

# РОЛЬ І ПРИРОДА ПІКОПОДІБНИХ ГУСТИН СТАНІВ У ФІЗИЦІ СИЛЬНО АНІЗОТРОПНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ

Д.М.Берча<sup>1</sup>, М.Шнайдер<sup>2</sup>, Л.Ю.Хархаліс<sup>1</sup>, А.І.Берча<sup>1</sup>

Ужгородський держуніверситет, Інститут фізики і хімії твердого тіла

Інститут фізики педагогічного університету, Жешув, Польща

Проаналізована тонка структура однозонної пікоподібної густини станів, одержаної для кристала  $In_4Se_3$ . Показано, що наявність четвертих степеней компонент хвильового вектора у законі дисперсії завжди приводить до зменшення функції густини станів, подібно як в одновимірному випадку квадратичного закону дисперсії.

Інтерес до пікоподібних густин станів з'явився тоді, коли інтенсивно почали вивчатись моделі механізмів надпровідності. Існуюча бісолітонна модель високотемпературної надпровідності [1] повністю ґрунтується на одновимірній моделі кристалу, для якої залежність густини станів від енергії є пікоподібна. Такі густини станів при великій електрон-фононній взаємодії можуть бути сприятливими для реалізації особливого стану носіїв струму, а саме конденсого стану, який для одновимірному випадку є не чим іншим, як солітоном.

Пікоподібні густини станів спостерігаються не тільки в чистому одновимірному випадку, але і для косинусоподібного двовимірного або перехідного сильно анізотропного закону дисперсії. Проте вони не можуть бути істотними для явищ у напівпровідниках, які визначаються зосередженими в екстремумах зон носіями струму. Для таких фізичних явищ суттєва однозонна густина станів, визначена в межах дії закону дисперсії, який описує стани біля окремого екстремума.

У даній роботі проаналізуємо структуру одержаної в [2,3] однозонної пікоподібної густини станів, розглянемо розщеплення і перерозподіл конічних точок у залежності від параметрів невідродженого закону дисперсії носіїв струму, який включає

четверті степені компонент хвильового вектора.

Відмітимо, що вперше дослідження у цьому напрямку були виконані Nakaо [4] і пізніше Борцем [5] на основі закону дисперсії:

$$E(k) = \sum_i 2J_i (1 - \cos k_i a_i) \quad (1)$$

У результаті було встановлено, що зміна топології ізоенергетичних поверхонь знаходить свій прояв у критичних точках густини станів при зміні розмірності простору. Даний аналіз виявився корисним для розуміння взаємозв'язку особливостей густини станів із зміною топології ізоенергетичної поверхні і також для розуміння оптико-топологічних електронних явищ в упорядкованих і топологічно розупорядкованих твердих тілах [6]. У нашому дослідженні ми використовуємо важливі положення цього аналізу.

Багатократна зміна топології одержується не тільки при розгляді ізоенергетичних поверхонь, що описуються законом дисперсії (1), але і в випадку ізоенергетичних поверхонь в околі екстремальної точки, якщо закон дисперсії містить кореневі  $k$ -лінійності [5]. Найчастіше всього такі  $k$ -лінійності обумовлені врахуванням спіні – орбітальної взаємодії і тому є незначними поправками до квадратичних членів. У роботі Рашби і

Шеки [7] повідомлялось про закон дисперсії, який приводить до петлі

$$E(k) = ak_x^2 + bk_y^2 + ck_z^2 \pm \sqrt{ak_x^2 + \beta k_y^2 + \gamma k_z^2 + dk_x^2 k_y^2 + fk_x^2 k_z^2 + sk_y^2 k_z^2} \quad (2)$$

де в підкореновому виразі (2) можуть занулятися ті або інші коефіцієнти. Даний узагальнений закон дисперсії був одержаний методами теорії груп для низькосиметричних кристалів в околі високосиметричних точок зони Брилюена. Тут  $\alpha, \beta, \gamma$  - коефіцієнти, які появляються при врахуванні спин-орбітальної взаємодії. Якщо  $d=f=s=0$ , то в залежності від співвідношення між іншими коефіцієнтами в (2), одержуємо критичну поведінку густини станів в області мінімумів або максимумів енергії таку ж як в трьохвимірному, двовимірному або одновимірному випадках при квадратичному законі дисперсії [5]. А більш конкретно: визначена топологічна і аналітична єдність між особливостями густини станів  $M_0^s, M_1^s, M_2^s, M_3^s, D_0^s, D_1^s, D_2^s, P_0^s, P_1^s$  для спінових підзон, визначених законом дисперсії (2) і узагальненими особливостями Ван-Хова  $M_0, M_1, M_2, M_3$  (3D),  $D_0, D_1, D_2$  (2D),  $P_0, P_1$  (1D).

Пікоподібна залежність густини станів типу  $P_0^s$  (асиметричний нескінченний пік) в області мінімуму або максимуму спостерігається тільки для екзотичного випадку сферичної петлі екстремумів, тобто коли  $\frac{\alpha}{a} = \frac{\beta}{b} = \frac{\gamma}{c}$ . Неаналітична сингулярність у густині станів  $D_2^s$  (симетричний нескінченний пік) має місце також в кінцевих точках ізоенергетичних поверхонь, які описуються законом дисперсії (2), якщо  $\frac{\alpha}{a} = \frac{\beta}{b} < \frac{\gamma}{c}$ .

Звернемо увагу на деякі реальні закони дисперсії, підтверджені

експериментально. Вони містять, крім к-лінійних і квадратичних членів, вищі

$$E(k) = -a_1 k_x^2 - a_2 k_y^2 - a_3 k_z^2 + b_1 k_x^4 + b_2 k_y^4 + b_3 k_z^4 \quad (3)$$

екстремумів, а в роботі Товстюка і Берчі [8] про закони дисперсії типу:

степені компонент хвильового вектора. Включення в закон дисперсії четвертих компонент не є дивним. Так, використання потужних методів (ефект Шубнікова де-Гааза, внутрізонне поглинання і циклотронний резонанс, див. огляд [9]) показало, що найкращого опису експериментальних результатів можна досягнути, якщо в відомий закон дисперсії для дірок  $Te$  [10, 11] включити четверті степені компонент хвильового вектора. Однак ці члени є тільки поправками.

У деяких випадках четверті степені компонент хвильового вектора є визначальними. Так, у деформованих квазидвовимірних шарах кубічних напівпровідників, як показав Кібіс [12], можуть зникати параболічні члени у законі дисперсії діркових підзон, так що енергетичний спектр дірок в околі вершини підзони  $E(\mathbf{k}) \sim k^4$ . Якщо підзони у валентній смузі знаходяться енергетично близько, то навіть у випадку невиродженого енергетичного стану у  $k_p$ -наближенні необхідно враховувати у розкладі  $E(\mathbf{k})$  в околі екстремальної точки не тільки параболічні, але і члени четвертої степені, причому ці члени можуть бути співрозмірними при малих  $\mathbf{k}$ . Останнє приводить до низькоенергетичної непараболічності, виявленої при розрахунку енергетичного спектра кристала  $In_4Se_3$  [13,14] Цей розрахунок показав, що валентна зона і зона провідності може описуватися такою моделлю закону дисперсії в околі екстремальної точки – в центрі зони Брилюена:

з параметрами  $a_1=5.7$  eV,  $a_2=13.0$  eV,  $a_3=3.1$  eV,  $b_1=479.8$  eV,  $b_2=888.0$  eV,  $b_3=2957.0$  eV. Тут  $k_x, k_y, k_z$  – безрозмірні величини. Причиною існування такого закону дисперсії для невиродженого стану, як показано нами в [14], є наявність великої кількості підзон у вузькому енергетичному інтервалі, що вимагає врахування вищих степеней у теорії збурення.

У [2,3] ми спостерігали, що ізоенергетичні поверхні для конкретного набору параметрів  $a_i$  і  $b_i$  зазнають багатократної зміни топології. При енергіях, де переважають четверті степені у (3), спостерігається спад густини станів по закону  $E^{-1/4}$  [2].

Представивши закон дисперсії (3) в параметричному вигляді, використавши при цьому еліптичні координати, одержуємо, що за топологію ізоенергетичної поверхні відповідальні

співвідношення між параметрами  $\frac{b_i}{a_i^2}$ , а не

окремі параметри  $a_i$  і  $b_i$ .

Проаналізуємо, як впливає залежність між величинами  $\frac{b_i}{a_i^2}$  на топологію

ізоенергетичних поверхонь і густин станів. Для того щоб співставити одержані результати з результатами робіт [4,5],

позначимо  $\frac{b_i}{a_i^2}=J_i$  і використаємо ті ж

співвідношення між ними:

- |                            |   |
|----------------------------|---|
| 1) - $J_1=J_2=J_3$ ,       |   |
| 2) - $J_1=J_2 \gg J_3 > 0$ | 6) - $J_1 \approx J_2 \approx J_3$ ;    |
| 3) - $J_1=J_2 > J_3=0$ ;   | 7) - $J_1 > J_2 + J_3; J_2 \neq J_3$ ;  |
| 4) - $J_1 > J_2 > J_3=0$ ; | 8) - $J_1 \gg J_2 + J_3; J_2=J_3 > 0$ . |

Щоб одержати низькоенергетичну непараболічність, подібну як і в кристалі  $In_4Se_3$ , припустимо, що  $a_i \ll b_i$ .

Густина станів розраховувалась методом гістограми. З цієї метою задавалась та максимальна енергія, до якої вимагалось розрахувати  $g(E)$ . Мінімальна енергія була рівна глобальному мінімуму смуги. Далі визначалися безрозмірні максимальні

значення  $k_{x\max}, k_{y\max}, k_{z\max}$ , які відповідали максимальному значенню енергії. Обчислені значення  $k_{\max}$  визначають область, в якій реалізується закон дисперсії (3). З вибраним кроком по  $k_i$  ми знаходили значення енергії, виходячи із (3). Одержані розв'язки утворюють гістограму густини станів. Дана процедура обумовлює врахування практично всіх можливих станів для всіх значень енергій аж до вибраного нами максимального значення.

Проведемо порівняння одержаних нами результатів густини станів (рис.1, 1-8) з оригінальними обчисленнями [4,5]. Слід відмітити, що в загальному випадку вигляд кривих на рис.1 подібний до кривих робіт [4,5]. Різниця полягає в плавному спаді правої частини обчисленої густини станів, яка для значення енергії  $E \geq 0$  описується функцією  $E^{-1/4}$ .

Практично у всіх випадках маємо розщеплення конічних точок. Для двовимірних і одновимірних структур вигляд піків і особливості густини станів у критичних точках  $D_{0n}$  і  $P_{0n}$  ідентичні до відповідних на рисунках в [4,5]. Однак, у наших двовимірних структурах особливість  $D_{2n}$  інша. Тут з'являється додаткова особливість, позначена буквою L.

Всі зображені на рис.1 функції густини станів можна вважати одиночними піками, більш або менш складної структури, так як вони зосереджені в дуже вузькому енергетичному інтервалі.

Розщеплення трьохкратно вироджених конічних точок  $M_1$  або  $M_2$ , вперше передбачене Борцем (у випадках, коли  $J_1 \approx J_2 \approx J_3 = 0$ ) (5) і  $J_1 > J_2 + J_3; J_2 \neq J_3$  (7)), підтверджується нашими обчисленнями (рис.1, 6,7), незважаючи на те, що вони проводились для іншого закону дисперсії.

Випадок для параметрів  $J_1 \approx J_2 \approx J_3$  в наших розрахунках більш складний і містить в собі не тільки розщеплення конічних точок, але і їх перерозподіл (див.рис.1,6а,b,c)

Результати обчислень (рис.1, 8) для випадку, аналогічного сильно анізотропним структурам, відрізняються від відповідного випадку 8 із [5]. Вигляд лівого піка густини станів співпадає, в той час як правий пік мало помітний і перетворюється у

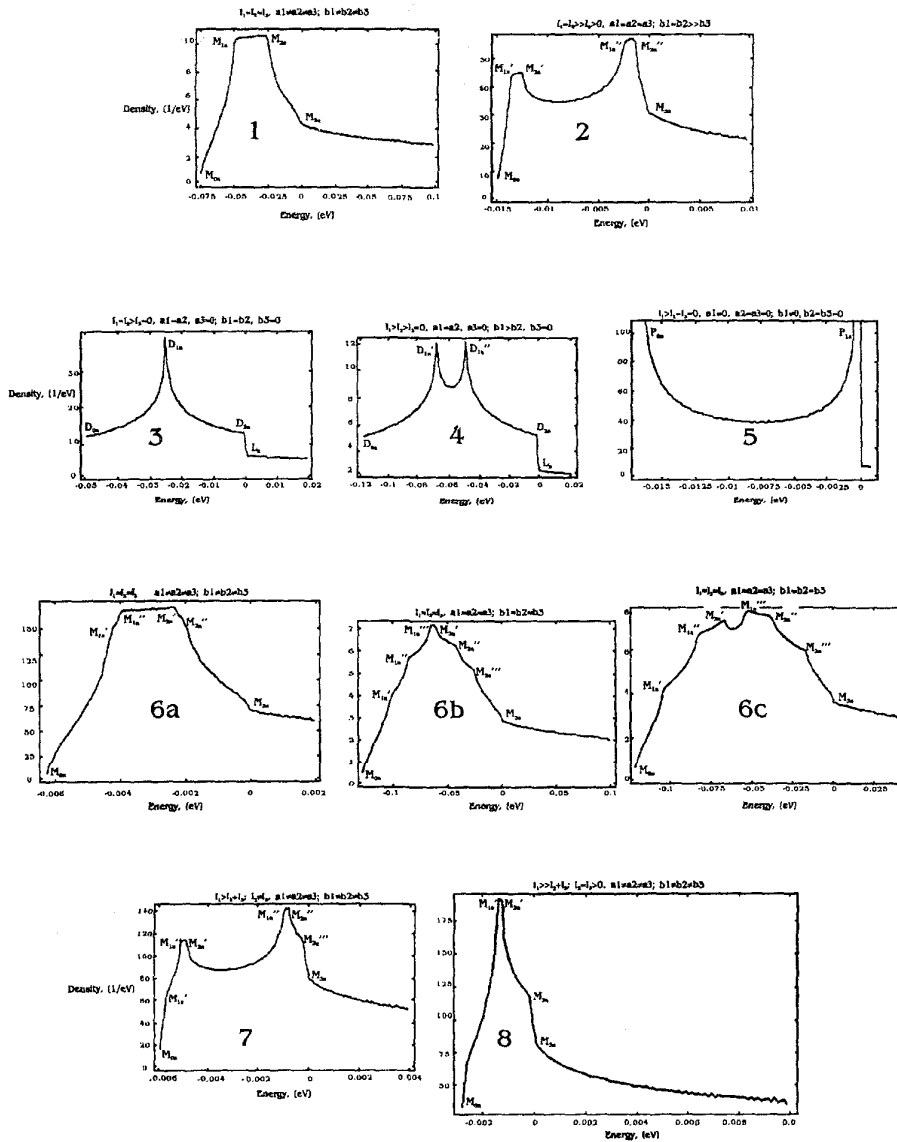


Рис.1. Функції густин станів у залежності від співвідношень між параметрами закону дисперсії (3).

“сходінку”. Найбільша різниця в порівнянні з вихідними роботами [4,5] спостерігається у випадку 2 (рис.1). Незалежно від способу реалізації умови  $J_1=J_2 \gg J_3 > 0$  з використанням параметрів  $a_i$  і  $b_i$  завжди одержуємо два піки, менш або більш гострі. Це свідчить про те, що перехід функції густини станів до функції в двовимірних структурах, який здійснюється при  $a_3=b_3=0$ , відбувається стрибком.

На основі одержаних результатів можна стверджувати, що критична точка  $M_{3n}$  завжди розміщена у точці, в якій енергія

рівна 0. Ця точка відповідає локальному максимуму закону дисперсії (3) і в цій точці відбувається зміна топології ізоенергетичних поверхонь. Поверхні належать до типу замкнутих, але не до типу сфери.

У роботах [2,3] нами розраховувалась густина станів для кристала  $In_4Se_3$ , однак грубість гістограми не привела до виявлення структури піка. Більш детальні обчислення показали, що пік густини станів складається із двох піків, причому реєструється розщеплення і перерозподіл кінцевих точок [15]. Розрахунок параметрів

$J_1, J_2, J_3$  при врахуванні  $a_i$  і  $b_i$  показав, що залежність густини станів від енергії відповідає випадку, який приведений на рис.1,7:  $J_3 > J_1 + J_2$ ;  $J_1 \neq J_2$ .

У даній роботі ми розглянули всі можливі випадки співвідношень для параметрів  $J_1, J_2, J_3$ . Переходи між різними випадками можуть бути важливими для дослідження впливу деформації на фізичні властивості кристалів типу  $In_4Se_3$ .

Таким чином, проведені нами дослідження показали, що наявність

четвертих степеней компонент хвильового вектора, які є визначальними у законі дисперсії (3), завжди приводять до зменшення функції густини станів. Спадаючий вигляд цієї функції подібний до одновимірного випадку квадратичного закону дисперсії. Виявлена тонка структура піків, яка залежить від співвідношення між параметрами в законі дисперсії, могла б знайти прояв у залежності концентрації носіїв від положення рівня Фермі і температури [16].

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. А.С.Давыдов. Высокотемпературная сверхпроводимость, Наукова думка, Киев, 1990.
2. D.M.Bercha, L.Yu.Kharkhalis, A.I.Bercha, M.Sznajder, Phys.Stat.Sol., **203**, 427 (1997)
3. Д.М.Берча, Л.Ю.Хархалис, А.И.Берча, М.Шнайдер, ФТП, **31**, 1299, (1997)
4. K.Nakao, J.Phys.Soc.Japan, **25**, 1344 (1968).
5. А.Н.Борец, Депон ВИНТИ N2475-75, Ужгород, 1975
6. А.Н.Борец в: Сложные стеклообразные халькогениды, Львов, 1987, с.19-31.
7. Е.И.Рашба, В.И.Шека в: Физика твердого тела, ч.2, Ленинград, 1959, с.162.
8. К.Д.Товстюк, Д.М. Берча, ФТТ, **6**, 662 (1964)
9. В.А.Березовец, И.И.Фарбштейн, ФТП, **29**, 965 (1995)
10. М.С.Бреслер, В.Г.Веселаго, Ю.В.Косичкин, ЖЭТФ **57**, 1479 (1967)
11. T. Doi, K.Nakao, H.Kamimura, J. Phys.Soc.Japan, **28**, 36 (1970).
12. О. В.Кибис, ФТП, **29**, 125 (1995)
13. Д.М.Берча, О.Б.Митин, И.М.Паренко, Л.Ю.Хархалис, А.И.Берча, ФТП, **28**, 1249 (1994).
14. Д.М.Берча, О.Б.Митин, Л.Ю.Хархалис, А.И.Берча, ФТП, **37**, 3233 (1995).
15. M.Sznajder, D.M.Bercha, L.Yu.Kharkhalis, Opto-electr.Rev., **5**, 123 (1997)
16. В.А.Кочелап, В.Н.Соколов, Б.Ю.Венгалис. Фазовые переходы в полупроводниках с деформационным электрон - фононным взаимодействием, Изд. Наукова думка. Киев 1984.

## ROLE AND NATURE OF PEAK-LIKE DENSITY OF STATES IN THE PHYSICS OF STRONG ANISOTROPIC SEMICONDUCTORS

**D.M.Bercha<sup>1</sup>, M.Sznajder<sup>2</sup>, L.Yu.Kharkhalis<sup>1</sup>, A.I.Bercha<sup>1</sup>**

1.Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

2.Institute of Physics, Pedagogical University, Rzeszow, Poland

The analysis of the subtle structure of one band peak-like state density, obtained for the  $In_4Se_3$  crystal, has been carried out. It is shown that the presence of the fourth powers of the wave vector components in the dispersion law always leads to the decrease of the state density function similar to one dimensional case of the quadratic dispersion law.