

مقاله نامه

کنفرانس فیزیک ایران
و
نهمین همایش دانشجویی فیزیک

۱۳۸۳

دانشگاه صنعت آب و برق (شهید عباسپور)

۲ تا ۵ شهریور

فرمانده فیزیک

ساختار نواری الکترونیکی و پارامترهای لاتینگر CdTe

رضائی، بهروز؛ کلافی، منوچهر

نیزمشنکده فیزیک کاربردی و ستاره شناسی، دانشگاه تبریز، تبریز، صندوق پستی ۵۱۶۶۵-۱۶۳

چکیده

ساختار نواری الکترونیکی CdTe به روش شبه پتانسیل محاسبه می شود. ضرایب شکل اتمی شبه پتانسیل از یک تابع هموار $V(q)$ با ضرایب قابل تنظیم بدست می آیند. با استفاده از هامیلتونی جرم موثر، پاشندگی لبه نوار در نقطه Γ (مرکز ناحیه بریلوئن) به نتایج بدست آمده از روش شبه پتانسیل برازش می شود. بنابراین پارامترهای مهم ساختار نواری یعنی پارامترهای لاتینگر را برای CdTe بدست می آوریم که در مطالعه ساختار الکترونیکی و خواص فیزیکی آلیاژها با کسر مولی گوناگون و جابه های کوانتومی ساختارهای ناهمجان مفید خواهد بود.

Electronic Band Structures and Luttinger parameters of CdTe

Rezaei, Behrooz; Kalafi, Manoochehr

Research Institute for Applied physics and Astronomy, Tabriz Univ., P.O.Box 51665-163, Tabriz, Iran

Abstract

The electronic band structures of CdTe is calculated by the pseudopotential method. The pseudopotential atomic form factors are obtained from a smooth $V(q)$ function with adjustable coefficients. Using the effective - mass Hamiltonian, band edge dispersion at the Γ Point (center of Brillouin zone) is fitted to that calculated by pseudopotential method. Thus we derive important band structure parameters such as the Luttinger parameters for CdTe which will be useful for the study of the electronic structure and physical properties of alloys of varying mole fractions and quantum well heterostructures.

PACS: ۷۱

ناحیه بریلوئن و برازش آن بانیای حاصل از هامیلتونی جرم موثر می توان این پارامترها را بدست آورد.

روش محاسبات

ساختار نواری بلور CdTe به روش شبه پتانسیل محاسبه می شود. مقادیر ضرایب شکل اتمی متقارن و پاد متقارن شبه پتانسیل از یک تابع هموار پارامتری بدست می آیند [۲]:

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

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

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

مقدمه

در سالهای اخیر نیمه هادی CdTe و آلیاژهای آن کاربردهای فراوانی در صنایع نظامی به عنوان آشکارسازهای مادون قرمز، پزشکی، نقشه برداری هوایی، تصویر یابی حرارتی و معادن داشته است [۱]. چون هرگونه خواص فیزیکی نیمه هادیا مستلزم شناخت ساختار نواری و پارامترهای مهم آن است، لذا هدف از انجام این تحقیق محاسبه جرمهای موثر و پارامترهای لاتینگر^۱ بلور CdTe که از جمله پارامترهای مهم ساختار نواری هستند، می باشد.

در تقریب جرم موثر پارامترهای لاتینگر در تعیین رفتار الکترونیکی نیمه هادیا در مجاورت مرکز ناحیه بریلوئن^۲ نقش اساسی را بازی می کنند که بامعرفی ساختار نواری محاسبه شده در مجاورت مرکز

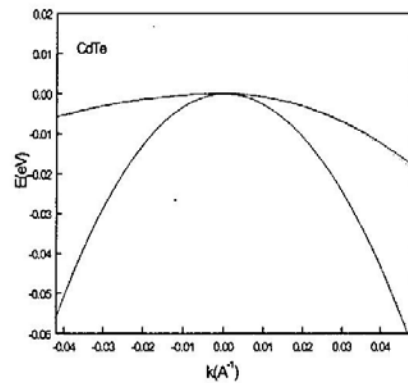
^۱ Luttinger
^۲ Brillouin zone

۰/۹۱ الکترون ولت است. $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ پارامترهای لاتینگر هستند که با جفت کردن ویژه مقادیر هامیلتونین جرم موثر و روش شبه پتانسیل محاسبه شده و در جدول ۲ نشان داده شده‌اند.

جدول ۲: پارامترهای لاتینگر بلور CdTe

γ_1	۴/۷۳۵۳
γ_2	۱/۲۵۳۸
γ_3	۱/۸۶۱

نتایج حاصل از دو روش برای ساختار نوار ظرفیت نیز در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار نوازی بلور CdTe با استفاده از روش شبه پتانسیل (—) و تقریب جرم موثر (....) در مجاورت مرکز ناحیه بریلونن

جرمهای موثر وابسته به جهت حفره ها بر حسب پارامترهای لاتینگر بصورت زیر است [۶]:

$$\left(\frac{m_0}{m_{hh/lh}}\right)^{[100]} = \gamma_1 \mp 2\gamma_2$$

$$\left(\frac{m_0}{m_{hh/lh}}\right)^{[111]} = \gamma_1 \mp 2\gamma_3 \quad (3)$$

در رابطه (۳) اندیسه‌های hh و lh به ترتیب نمایانگر حفره سنگین و سبک هستند. با استفاده از این رابطه می توان جرمهای موثر حفره ها را بدست آورد. جرمهای موثر الکترونها نیز با استفاده از برازش

جدول ۱: پارامترهای ضرایب شکل اتمی شبه پتانسیل بلور CdTe

V^S	a_1	0.0452
	a_2	-0.379
	a_3	-0.432
	a_4	6.8773
V^A	a_1	-0.052
	a_2	0.2499
	a_3	0.5765
	a_4	2.6798

برای بدست آوردن توافق کامل بین نتایج حاصل از روش شبه پتانسیل با نتایج بدست آمده از هامیلتونی جرم موثر، ضرایب a_i قبلی [۳] اندکی تصحیح یافته اند. برای توصیف ساختار نوار ظرفیت در مجاورت مرکز ناحیه بریلونن تحت تقریب جرم موثر، هامیلتونی جرم موثر با در نظر گرفتن تقارن بلند - روی ۳ بصورت زیر نوشته می شود [۵-۴]:

$$H = \begin{bmatrix} Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ S^* & T & 0 & R & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & T^* & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) \\ 0 & R^* & -S^* & Q & -i\sqrt{2}R^* & -\frac{i}{\sqrt{2}}S \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & i\sqrt{2}R & \frac{1}{2}(Q+T)-\Delta_{so} & 0 \\ i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{2}(Q+T)-\Delta_{so} \end{bmatrix}$$

که

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_1 + \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 - 2\gamma_2)k_z^2]$$

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_0}[(\gamma_1 - \gamma_2)(k_x^2 + k_y^2) + (\gamma_1 + 2\gamma_2)k_z^2]$$

$$S = i\frac{\hbar^2}{m_0}\sqrt{\gamma_3}(k_x - ik_y)k_z$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\sqrt{3}[\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) - 2\gamma_3k_xk_y]$$

m_0 جرم الکترون آزاد و Δ_{so} شکافت اسپین - مدار بوده و مقدار آن

- holes in perturbed periodic fields'; *phys. Rev.* vol. 97, February 1955, pp. 869-883.
- [5] Ramos, L.E., Teles, L.K., Scolfaro, L.M.R., Castineira, J.L.P., Rosa, A.L., Leite, J.R.; 'Structural, electronic, and effective-mass properties of silicon and zinc-blend group-III nitride semiconductors compounds'; *phys. Rev. B*, vol. 63, April 2001, pp. 165210-165219.
- [6] Fritsch, D., Schmidt, H., Grundmann, M.; 'Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blend and wurtzite AlN, GaN, and InN'; *phys. Rev. B*, vol. 67, June 2003, pp. 235205-235217.
- [7] de Paiva, R., Nogueira, R.A., de Oliveira, C., Leite Alves, H.W., Alves, J.L.A., Scolfaro, L.M.R., Leite, J.R.; 'First-principles calculations of the effective mass parameters of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$ alloys'; *Brazilian J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 2A, June 2002, pp. 405-408.

سهامی^۱ به پاشندگی نوار رسانش حاصل از روش شبه پتانسیل بدست می آید. نتایج بدست آمده از این تحقیق برای جرمهای مؤثر حفره ها و الکترونها در جدول ۳ نشان داده شده اند که با نتایج محاسبات دیگران [۷] سازگاری خوبی دارد. مطابق این محاسبات ملاحظه می شود که وابستگی به جهت جرمهای مؤثر که در طراحی ابزارهایی مانند دیودهای لیزری مهم هستند، غیر قابل صرف نظر است.

جدول ۳: جرمهای مؤثر الکترونها، حفره های سنگین و سبک بر حسب جرم الکترون آزاد m_0 در جهتهای [100] و [111]

۱- نتایج حاصل از کار حاضر ۲- نتایج مرجع [۷]

$m_e^{[100]}$	$m_{hh}^{[100]}$	$m_{lh}^{[100]}$	$m_e^{[111]}$	$m_{hh}^{[111]}$	$m_{lh}^{[111]}$
۰/۱۳۴	۰/۴۷	۰/۱۴	۰/۱۳۵	۱/۰۹۵	۰/۱۲
۰/۱۳۵	۰/۴۹	۰/۱۳۷	۰/۱۳۵	۱/۰۹۹	۰/۱۰۶

نتیجه گیری

ساختار نواری بلور CdTe با استفاده از روش شبه پتانسیل محاسبه شده و به منظور بدست آوردن پارامترهای لاتینگر با نتایج حاصل از هامیلتونی جرم مؤثر جفت می شود. با معلوم بودن این پارامترها می توان جرمهای مؤثر حفره ها را بدست آورد. جرمهای مؤثر الکترونها نیز مستقیماً از برازش سهامی به پاشندگی لبه نوار رسانش حاصل از روش شبه پتانسیل بدست می آید. محاسبات نشان می دهد که نتایج بدست آمده برای جرمهای مؤثر تطابق خوبی با کارهای دیگران دارد.

مرجع ها

- [1] Reine, M.B.; 'Status of HgCdTe Technology'; *proc. SPIE*, vol. 443, 1983, pp. 2-5.
- [2] Pugh, S.K., Dugdal, D.J., Brand, S., Abram, R.A.; 'Electronic structure calculation on nitride semiconductors'; *Semicond. Sci. Technol.* vol. 14, November 1999, pp. 23-31.
- [۳] رضائی، بهروز، کلانی، منوچهر؛ ساختار نواری الکترونیکی CdTe و HgTe * مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه زنجان، دهمین کنگره ملی فیزیک ماده چگال، اردیبهشت ۸۳، در حال چاپ.
- [4] Luttinger, J.M., Kohn, W.; 'Motion of electrons and