

UDK 593.293.011,
PACS: 71.23AN, 71.55Ht

LAYLI GESE KRİSTALININ SƏTH ELEKTRON SPEKTRİNİN QRIN FUNKSİYASI METODU İLƏ TƏDQIQI

Z.A.CAHANGİRLİ^{*,**}, S.A.NƏBİYEVA^{*}, T.O.BAYRAMOVA^{***}

^{*}AMEA Fizika İnstitutu, ^{**}Azərbaycan Texniki Universiteti

^{***3}Bakı Dövlət Universiteti

zakircahangirli@yahoo.com

GeSe kristalının laylara perpendikulyar (010) səthinin elektron spektri Atom Orbitallarının Xətti Kombinasiyası (AOXK) bazisindən istifadə edərək Qrin funksiyası metodu ilə hesablanmışdır. Səthin yaranması nəticəsində qadağan zolağında yaranan enerji səviyyələri, onların genezisi, orbital tərkibi, rezonans və hal sıxlığının lokal dəyişməsi müzakirə olunmuşdur.

Açar sözlər: vakansiya, nöqtəvi defektlər, rezonanslar, antirezonanslar.

Hal-hazırda elektronikada istifadə olunan müxtəlif elementlərin ölçüsü çox kiçildiyindən səth effektləri onların elektrik və optik xassələrində özünü daha qabarıq göstərir. Ona görə səth səviyyələrinin öyrənilməsi yarımkeçiricilərin optik xarakteristikaları haqqında mühüm məlumat almağa imkan verir. Yarımkeçiricilərdə dərin aşqar səviyyələrinin, nöqtəvi defektlərin elektron strukturunun və səth səviyyələrinin tədqiq olunmasında Qrin funksiyası metodu geniş tətbiq olunur.

Bu məqalədə GeSe kristalının (010) səthinin elektron spektri Qrin funksiyası metodu ilə hesablanmışdır. Qrin funksiyası metodu [1,2] kristala defekt daxil etdikdə qadağan zolağında yaranan lokal enerji səviyyələrini, onların dalğa funksiyasını, elektron yük paylanmasını birbaşa təyin etməyə imkan verir. GeSe - tip kristallar kimyəvi əlaqələrin və fiziki xassələrin güclü anizotropiyasına [3-5], həmçinin elektron cihazlarında potensial istifadə imkanlarına görə böyük elmi maraq kəsb edir.

Əvvəlcə, ideal sonsuz kristalın zona quruluşunu və yük sıxlığını düzgün hesablamağa imkan verən AOXK bazisi təyin olunmuşdur. Sonra həmin funksiyalar Qrin operatorunu $G^0(E)$ və V kristal potensialını matris formasında göstərmək üçün istifadə olunmuşdur. AOXK ideal kristalda kimyəvi əlaqələri təyin etməyə imkan verdiyindən, həmin funksiyalar defekt səviyyələrini də araşdırmağa imkan verir. İdeal kristalın və həyəcanlanmış kristalın enerji spek-

trinin eyni funksiyalar bazisindən istifadə edərək hesablanması istifadə olunan operatorların matris formasında göstərilməsini asanlaşdırır.

AOXK-dan istifadə edərək ideal kristalın zona quruluşunu təyin etmək üçün elementar qəfəsdə lokallaşmış $\varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{\tau}_V)$ funksiyalarından istifadə edək, burada $\vec{\tau}_V$ -elementar qəfəsdə atomların bazis vektorları, α -s-, p- və d-orbitallardır. Bu lokallaşmış orbitallardan Blox funksiyaları [6] düzəldək və ideal kristalın H^0 hamiltonianının məxsusi qiymətlərini və məxsusi funksiyalarını təyin edək,

$$\chi_{\vec{k}}^{\alpha\nu}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j + \vec{\tau}_V)} \varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{R}_j - \vec{\tau}_V), \quad (1)$$

Burada R_j qəfəsin translyasiya vektoru, N -elementar qəfəslərin sayıdır. Onda Blox funksiyası,

$$\psi_{n\vec{k}}^0(\vec{r}) = \sum_{\alpha\nu} C_{\alpha\nu}^n(\vec{k}) \chi_{\vec{k}}^{\alpha\nu}(\vec{r}) \quad (2)$$

$\langle \chi_{\vec{k}}^{\alpha\nu} | H^0 | \chi_{\vec{k}}^{\alpha'\nu'} \rangle$ sekulyar matrisini hər bir \vec{k} nöqtəsində diaqonallaşdıraraq, $E_{n\vec{k}}^0$ məxsusi qiymətlərini və məxsusi funksiyalarını təyin edirik.

Kristalın səthinə translyasiya simmetriyasına malik ikiölçülü defekt kimi baxmaq olar. Səth səviyyələrini təyin etmək üçün yuxarıda göstərilən lokallaşmış funksiyalardan lay orbitalları təşkil edək. İkiölçülü periodiklik saxlandığından, ikiölçülü tərs qəfəsdə \vec{q} vektorları yaxşı təyin olunmuş kvant ədədləridir. Lay orbitallarını aşağıdakı kimi təyin edək [7],

$$\phi_{\vec{q}}^{\alpha m \nu}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_2}} \sum_j e^{i\vec{q} \cdot (\vec{\rho}_j + \vec{\lambda}_V^m)} \varphi_{\alpha}(\vec{r} - \vec{\rho}_j - \vec{\lambda}_V^m), \quad (3)$$

Burada ρ_j - ikiölçülü qəfəsin translyasiya vektorları, λ_V - atomların ikiölçülü elementar qəfəsdə bazis vektorları, N_2 – ikiölçülü elementar qəfəslərin sayıdır. m indeksi müxtəlif atom müstəvilərini, ν isə bu müstəvilərdə müxtəlif atomları göstərir. Sadəlik üçün $l = \alpha m \nu$ - kollektiv indeksini daxil edək. Onda həyəcanlaşmış sistem üçün dalğa funksiyaları,

$$\psi_{s\vec{q}}(\vec{r}) = \sum_l A_{sq}^l \phi_{\vec{q}}^l(\vec{r}), \quad (4)$$

$s - \vec{q}$ nöqtəsində səviyyənin nömrəsidir. Lay orbitalları təsvirində $G^0(E)$ Qrin funksiyasının matris elementi,

$$G_{ll'}^0(E, \vec{q}) = \sum_{nk} \frac{\langle l\vec{q}|nk\rangle \langle nk|l'\vec{q}\rangle}{E^+ - E_n(k)}, \quad (5)$$

$|n, \vec{k}\rangle$ - Blox funksiyası, $|l, \vec{q}\rangle$ - lay orbitalları. Determinantı sıfıra bərabər edərək səthə proyeksiyalanmış enerji aralıqlarında və enerji “cibciklərində” lokal səviyyələri təyin edək,

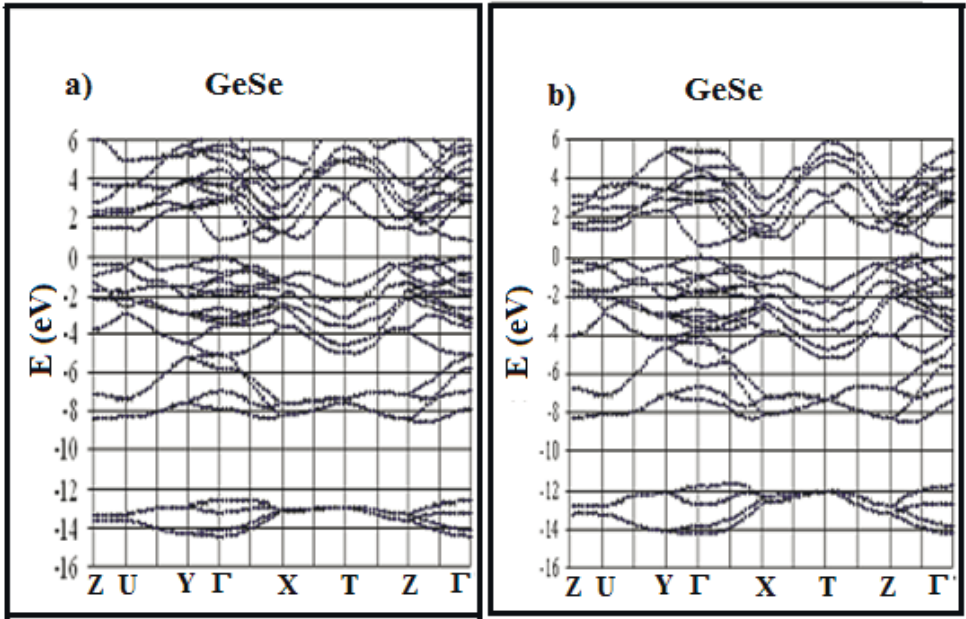
$$\tilde{D}(E) = \det \left\| G_{ll'}^0(E, \vec{q}) \right\| = 0, \quad (6)$$

burada l və l' lazımi səthi almaq üçün uzaqlaşdırılmış səthlər üzrə dəyişir.

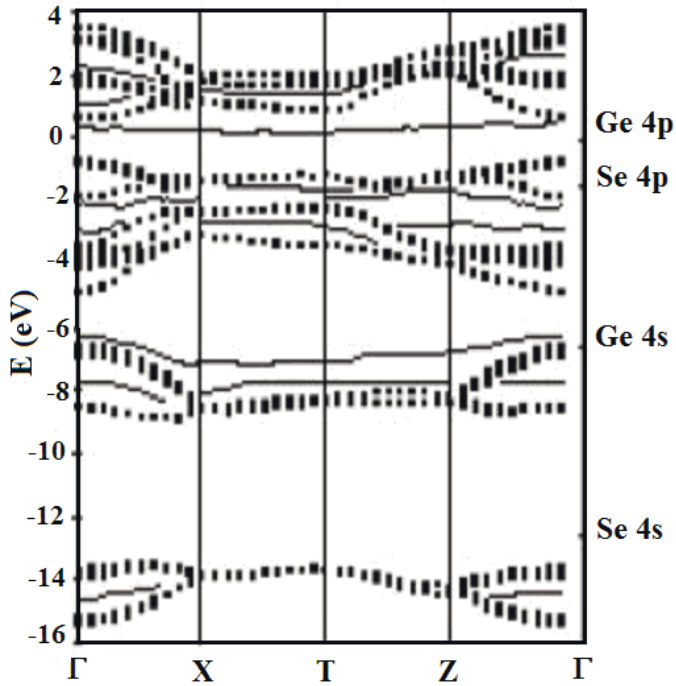
GeSe kristalının *s*-, *p*- və *d*- bazislərində AOXX vasitəsilə, psevdopotensial metodu ilə hesablanmış zona quruluşu şəkil 1-də göstərilmişdir. Şəkil 1-dən görüldüyü kimi, *GeSe*-nin zona quruluşu üç qrupdan ibarətdir. Zonaların xarakterik cüt-cüt yerləşməsi kristalın laylı olmasından irəli gəlir. Dalğa funksiyalarının analizindən alınır ki, digər qruplardan energetik 6 eV məsafədə yerləşən ən aşağı qrup anionun *s*- halından törəmişdir. -8 eV ətrafında yerləşən növbəti qrup *Ge* atomunun *s*- halları ilə bağlıdır. Valent zonasının təpəsindən -6 eV ətrafında yerləşən on iki enerji səviyyəsindən təşkil olunmuş ən yuxarı qrup kation və anionun *p*-səviyyələrindən əmələ gəlir. Valent səviyyələrinin genezisinin analizi fotoemissiya spektri [8] ilə yaxşı uzlaşır.

İdeal kristalda səth əmələ gətirdikdə qadağan zolağında lokal səviyyələr yaranır, zonalar daxilində isə energetik hal sıxlığı dəyişir. *GeSe* kristalı üçün (010) səthə proyeksiyalanmış zona quruluşu şəkil 2-də göstərilmişdir. Şəkil 2-dən görüldüyü kimi fundamental qadağan zolağında lokallaşmış bir səth səviyyəsi mövcuddur və demək olar ki, dispersiyasızdır. Şəkil 3-də *Ge* atomu ilə qurtaran (010) səthində lokal hal sıxlığı və ilk altı layda lokal hal sıxlığının dəyişməsi göstərilmişdir.

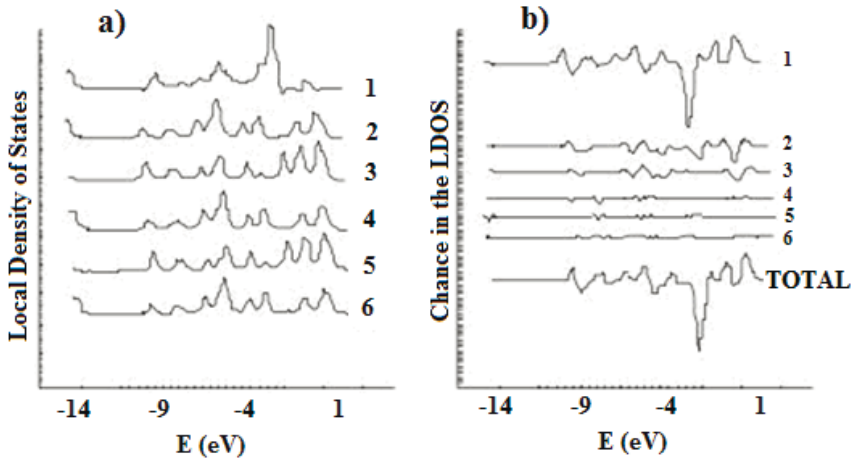
Şəkil 3-dən görünür ki, demək olar ki, bütün hallar yüksək dərəcədə lokallaşmışdır və üçüncü laydan sonra lokal hal sıxlığı həcmi ideal kristalın hal sıxlığı ilə üst-üstə düşür. Bu ondan irəli gəlir ki, *GeSe* kristalında laylar bir-birindən uzaq yerləşmişlər və zəif Van der Waals qarşılıqlı təsiri ilə əlaqəlidirlər. -14.5 eV ətrafında yerləşən energetik cibcikdə (şəkil 2) səth səviyyələri meydana gəlmişdir. İki layda lokallaşmış bu səviyyələr oxşar dispersiya nümayiş etdirirlər və tamamilə valent səviyyələrindən əmələ gəlmişlər. -7 eV ətrafında *Ge* atomunun *s*- orbitalından əmələ gəlmiş iki lokal səviyyə mövcuddur.



Şək. 1. GeSe-nin a- psevdopotensial, b- AOKK vasitəsilə hesablanmış zona quruluşu.



Şək. 2. GeSe kristalı üçün (010) səthinə proyeksiyalanmış zona quruluşu.



Şək. 3. Ge atomu ilə gurtaran (010) səthində a- lokal hal sıxlığı və b- ilk altı layda lokal hal sıxlığının dəyişməsi.

Bu bir daha onu göstərir ki, səth səviyyələrinin xarakteri və energetik vəziyyəti birinci layda yerləşən atomun təbiətindən asılıdır. Dalğa funksiyalarının amplitudlarının orbital tərkibi göstərir ki, -7 eV ətrafında yerləşən səth səviyyələri ilk üç lay daxilində güclü lokallaşmışdır və s-, p_x - orbitallarından törəmişdir. Bu ideal kristalda -7 eV ətrafındakı səviyyələrin əsasən kation orbitallarından təşkil olunması faktı ilə uyğunluq təşkil edir.

GeSe kristalının laylara perpendikulyar (010) səthinin elektron spektri Qrin funksiyası metodu ilə hesablanmışdır. Dalğa funksiyalarının ayrılışında bazis kimi Atom Orbitallarının Xətti Kombinasiyasından istifadə edilmişdir. Hesablamalar göstərir ki, fundamental qadağan zolağında bir səth səviyyəsi mövcudur. Bu səth səviyyəsi tamamilə səth müstəvisində lokallaşmışdır, azacıq s- qarışığı var və əsasən p_z tiplidir. Həmçinin səth defektinin yaranması nəticəsində meydana gələn $\Delta N(E)$ hal sıxlığının dəyişməsi hesablanmışdır.

ƏDƏBİYYAT

1. Tewary V.K., Phys. Rev. B, 2004, v.69, p.094109-094122.
2. Haq S., Movchan A.B., Rodin G. J., J. Appl. Mech.,2006,v.74,p.686-690
3. Nagard N .Le., Levy-Clement C., Katty A., Lieth R.M. A., Material Research Bulletin, 1990, 25, p. 495.
4. Dwivedi P. K., Tripathi S. K., Pradhan A., Kulkarni V. N., Agarwal., Journal of Non-Crystalline Solids, 2000, 924, p.266–269.
5. Petkov P., Parvanov S., Vodenicharov C., Materials Letters, 1999, 41, p. 27.
6. Munnix S., Schmeits M., Phys. Rev.B, 1984, v.30, N4, p.2202-2211
7. Бехштедт Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников. М.: Мир», 1990, 484 с.
8. Kemeny P., Azoulay J., Cardona M. et al., IL Nuovo Cimento, 1977, v.39B, N2, p.709-714.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ СЛОИСТОГО КРИСТАЛЛА GESE МЕТОДОМ ФУНКЦИЙ ГРИНА

З.А.ДЖАХАНГИРЛИ, С.А.НАБИЕВА, Т.О.БАЙРАМОВА

РЕЗЮМЕ

Метод функции Грина в базе линейных комбинаций атомных орбиталей (LCAO) использован для исследования электронной структуры Ge-терминированной поверхности (010). Обсуждаются энергетические состояния в энергетических щелях, их происхождение, орбитальный состав, резонансы и локальные изменения плотности состояний, обусловленные поверхностью.

Ключевые слова: вакансия, точечные дефекты, резонансы, антирезонансы

INVESTIGATION OF SURFACE ELECTRONIC STATES OF LAYERED GESE CRYSTAL BY GREEN FUNCTION METHOD

Z.A.JAHANGIRLI, S.A.NABIYEVA, T.O.BAYRAMOVA

SUMMARY

Green's function method in bases sets of Linear Combinations of Atomic Orbitals (LCAO) is used to calculate the electronic structure of the Ge-terminated (010) surface of GeSe semiconductor. The energy states in energy gaps, their origin, orbital content, resonances and local changes in the density of states due to the surface are discussed.

Keywords: vacancy, point defects, resonances, antiresonances

Redaksiyaya daxil oldu: 03.04.2019-cu il

Çapa imzalanıb: 16.10.2019-cu il