F 2м

BAKI UNİVERSİTETİNİN XƏBƏRLƏRİ

ВЕСТНИК БАКИНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

NEWS OF BAKU UNIVERSITY

BDU 1919

FİZİKA-RİYAZİYYAT *elmləri seriyası*

серия **ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

series of **PHYSICO-MATHEMATICAL SCIENCES**

1

2018

UOT 538.97; 539.23

İNVERS ZONALI YARIMKEÇİRİCİ ƏSASLI KVANT QUYUSUNDA ELEKTORUNUN ENERJİ SPEKTRİ VƏ HAL SIXLIĞI

T.H.İSMAYILOV*, S.İ.ZEYNALOVA**
**Bakı Dövlət Universiteti, **AMEA Fizika İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti*
tariyel.i@gmail.com, sebine-zeynalova@mail.ru

İkizonalı Keyn modelində invers zonalı yarımkeçirici əsaslı kvant quyusunda sonsuz dərin quyu yaxınlaşmasında elektronun enerji spektri və hal sıxlığı hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, hal sıxlığı üçün alınmış qadağan zolağından (ε_g) asılı ümumi ifadədən $\varepsilon_g \to \infty$ (parabolik hal) və $\varepsilon_g \to 0$ (Dirak materialı halı) halları alınır. Hər bir hal üçün hal sıxlığının enerjidən asılılıq əyrisi qurulmuşdur.

Açar sözlər: invers zonalı yarımkeçirici, ikizonalı Keyn modeli, kvant quyusu, hal sıxlığı.

Bir sıra yarımkeçirici, məsələn, HgTe, α-Sn, $Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x<0,15), invers zonalı yarımkeçiricilərdir və ZnS tipli kristal simmetriyasına malikdirlər. Əslində bu kristallara yarımmetal da demək olar, belə ki, bunların elektrik keçiriciliyi normal zona quruluşlu yarımkeçiricilərlə müqayisədə çox böyükdür [1-3]. Həcmi HgTe yarımmetal olduğu halda onun əsasında alınan kvant quyusunda (və ya kvant təbəqəsində) simmetriyanın aşağı düşməsi nəticəsində keçirici zona (c) ilə ağır deşiklər (h) zonasının Brillüen zonasının mərkəzindəki cırlaşması aradan qalxır və onlar arasında qadağan zolağı yaranır. Nəticədə o, topoloji izolyatora çevrilir. Bunu CdTe- HgTe -CdTe kvant quyusunda və ya HgTe kvant təbəqəsində birbaşa "görmək" olar [4-7].

Bu işdə ikizonalı Keyn modelində[8,1-3] invers zonalı yarımkeçirici əsaslı kvant quyusunda sonsuz dərin quyu yaxınlaşmasında elektronun enerji spektrinin qadağan zolağının enindən asılı ümumi ifadəsi alınımış və ona uyğun hal sıxlığı hesablanmışdır. Göstərilmişdir ki, hal sıxlığı üçün alınmış qadağan zolağından (ε_g) asılı ümumi ifadədən $\varepsilon_g \to \infty$ (parabolik hal) və $\varepsilon_g \to 0$ (Dirak materialı halı). Hər bir halda hal sıxlığının enerjidən asılılığı qurulmuşdur.

Enerji spektri

Kvant quyusunda elektronun enerji spektrini hesablamaq üçün Şredinger tənliyini yazaq:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = \varepsilon\psi(\vec{r}) \tag{1}$$

harada

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\times\nabla V)\vec{P} + U(z) \tag{2}$$

$\vec{P}$-elektronun impulsu, $\vec{\sigma}$-Pauli operatoru, $V(\vec{r})$- kristalın periodik potensialıdır. U(z)-quyunun potensialıdır (z oxu ikiölçülü lay müstəvisinə perpendikulyardır). (2) tənliyinin həllini

$$\Psi(r) = \sum_{l=1}^{8} u_l(\vec{r}) f_l(\vec{r}) \tag{3}$$

şəklində axtaraq. Burada $f_l(\vec{r})$- zəif dəyişən (bürüyücü) funksiyadır, $u_l(\vec{r})$ Lattincer-Kon amplitudlarıdır [9]. Kifayət qədər enli quyu halında (yəni Na >>1, harada a- qəfəs sabiti, N-z oxu istiqamətindəki kristal müstəvilərinin sayıdır) $\vec{k}\cdot\vec{p}$ yaxınlaşmasından istifadə etmək olar. (3)-ü (1)-də yerinə yazıb, müvafiq hesablamaları aparsaq, alarıq ki,

$$\sum_l \left\{ \left(\frac{\vec{P}^2}{2m_0} + \varepsilon_{l,o} - \varepsilon + U \right)\delta_{l'l} + P_{l'l}\vec{k} + \left[\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\times\nabla V)\vec{P} \right]_{l'l} \right\} f_l(\vec{r}) = 0 \tag{4}$$

Harada: $\varepsilon_{l,o}$

$$\left[\frac{\vec{P}^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\times\nabla V) \right] u_{l,0}(\vec{r}) = \varepsilon_{l,0} u_{l,0}(\vec{r}) \tag{5}$$

tənliyinin həllidir və burada $u_l(\vec{r}+\vec{a}) = u_l(\vec{r})$, $\frac{1}{\Omega}\langle u_{l'} \mid u_l \rangle = \delta_{l'l}$

$$\vec{P}_{l'l} = \frac{\hbar}{m_0}\langle u_{l'} \mid \vec{P} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma}\times\nabla V) \mid u_l \rangle \tag{6}$$

Ω – elementar özəyin həcmidir.

(5) tənliyinin həlləri olan $u_{l,0}(\vec{r})$-lər Brillüen zonasının mərkəzinə uyğun məlum funksiyalarıdır [8].

(4) tənliyinin həllini

$$f_l = e^{i(k_x x + k_y y)} \cdot \varphi_l(z) \tag{7}$$

şəklində axtaraq. (7)-nu (4)-də yerinə yazıb müvafiq çevrilmələr aparsaq, $\varphi_l(z)$ üçün aşağıdakı (8) tənliyi alarıq:

$$\begin{vmatrix}
-\varepsilon-\varepsilon_g+U & 0 & \frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_z & -\frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & 0 & \frac{P\hat{k}_z}{\sqrt{3}} & \frac{Pk_-}{\sqrt{2}} \\
0 & -\varepsilon-\varepsilon_g+U & 0 & \frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & & \frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} & \frac{P\hat{k}_z}{\sqrt{3}} \\
\frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & 0 & -\varepsilon+U & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_z & \frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & 0 & -\varepsilon+U & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-\frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hat{k}_z & 0 & 0 & -\varepsilon+U & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon+U & 0 & 0 \\
\frac{P\hat{k}_z}{\sqrt{3}} & -\frac{Pk_+}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta-\varepsilon+U & 0 \\
\frac{Pk_-}{\sqrt{3}} & \frac{P\hat{k}_z}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta-\varepsilon+U
\end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \\ \varphi_5 \\ \varphi_6 \\ \varphi_7 \\ \varphi_8 \end{vmatrix} = 0 \tag{8}$$

Bu tənlikdə

$$P = \frac{i\hbar}{m_0}\langle S|P_z|z\rangle \text{ Keyn sabiti, } k_z = -i\frac{\partial}{\partial z}, \quad k_\pm = k_x \pm ik_y \tag{9}$$

Axırıncı altı tənlikdən $\varphi_3, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_6$-nı φ_1 və φ_2 vasitəsilə ifadə edib, birinci iki tənlikdə yerinə yazsaq, kifayət qədər mürəkkəb tənliklər sistemi alınır. Sadəlik üçün ikizonalı modelə baxaq, yəni o hala ki, $\Delta\to\infty$ (HgTe üçün). Onda tənliklər sistemi bu şəkildə olur:

$$\begin{cases}
\left\{ -\varepsilon - \varepsilon_g + U + \frac{2P^2}{3}\cdot\frac{k_\perp^2+\hat{k}_z^2}{(\varepsilon-U)} + \frac{2P^2}{3}\cdot\frac{\hat{k}_z U \hat{k}_z}{(\varepsilon-U)^2} \right\}\varphi_1 + \frac{\sqrt{2}}{3}\cdot\frac{P^2\hat{k}_+ U \hat{k}_z}{(\varepsilon-U)^2}\varphi_2 = 0 \\
\left\{ -\varepsilon - \varepsilon_g + U + \frac{2P^2}{3}\cdot\frac{k_\perp^2+\hat{k}_z^2}{\varepsilon-U} + \frac{2P^2}{3}\cdot\frac{\hat{k}_z U \hat{k}_z}{(\varepsilon-U)^2} \right\}\varphi_2 - \frac{\sqrt{2}}{3}\cdot\frac{P^2\hat{k}_- U \hat{k}_z}{(\varepsilon-U)^2}\varphi_1 = 0
\end{cases} \tag{10}$$

Bu sistemin ümumi halda ixtiyari U(z) potensialı üçün həlli praktik olaraq mümkün deyil. Ona görə də konkret həllər almaq üçün U(z) potensialı üçün aşkar bir ifadə seçməliyik. Ən sadə halda sonsuz dərin quyu potensialını götürmək olar. Yəni

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & z < 0 \\ 0, & 0 \le z \le d \\ \infty, & z > d \end{cases} \tag{11}$$

olsun. Bu potensial modeli kvant təbəqələrində və kvant heterostrukturlarında reallaşır. Belə sonsuz dərin quyu modelində (10) tənliklər sistemi aşağıdakı şəklə düşür:

$$\frac{d^2\varphi_{1,2}}{dz^2}+\alpha^2\varphi_{1,2}=0 \qquad (12)$$

Harada: $$\alpha^2=\frac{3}{2P^2}\varepsilon(\varepsilon+\varepsilon_g)-k_\perp^2=0 \qquad (13)$$

Fərz etsək ki, ikiölçülü layın eni d qəfəs sabitindən (a_0) çox-çox böyükdür, yəni d>>a$_0$, başqa sözlə, $d=Na_0$ (harada N-elementar özəklərin sayıdır). Onda alarıq ki,

$$\varepsilon_j=-\frac{\varepsilon_g}{2}\pm\sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4}+\frac{2}{3}P^2\left(k_\perp^2+\alpha_j^2\right)} \qquad \alpha_j=\frac{\pi n_j}{d} \qquad n_j=1,2... \qquad (14)$$

(14)-də kvadrat kökün qabağındakı (+) işarəsi keçiricilik zonasına, (-) işarəsi isə yüngül deşiklər zonasına aiddir.

Aldığımız enerji spektrindən istifadə edərək hal sıxlığını hesablayaq:

Hal sıxlığı

Hal sıxlığı aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$g(\varepsilon)=\sum_\nu\delta(\varepsilon-\varepsilon_\nu) \qquad (15)$$

ε_ν -yükdaşıyıcının (elektronun) enerjisidir. ν – kvant ədədlərinin toplusudur.

(14)-dən elektronun enerji spektri üçün

$$\varepsilon_\nu=-\frac{\varepsilon_g}{2}+\sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4}+\frac{2}{3}P^2k_\perp^2+\varepsilon_0^2n^2} \qquad (16)$$

$\nu\equiv\{k_\perp,n,\sigma\}$; σ- elektronun spinidir, $k_\perp^2=k_x^2+k_y^2$, $\varepsilon_0=\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\pi P}{d}$, d-quyunun enidir, n=1,2,3,..., və $P^2=\frac{3}{4}\frac{\hbar\varepsilon_g}{m^*}$ – Keyn sabitidir. m^*-yükdaşıyıcının (elektronun) effektiv kütləsi, ε_g-həcmi yarımkeçirici üçün qadağan zolağının enidir. (16)-nı (15)-də nəzərə alıb $\vec{k}_\perp$ – a görə cəmdən inteqrala keçək. Yəni

$$\sum_\nu ...\to\sum_n\int\frac{2d\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}... \qquad (17)$$

Burada 2-vuruğu spinə görə ikiqat cırlaşmanı nəzərə alır. Onda

$$g(\varepsilon)=\sum_n\int\frac{2d\vec{k}_\perp}{(2\pi)^2}\delta\left(\varepsilon-\sqrt{\frac{\varepsilon_g^2}{4}+\frac{2}{3}P^2k_\perp^2+\varepsilon_0^2n^2}+\frac{\varepsilon_g}{2}\right) \qquad (18)$$

(18)-də $\vec{k}_\perp$-a görə inteqrallamadan enerjiyə görə inteqrallamaya keçib,δ-funksiyanın $\delta(\varphi(x))=\sum_i\frac{\delta(x-x_i)}{|\varphi'(x_i)|}$ xassəsindən istifadə edək. Burada x_i $\varphi(x_i)=0$ tənliyinin kökləridir. Bir sıra sadə çevirmələrdən sonra hal sıxlığı üçün aşağıdakı ifadəni alarıq:

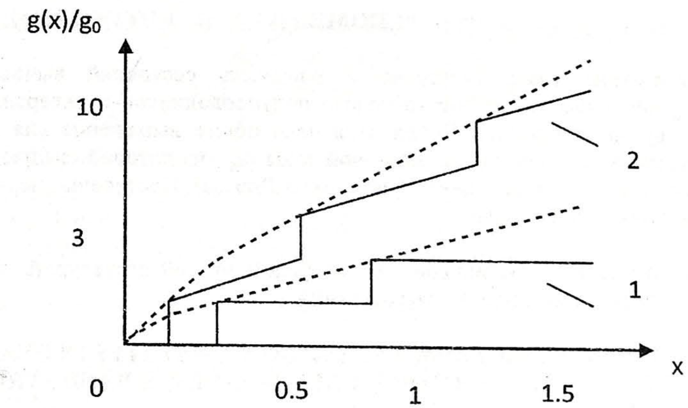
$$g(\varepsilon)=\frac{3}{4\pi P^2}(2\varepsilon+\varepsilon_g)\sum_n\theta\left\{\left[\left(\varepsilon+\frac{\varepsilon_g}{2}\right)^2-\left(\frac{\varepsilon_g^2}{4}+\varepsilon_0^2n^2\right)\right]\right\} \qquad (19)$$

Burada θ-Hevisayd funksiyasıdır.

(19) ifadəsindən $\varepsilon_g\to\infty$ limitində parabolik hal üçün olan ifadə alınır, $\varepsilon_g\to0$ olduqda (Dirak materialı) isə

$$g(\varepsilon)=\frac{3}{2\pi P^2}\varepsilon\sum_n\theta(\varepsilon-\varepsilon_0n^2) \qquad (20)$$

olacaq.



Şək.1.

Şəkil 1-də (19) ifadəsi əsasında hal sıxlığının enerjidən asılılıq əyriləri verilmişdir. Şəkildən görünür ki, qeyri-parabolik halda hal sıxlığı parabolik haldakından kəskin fərqlənir. Birincisi odur ki, astana enerjisi kiçik enerjilər tərəfə sürüşür. İkincisi isə odur ki, parabolik halda eyni ölçü zonasının (altzonanın) daxilində $g(\varepsilon)$ hal sıxlığı sabit olaraq qaldığı halda, qeyri-parabolik spektrdə $g(\varepsilon)$ xətti olaraq artır (enerjinin artması ilə). Üçüncü fərq isə odur ki, qeyri-parabolik halda hal sıxlığı enerjinin artması ilə daha çox artır (qiymətcə).

ƏDƏBİYYAT

1. I. M. Tsidilkovski. In Electron Spectrum of Gapless Semiconductors, K. von Klitzing ed., Springer Series in Solid-State Sciences. v. 116, Springer, New York (1996)
2. Цидильковский И.М. Зонная структура полупроводников. М.: Наука, 1978.
3. Nimtz G., Schlicht B. Narrow-Gap Lead Salts // Narrow-Gap Semiconductors. Springer Berlin Heidelberg, 1983, v. 98 of Springer Tracts in Modern Physics, p. 1–117
4. Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: Topological Insulators // Rev. Mod. Phys. 2010, v. 82, No. 4, p. 3045.
5. Konig M., Wiedmann S., Brune C. et al. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells // Science. 2007, v. 318, No. 5851, p. 766.

6. François Virot, Roland Hayn, Manuel Richter and Jeroen van den Brink. 2013Engineering Topological Surface States: HgS, HgSe, and HgTe PRL 111, 146803 (2013)
7. Wang, X., Dou, S. Xue. & Zhang, C. (2010). Zero-Gap Materials for Future Spintronics, Electronics and Optics. NPG Asia Materials, 2 (1), 31-38.
8. E.O.Kane. Band Structure of Indium Antimonide. J.Phys.Chem.Solids, 1. 249-261(1957)
9. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields // Phys. Rev. 1955, v. 97, p. 869.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В КВАНТОВОЙ ЯМЕ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКА С ИНВЕРСНОЙ ЗОНОЙ

Т.Г.ИСМАИЛОВ, С.И.ЗЕЙНАЛОВА

РЕЗЮМЕ

Энергетический спектр электрона и плотность состояний вычисляются в бесконечно глубокой квантовой яме на основе полупроводников с инверсной зонной структурой в двухзонной модели Кейна. Получено общее выражение для плотности состояний, зависящих от ширины запрещенной зоны *(ε_g)*, из которой следуют пределы $\varepsilon_g \to \infty$ (параболический случай) и $\varepsilon_g \to 0$ (материалы Дирака). Построены энергетические зависимости плотности состоянию.

Ключевые слова: полупроводник с инверсной зонной структурой, двухзонная модель Кейна, квантовая яма, плотность состояний.

ELECTRON ENERGY SPECTRUM AND DENSITY OF STATES IN QUANTUM WELL BASED ON SEMICONDUCTOR WITH THE INVERSE BAND STRUCTURE

T.H.ISMAYILOV, S.I.ZEYNALOVA

SUMMARY

The electron's energy spectrum and the density of states are calculated in the infinitely deep quantum well based on semiconductors with the inverted band structure in the two-band Kane model. The general expression for the density of states depending on the band gap (ε_g) is obtained, from which the $\varepsilon_g \to \infty$ (parabolic case) and $\varepsilon_g \to 0$ (Dirac's materials) limits follow. The energy dependence of the density of states is plotted for each case.

Key words: semiconductor with inverse band structure, two-band Kane model, quantum well, density of states.

Redaksiyaya daxil oldu: 12.02.2018-ci il
Çapa imzalandı: 09.04.2018-ci il