwaldowski M. *Direct exchange in band-inverted heterojunctions of IV-VI semimagnetic compounds* // Acta Phys. Polon. A. - 1993. - V.84. - N 4. - P.709-712.
25. Dugaev V.K., Petrov P.P. *Electron energy spectrum and wave functions in quantum wells on the base of IV-VI narrow-gap semiconductors* // Phys. Stat. Sol. (b). - 1994. - V.184. - N 2. - P.347-354.
26. Litvinov V.I., Dugaev V.K., Oszwaldowski M. *Deformation potentials in IV-VI quantum wells* // Acta Phys. Polon. A. - 1995. - V.87. - N 2. - P.345-348.
27. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Petrov P.P. *Magnetic impurity interactions in a quantum well on the base of IV-VI semiconductors* // Superlatt. and Microstruct. - 1994. - V.16. - N 4. - P.413-417.
28. Дугаев В.К., Петров П.П. *Диффузия ионов в иоистом кристалле* // ФТТ. - 1995. - Т.37. - N 2. - С.318-323.

29. Dugaev V.K., Petrov P.P. *Motion of electrons along a randomly curved surface* // Phys. Lett. A. - 1995. - V.199. - N 5/6. - P.339-343.
30. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Petrov P.P. *Electric current transmission through the contact of two metals* // Phys. Rev. B. - 1995. - V.52. - N 7. - P.5306-5312.
31. Dugaev V.K., Litvinov V.I., Petrov P.P. *Magnetic impurity in a quantum well of IV-VI narrow-gap semiconductors* // Semicond. Sci. Technol. - 1996. - V.11. - N 1. P.80-83.

Ключові слова: вузькозонні напівпровідники, низькорозмірні структури, магнітні домішки, квантові ями, локалізаційні поправки, магнітні мультішари, дифузія, кореляції в домішкових системах.

Дугаев В.К. Корреляции и примеси в узкозонных полупроводниках и низкоразмерных структурах.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 - физика полупроводников и диэлектриков; Черновицкий государственный университет, Черновцы, 1996.

Защищается 31 научная работа, содержащая исследования корреляций в электронных системах с примесями и дефектами. Основным объектом исследований являются узкощелевые полупроводники с релятивистским спектром типа A_4B_6 , квантовые ямы на основе этих полупроводников и их твердых растворов, двумерные и квазидвумерные системы, слоистые кристаллы и гетеропереходы. Построена теория электронного спектра в квантовых ямах и квантовых точках на основе полупроводников A_4B_6 . Рассмотрены особенности магнитных взаимодействий в полупроводниках с релятивистским спектром, квантовых ямах и инверсных гетероконтактах на их основе. Показана возможность состояния спинового стекла в таких системах. Показана существенная роль взаимодействия примесей с электронной системой для процессов спиноподобного распада в полупроводниковых твердых растворах, показана возможность распада твердых растворов в полупроводниковых системах на основе узкощелевых полупроводников, в особенности для низкоразмерных систем. Проведены расчеты магнетосопротивления, обусловленного квантовыми поправками к проводимости, в тонких пленках с примесями. Построена теория кинетического уравнения в теории слабой локализации, получены уравнения для диффузиев и куперонов при наличии внешних электромагнитных полей и релаксации через фононы. Построена теория эффективных корреляций в низкоразмерных системах с диффундирующими примесями при наличии флуктуирующих случайных полей. Найден отклонения от стандартного закона диффузии, проведены расчеты эффективного коэффициента диффузии. Построена теория прохождения тока через контакт двух различных металлов с примесями на границе раздела, проведены расчеты контактного сопротивления. Предложена теория движения электрона по случайно-кривой поверхности. Рассчитаны вероятности переходов и транспортное время релаксации электронов.

Dugaev V.K. Correlations and Impurities in Small-Gap Semiconductors and Low-Dimensional Structures.

Thesis on search of a scientific degree of the doctor of physical and mathematical sciences on a speciality 01.04.10 - Physics of Semiconductors and Dielectrics; Chernivtsy State University, Chernivtsy, 1996.

31 scientific papers containing researches of correlations in electronic systems with impurities and defects are under discussion. The main object of researches are IV-VI small-gap semiconductors with relativistic spectrum, quantum wells on the base of these semiconductors, two-dimensional and quasi-two-dimensional systems, layered crystals and heterojunctions. A theory of electronic spectrum in quantum wells and quantum dots on the base of IV-VI semiconductors is developed. Particularities of magnetic interactions in semiconductors with relativistic spectrum, quantum wells and inverted heterojunctions on their base are discussed. The possibility of a spin glass state is established for such systems. The relevant role of the interaction between impurities and an electron system is found for the spinodal decay in semiconductor solid solutions, and the possibility of decomposition in small-gap semiconductor solid solutions is shown, especially for low-dimensional systems. Calculations of magnetoconductivity caused by quantum corrections to conductivity in thin films with impurities are performed. A theory of kinetic equation in the weak localization approach is developed, as well as the equations for diffusions and cooperons in the presence of an external electromagnetic field and phonon relaxations are presented. A theory of effective correlations in low-dimensional systems with diffusive impurities and fluctuating random fields is constructed. The deviations from the conventional diffusion law are found, and the calculations of effective diffusion coefficients are made. A theory of electric-current transmission through the contact of two different metals with impurities at the interface is developed, and the calculations of contact resistance are performed. A theory of the motion of electrons along a randomly curved surface is presented. Transition probabilities and the electron transport relaxation time are calculated.

Підписано до друку 25.10.96.
Формат 60 x 84/16.
Папір друкарський.
Друк офсетний. Умовн. друк. арк. 1,9.
Обл.-вид. арк. 1,5. Тираж 100 прим.
Замовлення №

Відділ поліграфії Чернівецького ЦНТІ.
Чернівці, вул. Університетська, 23, т. 2-25-78.

AB 35.948