

Влияние температуры на термодинамическую плотность состояний в квантующем магнитном поле

© Г. Гулямов*, У.И. Эркабоев*, Н.Ю. Шарипбаев**

* Наманганский инженерно-педагогический институт,
160103 Наманган, Узбекистан

+ Наманганский инженерно-технологический институт,
116008 Наманган, Узбекистан

(Получена 25 декабря 2013 г. Принята к печати 26 марта 2014 г.)

Исследована зависимость плотности энергетических состояний (N_s) от температуры в квантующем магнитном поле. Показано, что с ростом температуры за счет термического уширения размываются уровни Ландау, и N_s превращаются в плотность состояний как в отсутствие магнитного поля. С помощью математической модели рассмотрена температурная зависимость распределения плотности энергетических состояний в сильных магнитных полях на полупроводниках. Показано, что сплошной спектр плотности состояний, измеренный при температуре жидкого азота, при низких температурах превращается в дискретные уровни Ландау. Математическое моделирование процессов с использованием экспериментальных значений сплошного спектра плотности состояний дает возможность рассчитать дискретные уровни Ландау. С помощью предложенной модели исследованы экспериментальные результаты, полученные для PbS. Из высокотемпературной N_s получены расчеты плотности состояний при низких температурах.

1. Введение

Квантование энергетических уровней в магнитном поле обуславливает вклад свободных носителей в диа- и парамагнитную восприимчивость кристаллов. Оно приводит также к существенному изменению вида плотности состояний как функции энергии [1].

Интерес к исследованиям осцилляций эффектов Шубникова–де-Гааза (ШдГ) и де-Гааза–ван Альфена (дГвА) возрос после их обнаружения в низкоразмерных системах, например, в наноструктурах кремния [2] и фторида кадмия [3] в сверхпроводящих оболочках. В этом случае энергетические позиции уровней размерного квантования определяют спектр уровней Ландау. В работе [4] были обнаружены и исследованы осцилляции эффектов ШдГ и дГвА в зависимости от температуры наноразмерных полупроводников.

Все эффекты, зависящие от плотности состояний, могут при некоторых условиях осциллировать с периодом, определяемым интервалом между двумя последовательными совпадениями уровня Ландау. Это обстоятельство проявляется в том, что в вырожденном электронном газе многие термодинамические, электрические и оптические величины, выражающиеся через плотность состояний, при определенных условиях осциллируют при изменении магнитной индукции и при низких температурах [5]. В работах [6–8] рассмотрена температурная зависимость плотности энергетических состояний, определенная методом релаксационной спектроскопии энергетических уровней в полупроводниках. Показано, что плотность поверхностных состояний зависит от температуры. Предложена методика определения плотности поверхностных состояний. Показано, что за счет температурного уширения энергетических уровней

дискретный спектр с повышением температуры превращается в сплошной энергетический спектр. С помощью разложения энергетического спектра плотности состояний по GN -функциям было показано, что величина энергетических щелей будет зависеть от температуры. В этих работах не рассматривается влияние температуры на термодинамическую плотность состояний в квантующем магнитном поле.

Цель данной работы — исследование температурной зависимости термодинамической плотности состояний в квантующем магнитном поле и влияния температуры образца на результаты обработки экспериментальных данных.

2. Производная по энергии от функции заполнения энергетических уровней дискретных состояний

Было показано, что температурная зависимость плотности состояний может быть описана разложением плотности состояний в ряд по GN -функциям (которое определяется производной по энергии вероятности заполнения энергетических уровней [6–8]). Исследованием плотности состояний с помощью разложения в ряд по GN -функциям удалось объяснить температурную зависимость энергетических щелей в полупроводниках. В этой модели температурная зависимость ширины запрещенной зоны обусловлена термическим уширением квазидискретных уровней вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны.

Температурная зависимость плотности энергетических состояний обусловлена термическим уширением дискретных энергетических состояний [6]. Термическое уширение может быть описано температурной зависимостью вероятности заполнения энергетических уровней.

† E-mail: gulyamov1949@mail.ru

Время термического выброса электронов из глубоких уровней E_i в разрешенную зону с энергией E определяется экспоненциальным множителем $\exp\left(\frac{E-E_i}{kT}\right)$, и вероятность опустошения глубоких заполненных уровней экспоненциально зависит от энергии состояния и температуры образца. Для поверхностных и объемных состояний температурная зависимость термического уширения энергетических уровней описывается производной по энергии от вероятности опустошения дискретных энергетических состояний $GN(E_0, E, T) = \frac{\partial \rho(E_0, E, T)}{\partial E_0}$, где ρ — вероятность термического опустошения энергетического состояния с энергией E .

Для описания температурной зависимости плотности состояний будем считать, что плотность состояний при абсолютном нуле температуры описывается известной функцией энергии $N_s(E_0)$. В частности, для свободного электронного газа в магнитном поле плотность состояний определяется следующим выражением [9]:

$$N_H(E, H) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \hbar\omega_H \times \sum_n \left\{ E - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_H \right\}^{-1/2}. \quad (1)$$

Каждое состояние с энергией E_i с ростом температуры уширяется. Температурные уширения состояния с энергией E_i описываются статистикой Шокли–Рида–Холла. Значение уширения описывается производной по энергии от вероятности опустошения состояния с энергией E ($\frac{\partial \rho}{\partial E} = GN(E)$). Результирующая плотность состояний, учитывающая вклад термического уширения всех состояний, будет описываться суммой всех уширений в рассматриваемой области энергий. Математически это сводится к разложению в ряд плотности состояний $N_s(E, T)$ при температуре T , по GN -функциям. Причем коэффициенты разложения $N_0(E_i)$ являются плотностью энергетических состояний, которую не учитывает термическое уширение уровней. При абсолютном нуле температуры GN -функция превратится в δ -функцию Дирака [6–8] (рис. 1). При стремлении к абсолютному нулю плотность состояний превратится в коэффициент разложения в ряд по GN -функциям. Если известна плотность состояний при конечной температуре $N_s(E, T)$, то с помощью разложения в ряд по GN -функциям можно вычислить плотность состояний при абсолютном нуле температуры. Знание экспериментально определенной плотности состояний при определенной температуре дает возможность с помощью разложения в ряд по GN -функциям найти плотность состояний при любой конечной температуре. В работе [6] было показано, что сплошной спектр, определенный при комнатной температуре, возникает за счет термического уширения конечного числа дискретных уровней в запрещенной зоне. Термическое уширение энергетических состояний зоны проводимости, запрещенной зоны и валентной

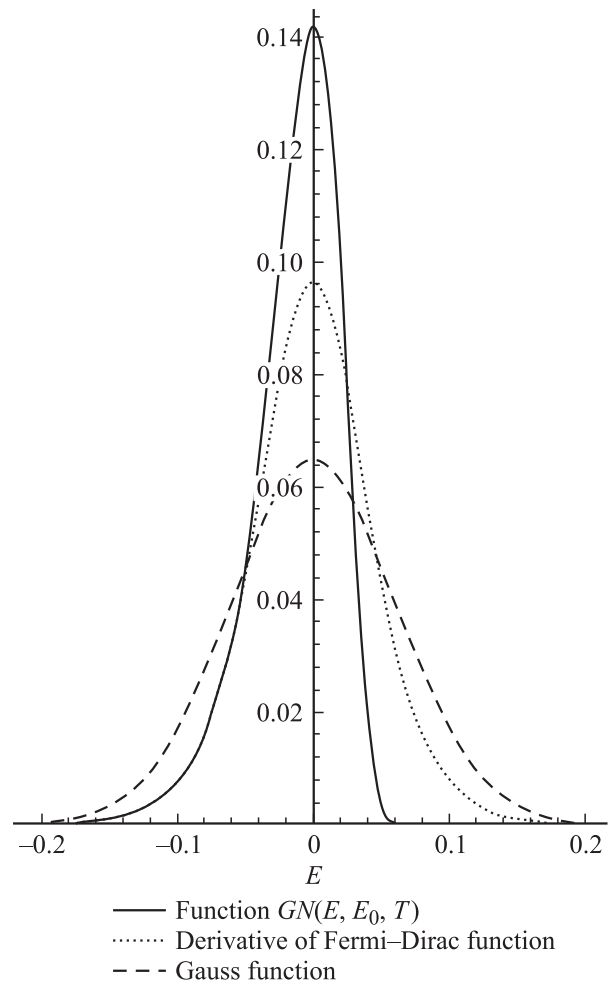


Рис. 1. Вид функций GN , производная функции Ферми–Дирака и функция Гаусса при комнатной температуре.

зоны полупроводника объясняет температурную зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника [7].

3. Температурная зависимость термодинамической плотности состояний в квантующем магнитном поле

В квантующем магнитном поле энергетический спектр электронов сильно изменяется [9,10]. Движение электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, становится ограниченным. Энергия электронов по направлению к плоскости, перпендикулярной магнитному полю, квантуется. Энергия свободных электронов принимает следующий вид [9,10]:

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}. \quad (2)$$

Изменение энергетического спектра приводит к изменению плотности энергетического состояния. Полное чис-

ло уровней, связанных с данным макроскопическим объемом в k -пространстве, остается в новой схеме тем же, что и прежде. Влияние магнитного поля сводится к тому, что оно вызывает квантование орбиты в k -пространстве и заставляет свободные электроны конденсироваться на ближайших орбитах [9].

Для полной плотности энергетических состояний с энергией меньше ε имеем

$$N_H(E, H) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \hbar\omega_H \times \sum_n \left\{ E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_H \right\}^{-1/2}; \quad (3)$$

при $\omega_H \rightarrow 0$ это выражения переходит в

$$N_s(E) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}. \quad (4)$$

В этом выражении не учитывается температурное уширение энергетических уровней. Чтобы учитывать температурную зависимость плотности состояний, разложим $N_s(E, T)$ в ряд по GN -функциям. Тогда получится плотность энергетических состояний, зависящих от температуры.

Термическое уширение уровней в магнитном поле приводит к сглаживанию дискретных уровней. Термическое уширение будет учитываться с помощью GN -функции. Плотность состояний зависит от температуры, как в работах [6–8]. $N(E, T)$ разложим в ряд по GN -функциям:

$$N_s(E, H, T) = \sum_{i=1}^n N_H(E_{i,H}) GN(E_i, E, T). \quad (5)$$

Здесь H — напряженность магнитного поля, $\omega_c = \frac{eH}{m^*c}$ — циклотронная частота, m^* — циклотронная эффективная масса. $N_{si}(E_i, H, E)$ — плотность состояний в квантующем магнитном поле при абсолютном нуле температуры.

Рассматриваемый интервал энергии в разрешенных зонах и запрещенной зоне разделим на равные мелкие части значения энергий. Производя суммирование по формуле (5), получим $N_s(E, T)$, зависящий от температуры. Это выражение при $T \rightarrow 0$ превращается в (1). В этом случае уровни Ландау проявляются резко. С ростом температуры резкие всплески начинают сглаживаться (рис. 2) и при $kT \sim \hbar\omega$ осцилляции плотности состояний постепенно исчезают при достаточно высоких температурах $kT > \hbar\omega$, $N_s(T, E, H)$ превращается в сплошную плотность состояний и не будет чувствоваться магнитного поля. $N_s(T, E, H)$ превратится в плотность состояний в отсутствие магнитного поля. Это позволяет получить плотность состояний, которая зависит от температуры. На рис. 2 приведена плотность состояний в магнитном поле $\hbar\omega_c = 0.01$ эВ при температуре $T = 0.4$ К, $kT = 4 \cdot 10^{-5}$ эВ, $\frac{\hbar\omega_c}{kT} = 0.25 \cdot 10^3 = 250$,

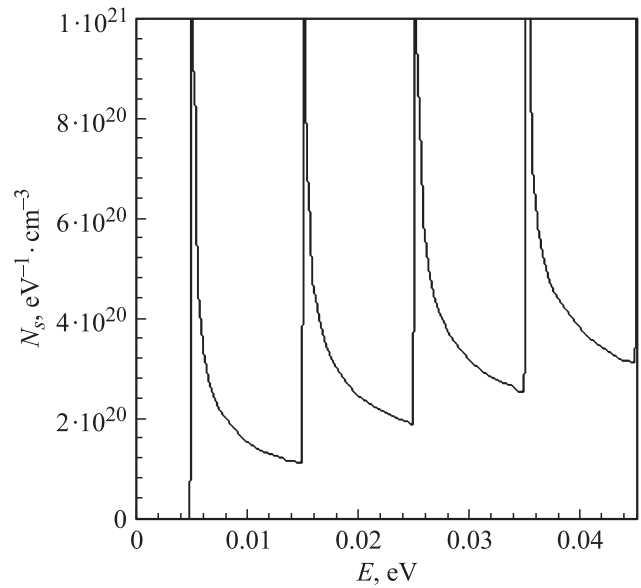


Рис. 2. Плотность энергетических состояний в сильном магнитном поле $H = 10$ кЭ при температуре $T = 0.4$ К, вычисленной по формуле (5).

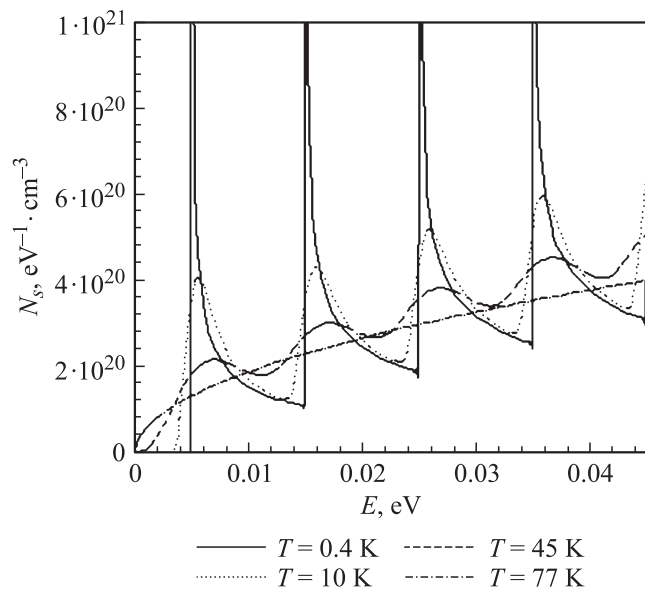


Рис. 3. Температурная зависимость плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле.

$kT \ll \hbar\omega_c$. При таких низких температурах влияние термического уширения слабое, и плотность состояний не чувствует отклонения N_s от идеальной формы, которая не учитывает влияние температуры. На рис. 3 приведена $N_s(E, H)$ для температур 0, 4, 10, 45, 77 К. Как видно из рисунков, с ростом температуры резкие пики уровней Ландау, обусловленные квантованием уровней энергии электронов в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, постепенно сглаживаются. Это приводит к тому, что при температуре $T = 45$ К, $kT = 4.5 \cdot 10^{-3}$ эВ,

$kT \approx \hbar\omega_c$ пики уровней Ландау становятся незаметными. При температуре 77 К пики уровней Ландау практически не заметны и совпадают с плотностью состояний в отсутствие магнитного поля.

Изменение $\omega_c = \frac{eH}{m^*c}$ меняет энергетическое расстояние между пиками уровней Ландау. Таким образом, осцилляции плотности состояний наблюдаются при температурах $kT \ll \hbar\omega_c$. Начиная с температур порядка $0.5kT \sim \hbar\omega_c$ осцилляции плотности состояний, обусловленные квантованием Ландау, не наблюдаются. В этом случае измерения дают сплошной спектр плотности состояний. Для обнаружения квантовых уровней необходимо решать обратную задачу. В этом случае надо найти дискретный уровень, обусловленный квантованием Ландау. Для этого необходимо измерить $N_s(E, T)$ при температуре эксперимента, затем на основе расчетов получить $N_s(E, T)$ при низких температурах. Методика определения N_s может быть построена следующим образом. Определим экспериментально $N_s(T, E, H)$ для двух различных значений температур T_1 и T_2 : $N_s(T_1, E, H)$, $N_s(T_2, E, H)$ таким образом, чтобы $N_s(E, H)$ было одинаково для обоих $N_s(T_1)$ и $N_s(T_2)$. То же самое можно проделать для нескольких значений напряженности магнитного поля H_1 и H_2 . Для повышения точности определения $N_s(E, H)$ можно использовать результаты экспериментально найденных $N_s(T, E, H)$ более трех или четырех при разных температурах. Если результаты моделирования $N_s(T, E, H)$ для различных значений T и H совпадают, тогда нахождение плотности состояний можно считать завершённой, при этом измерения N_s при различных значениях T и H должны дополнить друг друга и это должно обеспечить достоверность полученных результатов. В этом случае $N_s(E, H)$, найденная при любой температуре по методу разложения $N_s(E, T)$ в ряд по GN -функциям, должна получиться одинаковой.

4. Обработка экспериментальных результатов

Проанализируем плотность состояний конкретных полупроводников в квантующем магнитном поле. На рис. 4 приведена плотность состояний при температуре измерения $T = 77$ К и $H = 30$ кЭ PbS [1,11]. В пределах точности эксперимента плотность состояний — непрерывная, монотонно растущая гладкая функция энергии. На рисунке осцилляции плотности состояний не наблюдаются. Это свидетельствует о том, что $\hbar\omega_c < kT$. Разложим этот график плотности состояний в ряд по GN -функциям. При разложении исходным брать идеальный $N_s(E_0, H)$ по формуле (5) (рис. 4, b). Однако в отличие от идеального будем учитывать зависимость массы электронов от энергии. Пики $N_s(E)$ будем располагать в значениях энергии кратными по $\hbar\omega_c$, однако высоту пиков будем считать зависящей от энергии. Затем, подбирая коэффициенты в сумме перед $N_s(E_0, H)$,

подгоняем теоретический $N_s(E, H)$ к экспериментальным, причем, подгоночным параметром и являются коэффициенты перед $N_s(E_0, H)$. Далее в формуле (5) будем понижать температуру. Начиная с некоторой $T = 20$ К гладкая кривая начинает осциллировать, и выделяются уровни Ландау (рис. 4, c). Таким образом, при температуре $kT \ll \hbar\omega_c$ уровни Ландау начинают резко выделяться как отдельные пики $N_s(E, T)$.

В сильном магнитном поле сплошной спектр энергетических состояний сильно деформируется и превращается в осциллирующие линии, с повышением температуры дискретные уровни размываются, и плотности энергетических состояний превращаются в сплошной спектр. В эксперименте плотности состояний зависят от энергии, температуры и эффективной массы. Эффективная масса зависит от энергии. ω_c зависит от эффективной массы. Таким образом, с ростом энергии меняется расстояние между пиками.

При постоянной эффективной массе зависимость плотности состояний от энергии имеет вид $\rho \sim \sqrt{E - E_c}$. Если с ростом энергии электронов увеличивается эффективная масса электронов, то уменьшается расстояние между уровнями Ландау, кривая плотности состояния перемещается в сторону больших значений плотности состояний и перемещается вверх по оси плотности состояний. Наоборот, если $m(E)$ уменьшается с ростом энергии, то кривая плотности состояний перемещается вниз по энергии вдоль оси плотности состояний.

Таким образом, магнитное поле сдвигает плотность состояний в плоскости $N_s - E$ даже при температурах, когда уровни Ландау не заметны, и за счет термического уширения.

Рассмотрим влияние изменения массы на плотность состояний в магнитном поле. Это может быть рассмотрено как отклонение закона дисперсии электронов от параболичности.

Рассмотрим плотность состояний в магнитном поле для случаев $\frac{\partial m}{\partial \epsilon} > 0$, $\frac{\partial m}{\partial \epsilon} = 0$ и $\frac{\partial m}{\partial \epsilon} < 0$. С ростом магнитного поля $N_s(E, H)$ смещается в сторону меньших значений энергий и поднимается вверх по оси плотности состояний.

Сравнение теории с экспериментом приведено на рис. 4: $N_s(E, H, T)$ при различных значениях магнитных полей. Как видно из рис. 4, с ростом напряженности $N_s(E, H)$ сжимается в сторону меньших энергий и поднимается вверх по оси N_s . Энергетический спектр и закон дисперсии могут меняться в различных точках k -пространства. Это означает, что расстояния между уровнями Ландау в различных частях k -пространства будут разными.

Таким образом, исследования плотности состояний в квантующих полях при различных температурах дают возможность определить зависимость эффективной массы от энергии. Изменение наклона $N_s(E)$ в магнитном поле, сжатие и растяжение $N(E)$ в магнитном поле свидетельствуют о зависимости эффективной массы от

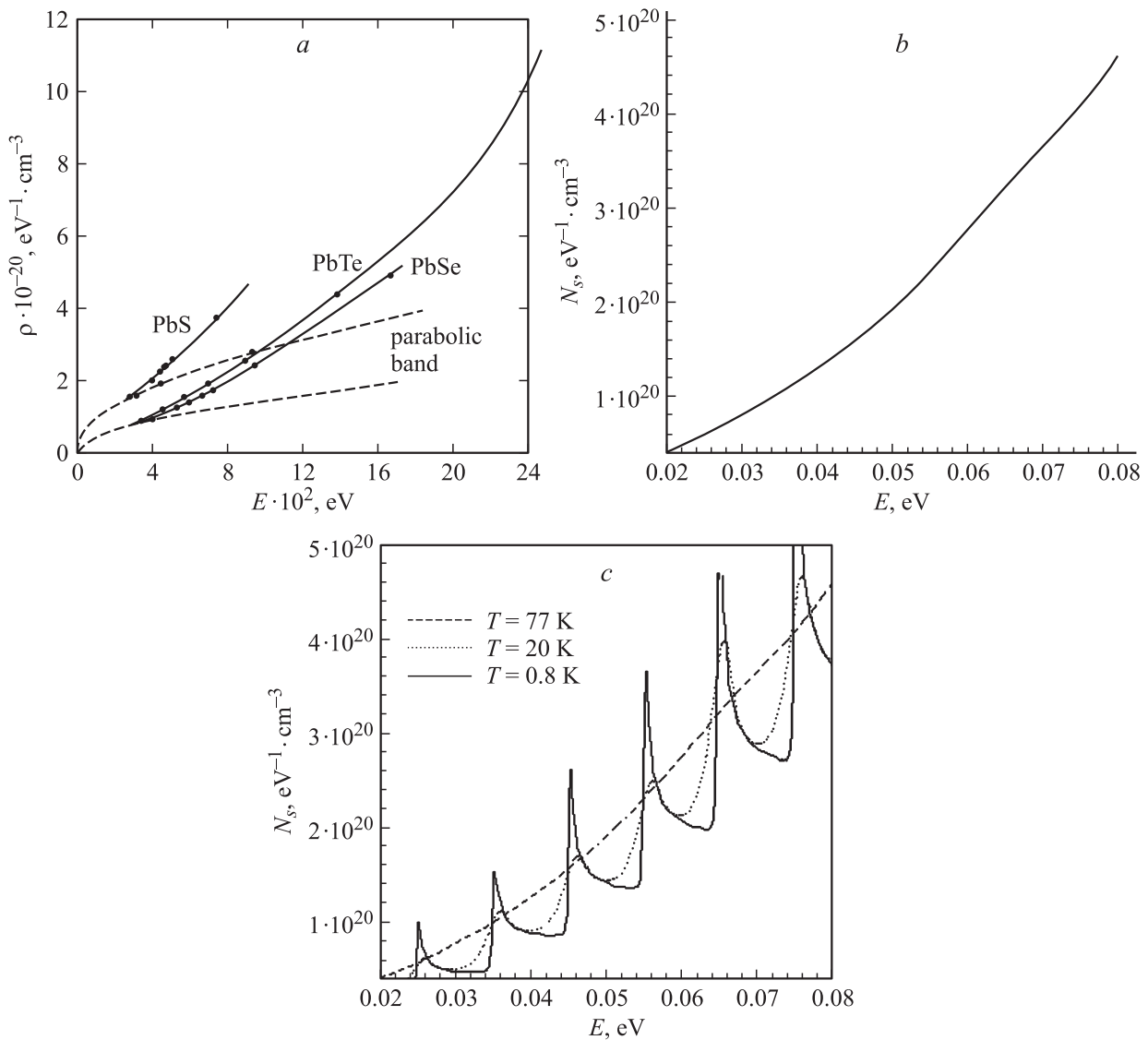


Рис. 4. Изменение плотности энергетических состояний с понижением температуры в сильных магнитных полях. *a* — эксперимент для PbS в $H = 32 \text{ кЭ}$ [1,11], *b* — модельный расчет для $T = 77 \text{ К}$, *c* — плотность энергетических состояний в магнитном поле для трех разных значений температур. С понижением температуры сплошной спектр плотности энергетических состояний стягивается на уровни Ландау в магнитных полях.

энергии. Хотя квантование энергии электронов и уровни Ландау не проявляются, зато трансформация искривления плотности состояний свидетельствует о квантовании энергии в магнитном поле. Это происходит даже при размывании уровней Ландау в магнитном поле. При высоких температурах уровни Ландау не различимы, однако за счет сжатия или растяжения расстояния между уровнями Ландау кривая $N_s(E, H)$ меняет свои размеры и форму.

5. Заключение

Разработана методика определения плотности энергетических состояний в квантующем магнитном поле.

Исследована зависимость плотности энергетических состояний от температуры в квантующем магнитном поле. Для параболического закона дисперсии показано, что плотность состояний в сильном магнитном поле при увеличении температуры совпадает с плотностью состояний в образце без магнитного поля. Показано, что с ростом температуры уровни Ландау за счет термического уширения размываются и N_s превращаются в плотность состояний в отсутствие магнитного поля. С помощью предложенной модели исследованы экспериментальные результаты PbS [11]. Используя предложенную модель из высокотемпературной N_s , рассчитана низкотемпературная плотность состояний. Моделирование температурной зависимости позволило определить уровни Ландау в PbS в широких температурных спектрах.

Список литературы

- [1] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS (М., Наука, 1968) гл. 5, с. 229.
- [2] Н.Т. Баграев, Л.Е. Клячкин, А.А. Кудрявцев, А.М. Маляренко, В.В. Романов. ФТП, **43**, 1481 (2009).
- [3] Н.Т. Баграев, О.Н. Гимбицкая, Л.Е. Клячкин, А.А. Кудрявцев, А.М. Маляренко, В.В. Романов, А.И. Рыскин, А.С. Щеулин. ФТП, **44**, 1372 (2010).
- [4] Н.Т. Баграев, Е.С. Брилинская, Э.Ю. Даниловский, Л.Е. Клячкин, А.М. Маляренко, В.В. Романов. ФТП, **46**, 90 (2012).
- [5] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников (М., Наука, 1990) гл. 5, с. 181.
- [6] Г. Гулямов, Н.Ю. Шаробаев. ФТП, **45**, 178 (2011).
- [7] Г. Гулямов, Н.Ю. Шаробаев, У.И. Эркабоев. ФИП, **10**, 366 (2012).
- [8] Г. Гулямов, И.Н. Каримов, Н.Ю. Шаробаев, У.И. Эркабоев. Узб. физ. журн., **12**, 143 (2010).
- [9] Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. (М., Мир, 1974) гл. 9, с. 349.
- [10] И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов. Электронная теория металлов (М., Наука, 1971) ч. 2, с. 119.
- [11] Yu.I. Ravich. J. de Physique, **29**, 114 (1968).

Редактор Л.В. Беляков