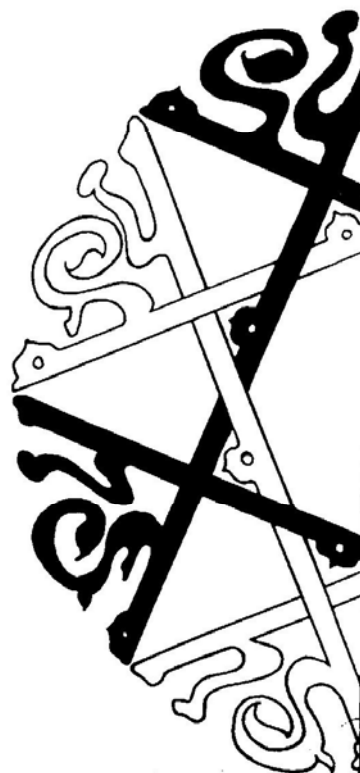


دومین گردهمایی
فیزیک ماده چگال

مرکز تحصیلات تکمیلی
در علوم پایه - زنجان
Institute for Advanced Studies
in Basic Sciences - ZANJAN



ساختار نواری الکترونیکی CdTe و HgTe

بهروز رضائی، منوچهر کلافی

بزمهشکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز

چکیده:

ساختار نواری الکترونیکی نیمه هادیهای CdTe و HgTe با در نظر گرفتن اندرکنش اسپین - مدار به روش شبه پتانسیل محاسبه شده است. ضرایب شکل اتمی از یک تابع هموار با ضرایب قابل تنظیم بدست می آیند. این تابع امکان مطالعه ساختار نواری آلیاژهای آنها را نیز فراهم می کند.

در سالهای اخیر نیمه هادیهای CdTe و HgTe و آلیاژهای آنها به دلیل کاربردهای فراوان آنها در موارد مختلف مورد توجه ویژه قرار گرفته است. از جمله این کاربردها می توان بکارگیری آنها بعنوان آشکارسازهای مادون قرمز در زمینه های نظامی، در پزشکی، نقشه برداری هوایی، تصویررایی حرارتی و معادن نام برد [۱]. هرگونه خواص فیزیکی مواد بلورین (خصوصاً نیمه هادیا) مستلزم شناخت ساختار نواری آنها می باشد. ساختار نواری نقش اساسی در تعیین رفتار الکترونیکی و نوری نیمه هادیا بازی می کند. هدف از انجام این تحقیق محاسبه ساختار نواری بلورهای CdTe و HgTe با در نظر گرفتن اندرکنش اسپین - مدار است. این محاسبات براساس روش شبه پتانسیل انجام یافته است. در تعیین ساختار نواری با این روش ضرایب شکل اتمی نقش اساسی را بازی می کنند. اگر چه ساختار نواری این بلورها قبلاً به روش شبه پتانسیل با ضرایب شکل اتمی پیشنهاد شده برای آن محاسبه شده اند [۲] ولی در این تحقیق ضرایب مذکور از یک تابع هموار پارامتری بدست می آیند. این تابع قبلاً برای مواد دیگر نظیر GaN، AlN و InN استفاده شده است [۳-۴] ولی تاکنون در مورد CdTe و HgTe استفاده نشده است. مزیت استفاده از چنین تابعی علاوه بر تعیین ضرایب شکل اتمی در بلورهای CdTe و HgTe قابل اعمال بودن آن در آلیاژهای این مواد است.

ساختار نواری از حل معادله مشخصه زیر حاصل می شود [۵].

$$\det |H_{GG'}(\vec{k}) - E(\vec{k})\delta_{GG'}| = 0$$

(۱) که در آن $H_{GG'}(\vec{k})$ شکل ماتریسی هامیلتونین بوده و به صورت زیر است.

$$H_{GG'}(\vec{k}) = |\vec{k} + \vec{G}|^2 \delta_{GG'} \delta_{\vec{G}\vec{G}'} + V(G-G')\delta_{\vec{G}\vec{G}'} + H_{GG'}^0(\vec{k})$$

(۲) در رابطه (۲) جمله اول انرژی جنبشی، جمله دوم شبه پتانسیل و جمله سوم هامیلتونین اسپین - مدار است.

در رابطه فوق شبه پتانسیل بصورت زیر است.

$$V(G-G') = V^S(|G-G'|^2)S^S(G-G') + iV^A(|G-G'|^2)S^A(G-G')$$

(۳)

در رابطه (۳) V^S و V^A به ترتیب ضرایب شکل اتمی متقارن و ضد متقارن هستند که در محاسبات ما مقادیر آنها از یک تابع هموار پارامتری بدست می آیند [۳].

$$V^S(q) = \frac{a_1 q^2 + a_2}{1 + \exp[a_3(a_4 - q^2)]} \quad (4)$$

$$V^A(q) = (a_1 q + a_2) \exp[a_3(a_4 - q^2)]$$

در رابطه (۴) ضرایب a_i ($i=1-4$) برای V^S و V^A به طور جداگانه با استفاده از روش برازش محاسبه شده و در جدول ۱ نشان داده شده اند.

	V^S				V^A			
	a_1	a_2	a_3	a_4	a_1	a_2	a_3	a_4
CdTe	۰/۰۴۸۴	-۰/۴۱۹۲	-۰/۴۱۴۷	۵/۶۰۷۵	-۱/۰۵۲	۱/۲۴۹۹	۰/۵۷۶۵	۲/۶۷۹۸
HgTe	۰/۰۴۷۴	-۰/۴۰۱۹	-۰/۵۰۰۲	۱۰/۷۵۴۰	-۰/۰۱۸۴	۱/۰۸۴۸	۱/۲۲۵	۴/۳۹۰۱

جدول ۱. ضرایب توابع شکل انمی $V(q)$

S^S و S^A نیز به ترتیب ضرایب ساختار متقارن و ضد متقارن هستند و داریم.

$$S^S(G-G') = \cos[(G-G') \cdot \tau] \quad (5)$$

$$S^A(G-G') = \sin[(G-G') \cdot \tau]$$

که در آن $\tau = \frac{1}{8}a$ (ا و ا و ا) و a ثابت شبکه می باشد.

برای هامیلتونین اسپین - مدار داریم :

$$H_{GG'}^{\sigma\sigma'}(\vec{k}) = (\vec{K} \times \vec{K}') \cdot \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} \{ -i\lambda^S S^S(G-G') + \lambda^A S^A(G-G') \} \quad (6)$$

که $\vec{K} = \vec{k} + \vec{G}$ ، $\vec{K}' = \vec{k} + \vec{G}'$ و $\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}$ نیز حالت های اسپین پائولی هستند.

در رابطه (۶) و λ^S و λ^A به ترتیب سهم های متقارن و ضد متقارن هامیلتونین اسپین - مدار بوده و با توجه به معادلات زیر به سهم های اسپین - مدار کاتیونی (λ_c) و آنیونی (λ_a) مربوط می شوند.

$$\lambda^S = \frac{1}{2}(\lambda_c + \lambda_a)$$

$$\lambda^A = \frac{1}{2}(\lambda_c - \lambda_a)$$

$$\lambda_c = \mu B_{nl}^c(K) B_{nl}^c(K)$$

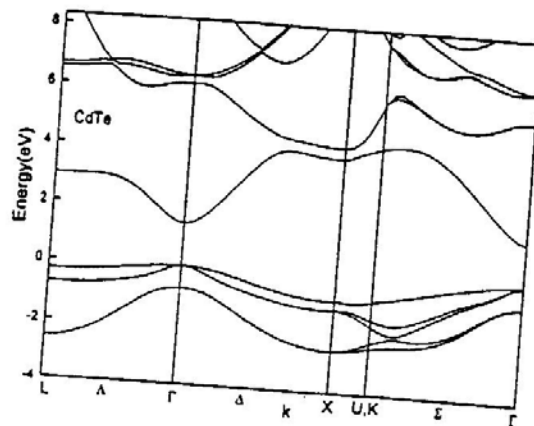
$$\lambda_a = \alpha \mu B_{nl}^a(K) B_{nl}^a(K')$$

$$B_{nl}(K) = \beta \int_0^\infty j_l(Kr) R_{nl}(r) r^2 dr \quad (8)$$

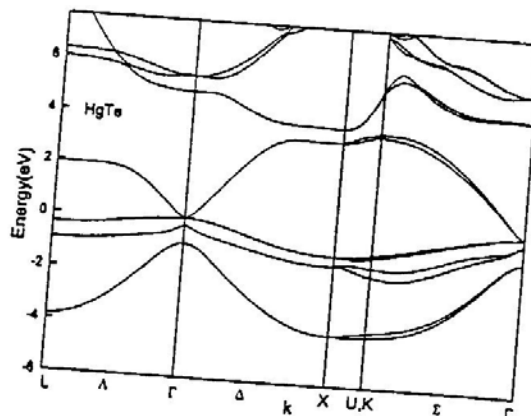
در روابط فوق α نسبت سهم شکافگی اسپین - مدار اتم آنیون آزاد به سهم اتم کاتیون آزاد [۶] ، μ پارامتر قابل تنظیم اسپین - مدار، $j_l(Kr)$ تابع بسل کروی اندازه حرکت زاویه ای l ام ، $R_{nl}(r)$ قسمت شعاعی توابع موج هسته ای [۶] و β نیز ثابت بهنجارش است [۷].

در این محاسبات برای Cd و Te اریتهال های $4p$ و برای Hg اریتهال $5p$ را در نظر می گیریم و از اریتهال های d و هم چنین حالت های هسته ای داخلی به دلیل ناچیز بودن سهم آن صرف نظر می کنیم [۸].

از توابع پایه برای هامیلتونین با توجه به شرط $|\vec{k} + \vec{G}|^2 \leq E_1$ داخل کره ای به شعاع E_1 محدود می شوند که
 آن برای CdTe و HgTe به ترتیب ۷ و ۶/۵ ریدبرگ هستند نتایج حاصل از این محاسبات در شکل های او ۲ به
 برای CdTe و HgTe نشان داده شده اند که با نتایج محاسبات قبلی سازگار است [۲].



شکل ۱. ساختاری نواری الکترونیکی CdTe



شکل ۲. ساختار نواری الکترونیکی HgTe

مراجع:

1. I.Reine, M.B. "Status of HgCdTe Technology", proc. SPIE 443,2(1983)
2. D.J. Chadi, John P.Walter, Marvin L.Cohen, Y.Petroff M. Balkanski, phys. Rev.B5, 3058 (1972)
3. S.K.Pugh , D.J.Dugdale, S.Brand, and R.A.Abram, Semicond. Sci. Technol. 14,23(1999)
4. S.K. Pugh, D.J. Dugdale, S. Brand, , and R.A. Abram, J. Appl. Phys. 86, 3768 (1999)
5. James R.Chelikowsky and Marvin L. Cohen, phys Rev. B14, 556 (1976)

6. F. Herman and S.Skillman, "Atomic structure Calculations" , prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J.(1963)
7. J.P Walter, M.L. Cohen, Y. Petroff and M. Balkanski, phys. Rev B1, 2661(1970)
8. 8.Luis R.Saravia and David Brust, phys. Rev. 176,915(1968)