

УДК 548.73/.75+621.315.592
PACS number(s): 71.18.+y

РОЗРАХУНКИ ГУСТИНИ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СТАНІВ У МЕЖАХ УЗАГАЛЬНЕНОЇ МОДЕЛІ КІЛДАЛ-БОДНАРА (НА ПРИКЛАДІ Cd_3As_2)

В. Беднарський, Д. Степанчиков, Г. Чуйко

*Херсонський державний технічний університет,
Бериславське шосе, 24, 73008 Херсон, Україна
e-mail: kstu@tlc.kherson.ua*

Досліджено закон енергетичної дисперсії носіїв заряду для одновісних кристалів класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$. Результати графічно-аналітичних розрахунків функцій густин станів у межах узагальненої моделі Кілдал-Боднара наведені для арсеніду кадмію (Cd_3As_2). Використані методи чисельного аналізу та елементи нелінійного програмування. Знайдено особливості енергетичних залежностей функцій густини станів для актуальних енергетичних зон. Описано анізотропію екстремумів енергетичних зон у сполуках зазначеного класу.

Ключові слова: енергетична дисперсія, густина станів, одновісні кристали, модель Кілдал-Боднара.

Науковий інтерес, який викликають сьогодні сполуки класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ можна пояснити декількома причинами. По-перше, це широке практичне застосування цих матеріалів у різноманітних галузях сучасного приладобудування. По-друге, великі перспективи подальшого практичного впровадження у різних галузях твердотільної електроніки [1, 2]. Третьою причиною є те, що сполуки зазначеного класу все ще залишаються недостатньо дослідженими та вивченими. Серед матеріалів класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ окреме зацікавлення становить Cd_3As_2 (арсенід кадмію), через те, що це єдиний на сьогодні відомий кристал з від'ємною шириною забороненої зони ($\epsilon_g < 0$), який має тетрагональну симетрію [2]. На підставі перерахованих вище аргументів вважаємо, що проведені дослідження є актуальними як для теорії, так і для практики.

Об'єктом наших досліджень є енергетична зонна структура сполук класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ та розраховані на основі узагальненої моделі Кілдал-Боднара функції густини енергетичних станів для цих матеріалів. Предметом дослідження є особливості поведінки функції густини енергетичних станів у межах зон важких та легких носіїв. Методом дослідження є числові розрахунки з використанням елементів чисельного аналізу, нелінійного програмування та сучасних програмних середовищ.

Науковою новизною проведених досліджень, на думку авторів, є оригінальний підхід до складних розрахунків функцій густини станів в актуальних

енергетичних зонах з урахуванням анізотропії їхніх країв, а також той факт, що вперше вдалося оцінити густину енергетичних станів на усьому енергетичному інтервалі зон важких та легких носіїв і знайти певні особливості її поведінки.

Дисперсійне рівняння для сполук класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ було отримане у псевдокубічному наближенні з гамільтоніану Кілдал-Боднара [2–4]. У сферичній системі координат (k, θ, φ) воно може бути записане у такому вигляді:

$$k^4(\varepsilon, \theta) - \lambda(\varepsilon, \theta)k^2(\varepsilon, \theta) + \mu(\varepsilon, \theta) = 0; \quad (1)$$

де k – модуль хвильового вектора; λ, μ – складні функції, які залежать від енергії (ε) і сферичного кута (θ) поміж напрямом хвильового вектора та полярною віссю k_z , уздовж якої спрямована головна вісь симетрії кристала. Ці функції мають такий вигляд [5]:

$$\lambda(\varepsilon, \theta) = \frac{2(\Gamma(f_1 \sin^2(\theta) + f_2 \cos^2(\theta)) + 2f_3^2 \sin^2(\theta))}{(f_1 \sin^2(\theta) + f_2 \cos^2(\theta))^2}; \quad (2)$$

$$\mu(\varepsilon, \theta) = \frac{\Gamma^2}{(f_1 \sin^2(\theta) + f_2 \cos^2(\theta))^2}. \quad (3)$$

Параметри Γ, f_1, f_2, f_3 є такими функціями енергії:

$$\Gamma = \varepsilon \left((\varepsilon - \varepsilon_g) \left(\left(\varepsilon + \frac{2\Delta}{3} \right) \left(\varepsilon + \delta + \frac{\Delta}{3} \right) - \frac{2\eta^2 \Delta^2}{9} \right) - d^2 \left(\varepsilon + \frac{2\Delta}{3} \right) \right); \quad (4)$$

$$f_1 = P^2 \left(\left(\varepsilon + \frac{\Delta}{3} \right) \left(\varepsilon + \delta + \frac{\Delta}{3} \right) - \frac{\eta^2 \Delta^2}{9} \right); \quad (5)$$

$$f_2 = \eta^4 P^2 \varepsilon \left(\varepsilon + \frac{2\Delta}{3} \right); \quad (6)$$

$$f_3 = \frac{\eta^2 d P \Delta \varepsilon}{3}, \quad (7)$$

де ε – енергія носіїв, відрахована від вершини зони важких носіїв, ε_g – ширина забороненої зони, P – матричний елемент імпульсу, Δ – параметр спин-орбітальної взаємодії, $\eta = \frac{c}{2a}$ – скалярний параметр тетрагональної дисторсії ґратки (параметр

Полуботка [6], c, a – сталі ґратки кристала), δ – параметр Кілдал для урахування тетрагонального центросиметричного доданку у кристалічний потенціал, d – параметр, який описує нецентросиметричний доданок у кристалічний потенціал.

З наведених формул видно, що закон дисперсії (1) в сполуках класу $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ є анізотропним (залежить від сферичного кута θ). Незалежність дисперсійного рівняння від іншого сферичного кута φ свідчить, що ізоенергетичні поверхні є поверхнями обертання навколо полярної осі. Бікватратне відносно модуля хвильового вектора рівняння (1) з фізичної точки зору має два розв'язки:

$$|k_p(\varepsilon, \theta)| = \sqrt{\frac{\lambda(\varepsilon, \theta)}{2} + \sqrt{\left(\frac{\lambda(\varepsilon, \theta)}{2}\right)^2 - \mu(\varepsilon, \theta)}}; \quad (8)$$

$$|k_m(\varepsilon, \theta)| = \sqrt{\frac{\lambda(\varepsilon, \theta)}{2} - \sqrt{\left(\frac{\lambda(\varepsilon, \theta)}{2}\right)^2 - \mu(\varepsilon, \theta)}}. \quad (9)$$

Кожне з рівнянь (8, 9) описує чотири енергетичні зони для двох різних спінових станів, які позначено індексами p та m . На рис. 1 наведено фазову діаграму дозволених та заборонених станів для Cd_3As_2 , яку побудовано за рівнянням (8). Для іншого спінового стану, який описують рівнянням (9), можна отримати аналогічну фазову діаграму. В напрямі від позитивних до негативних значень енергії відповідно розміщені зона провідності, зона важких носіїв, зона легких носіїв та зона спин-орбітального відщеплення дірок. Всі зони, за винятком зони легких носіїв, за походженням є зонами p -типу. Зона легких носіїв є зоною s -типу. Для розрахунків були використані деякі параметри арсеніду кадмію: $\varepsilon_g = -0,13$ eV, $P = 0,72 \cdot 10^{-9}$ eV·м, $\Delta = 0,3$ eV, $\eta = 1,0057$, $\delta = 0,0935$ eV, $d = 0,05$ eV.

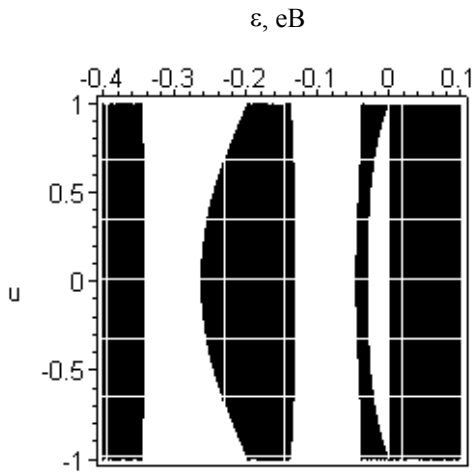


Рис. 1. Фазова діаграма дозволених та заборонених енергетичних станів для Cd_3As_2 (вертикальна вісь $u = \cos(\theta)$)

Як видно з рис. 1, зони важких та легких носіїв мають дно, положення якого суттєво залежить від полярного кута θ , крім того, вершина зони важких носіїв також має виражену залежність цього кута. Вершини зон легких носіїв та спин-орбітального відщеплення дірок мають менш помітну залежність від кута θ , а дно зони провідності взагалі не залежить від напрямку (кута θ). Заборонена зона поміж зоною провідності та зоною важких носіїв має нульову ширину при значенні параметра u , що дорівнює одиниці, і максимальну ширину при $u=0$. Ця зона має вигляд світлої "лінзи" на рис. 1, і може реально проявлятися лише при відносно низьких температурах. Крім того,

слід зазначити, що поведінка функцій (8, 9) при значеннях $|u|=1$ ($\theta=0, \pi$) також має складний характер: при певних значеннях енергії значення функцій в точці $|u|=1$ існує, а при інших – ні. Напрямок $\theta=(0, \pi)$ є особливим – уздовж нього відбувається стрибок для модулів хвильового вектора від дійсного значення до суто уявного, або навпаки. Така складна залежність країв енергетичних зон від напрямку в k -просторі зумовлює певні труднощі при розрахунках густини станів носіїв в зазначених актуальних енергетичних зонах.

Як відомо, густину енергетичних станів визначають через кількість квантових станів dN в інтервалі енергії від ε до $\varepsilon+d\varepsilon$ в розрахунку на одиницю об'єму:

$$dN = \frac{sd^3k(\varepsilon, \theta)}{(2\pi)^3}, \quad (10)$$

де s – кратність виродження станів в енергетичній зоні, d^3k – елемент об'єму в k -просторі. Вираз для густини енергетичних станів, записаний у сферичній системі координат, запишемо:

$$g = \frac{\partial N}{\partial \varepsilon} = \frac{s \left(\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \int_0^{u_m} k^3(\varepsilon, u) du \right)}{6\pi^2}, \quad (11)$$

де $u = \cos(\theta)$; інтегрування ведеться по змінній u від нуля до деякого максимального значення u_m , при якому підінтегральна функція (8) або (9) ще є дійсною (не є комплексною), причому максимально можливе значення верхньої межі інтегрування не може перевищувати одиниці.

Складність практичної реалізації розрахунків густини станів за формулою (11) полягала в тому, що потрібно було для кожного значення енергії з обраного інтервалу спочатку визначити величину критичного параметра u_m , при якому підінтегральна функція ще не є комплексною, а вже потім проводити інтегрування та диференціювання. Цю проблему вдалося вирішити за допомогою комп'ютерного моделювання з використанням елементів нелінійного програмування. Інструментальним середовищем, у якому проводилися розрахунки, був відомий продукт Maple V9.01. Було створено програму в кодах зазначеного середовища, яка спочатку “пробігала” заданий інтервал енергій і визначала критичний параметр u_m для кожного дискретного значення енергії, а потім робила відповідні розрахунки за формулою (11) і будувала графічні залежності функції густини станів від значення енергії.

Оскільки була застосована операція дискретизації і усі результати роботи програми зберігалися у числових масивах, для реалізації формули (11) використовували чисельні методи інтегрування та диференціювання. Зокрема, щоб уникнути можливих суто інструментальних помилок, розрахунки проводили з використанням різноманітних чисельних методів інтегрування: методу Сімпсона, методу середніх прямокутників, кубічних сплайнів, Монте-Карло та інших. Отримані результати порівнювали поміж собою. Було зафіксовано майже однакові результати, що свідчить про непогану роботу нашої програми.

Нижче, на рис. 2–4, наведено результати роботи нашої програми (енергія вимірюється в еВ, а густина енергетичних станів – у $\text{м}^{-3} \cdot \text{еВ}^{-1}$). Подано порівняльні графічні залежності густини станів від енергії для двох спінових станів (підінтегральні функції k_p та k_m) в зонах важких та легких носіїв, які мають

найбільшу крайову анізотропію. Інтегрування проводилося методом кубічних сплайнів.

Проведені розрахунки дають змогу точніше визначити екстремуми енергетичних зон, з'ясувати значення та поведінку функції густини станів в

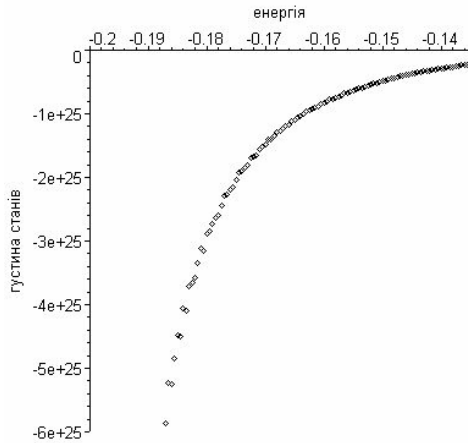


Рис. 2. Густина енергетичних станів, зона легких носіїв (спіновий стан p)

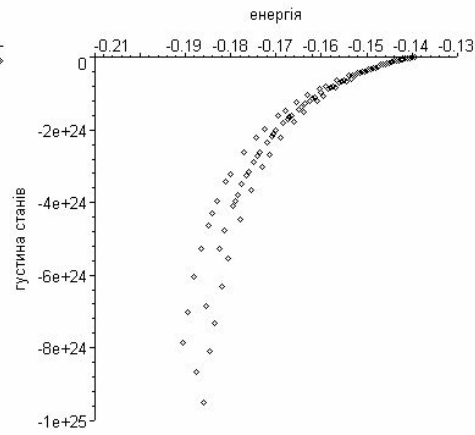


Рис. 3. Густина енергетичних станів, зона легких носіїв (спіновий стан m)

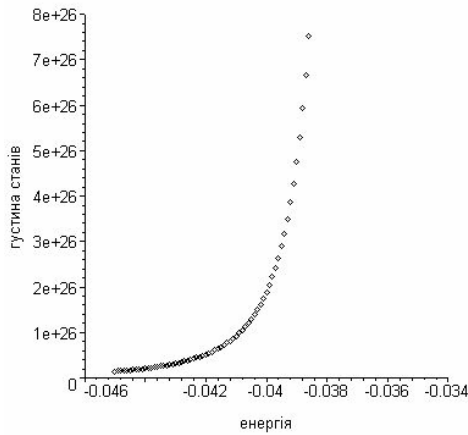


Рис. 4. Густина енергетичних станів, зона важких носіїв (спіновий стан p)

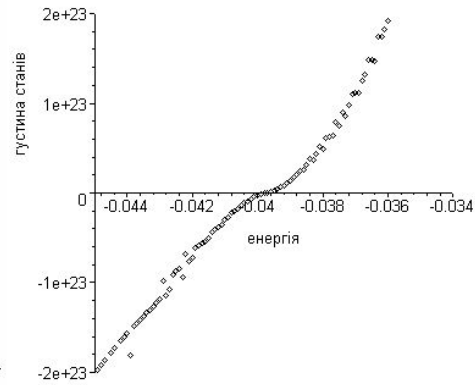


Рис. 5. Густина енергетичних станів, зона важких носіїв (спіновий стан m)

актуальних зонах. Поведінка функції густини станів в зоні провідності та спін-орбітального відщеплення дірок не має особливостей: у зоні провідності вона монотонно зростає, маючи всюди позитивне значення, а у зоні спін-орбітального відщеплення – монотонно зростає, набуваючи негативного значення. Отже, зона провідності має електронний характер, а зона спін-орбітального відщеплення –

дірковий. Щодо зони важких та легких носіїв, то тут є певні особливості. У крайових точках цих зон відбуваються розриви із зміною знаку функції густини станів. Ми вважаємо це ознакою нескінченного розриву, який відбувається на межі дозволеної та забороненої енергетичних зон. Як бачимо на рис. 2, 3, у зоні легких носіїв функція густини станів є зростаючою та від'ємною і має однакову тенденцію і майже однаковий порядок для обох спінових станів. Негативне значення функції густини станів свідчить про те, що зона легких носіїв є дірковою.

У зоні важких носіїв (рис. 4, 5) функція густини станів для різних спінових станів поводить себе по-різному: для спінового стану p (підінтегральна функція (8)) вона є монотонно зростаючою та всюди позитивною; для спінового стану m (підінтегральна функція (9)) вона має особливу точку ($\varepsilon \approx -0,04$ eV), де функція густини станів стрибком змінює свій знак (потерпає розрив першого роду). Для спінового стану m ми ідентифікували топологічний перехід для ізоенергетичних поверхонь саме у точці $\varepsilon \approx -0,04$ eV, де має місце зміна топології ізоелектронних поверхонь. Наскільки відомо авторам, ця особливість зони важких носіїв не була зафіксована раніше і не вивчалась в інших роботах. Крім того, зазначимо велику різницю (майже на три порядки) числових значень густини станів у зоні важких носіїв для різних спінових станів.

Запропонований нами метод розрахунків функції густини станів та проведені обчислення дають змогу більш наочно уявити собі поведінку та особливості цієї функції у різних актуальних енергетичних зонах. Наведені у статті результати було отримано різними чисельними методами, і тому можна вважати їх достатньо надійними. Але є потреба детальніше дослідити екстремуми зон важких та легких носіїв на предмет поведінки у цих областях функції густини станів та більш точного визначення їхніх меж. Особливий інтерес становить зона важких носіїв, а саме, ідентифікований у ній топологічний перехід для ізоенергетичних поверхонь та поведінка функції густини станів у цій зоні.

1. Дворник О.В., Івченко В.В., Чуйко Г.П. Псевдокубічне наближення в моделі Боднара // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. фіз. 2001. Вип. 34. С. 168–174.
2. Полуботко А.М. Зависимость параметров закона дисперсии Килдал-Боднара от величины тетрагонального сжатия в халькопиритах // ФТП. 1983. 19(4). С. 772–774.
3. Радауцан С. И., Арушанов Э.К., Натенров А.Н., Чуйко Г.П. Арсенид и фосфид кадмия. Кишинев: Штининца, 1976. 112 с.
4. Arushanov E.K. P3V2 compounds and alloys // Prog. Cryst. Growth Charact. 1992. Vol. 25. P. 131–201.
5. Bodnar J. Energy Band Structure of Cd_3As_2 near $k = 0$ on the Basis of Shubnikov-de-Haas & de-Haas-Van-Alfen Effects // Phys. Narrow Gap Semicond., 6. Ed. PAN, Warszawa, 1977. P. 311–317.
6. Chuiko G., Don N., Dvornik O., Ivchenko V., Sergeev A. Simple inverted band structure model for cadmium arsenide (Cd_3As_2) // Moldavian Journal of the Physical Sciences. 2003. Vol. 2(1). P. 88–94.

**THE CALCULATIONS OF THE DENSITY STATE OF ENERGY IN
GENERALIZED KILDAL-BODNAR MODEL
(FOR CADMIUM ARSENIDE Cd_3As_2)**

V. Bednarsky, D. Stepanchikov, G. Chuiko

*Kherson State Technical University, Department of general and applied physics,
Berislavske shosse, 24, UA-73008 Kherson, Ukraine
e-mail: kstu@tlc.kherson.ua*

The investigations of the energy dispersion laws of the charge carriers for one-ax crystals of $A_3^{\text{II}}B_2^{\text{V}}$ class are realized. The results of graphical-analytical calculations of the density state function in generalized Kildal-Bodnar model was obtained for cadmium arsenide (Cd_3As_2). The numerical methods and non-linear programming elements are used. It is found of the peculiarity of energy dependence of the density state functions for actual energy bands. The anisotropy of the energy bands peaks for this crystal class is discussed.

Key words: energy dispersion, density state, one-ax crystals, Kildal-Bodnar model.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2004

Прийнята до друку 21.11.2005