**BAKI UNİVERSİTETİNİN XƏBƏRLƏRİ**

*№2 Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası 2014*

# FİZİKA

**УДК 538.97; 539.23**

## УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ

**Б.М.АСКЕРОВ, С.Р.ФИГАРОВА, М.М.МАХМУДОВ, Г.Н.ХАСИЕВА**
***Бакинский Государственный Университет***
***figarov@bsu.az***

*В работе исследовано уравнение состояния как вырожденного, так и невырожденного двумерного электронного газа в квантовой яме сложной формы. Показано, что в случае вырожденного электронного газа давление немонотонно зависит от параметра квантовой ямы, в то время как в невырожденном случае эта зависимость монотонная. Кроме того, показано, что давления двумерного электронного газа значительно увеличивается по сравнению с трехмерным случаем.*

**Ключевые слова:** уравнение состояния, двумерный электронный газ, квантовая яма сложной формы.

Исследованию свойств двумерного электронного газа в квантовых ямах в последнее время уделяется большое внимание [1-3]. Кроме чисто научного интереса к таким объектам, они представляются весьма перспективными для твердотельной электроники [4].

Настоящая работа посвящена изучению свойств двумерного электронного газа и определению его уравнения состояния. Для этого, используя энергетического спектра двумерного электронного газа, найден большой термодинамический потенциал носителей тока. На основе известных термодинамических соотношений определены химический потенциал и уравнение состояния двумерного электронного газа. Получены общие выражения уравнения состояния и химического потенциала от концентрации в сложной квантовой яме. Рассматриваемая квантовая яма в предельных случаях переходит в известные выражения как для прямоугольной, так и для параболической потенциальной ямы. Показано, что с увеличением концентрации носителей тока зависимость химического потенциала от концентрации носит немонотонный характер.

Энергетический спектр носителей тока в квантовой яме имеет вид:

$$\varepsilon_{n,k_x,k_y} = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m} + \varepsilon_n , \qquad (1)$$

здесь $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$.

В данной работе рассматривается энергетический спектр двумерного электронного газа в квантовой яме с потенциальной энергией $U = U_0 / \cos^2(z/a)$, который, исходя из решения уравнения Шредингера, примет вид [5]:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 \left( 1 + 2n + \sqrt{1 + \frac{U_0}{\varepsilon_0}} \right)^2 , \qquad (2)$$

здесь $\varepsilon_0 = \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$ при $n = 0$ и $U_0 = 0$, $a$ - полуширина квантовой ямы, $U_0$ - минимум потенциальной энергии, $n$ - квантовое число.

В пределе больших квантовых чисел выражения (2) совпадает со спектром бесконечно глубокой прямоугольной потенциальной ямы:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2} .$$

В противоположном предельном случае – для малых квантовых чисел - этот спектр совпадает со спектром гармонического осциллятора- параболическая квантовая яма:

$$\varepsilon_n = U_0 + \hbar\omega_0 (n + 1/2) ,$$

где $\omega_0 = \sqrt{2\pi^2 U_0 / ma^2}$ - частота гармонического осциллятора.

Таким образом, две модельные задачи, часто используемые в квантовой механике, - спектр энергии частицы в прямоугольном потенциальном ящике и спектр энергии гармонического осциллятора - являются частными случаями спектра (2).

Для волновой функции получим:

$$\psi = (1 + \xi^2)^{q/2} F[q - s, q + s + 1, q + 1, (1 + \xi)/2] , \qquad (3)$$

где $F(q - s, q + s + 1, q + 1, (1 + \xi)/2)$ - гипергеометрическая функция, $\xi = tg\, z/a$, $q = \sqrt{2m\varepsilon}\, a/\hbar$, $2mU_0 a^2/\hbar^2 = s(s+1)$, $s = \left(-1 - \sqrt{1 + 8mU_0 a^2/\hbar^2}\right)/2$ .

Можно показать, что для энергетического спектра (2), функция плотности состояний двумерного электронного газа имеет вид [6]:

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2 a} \sum_n \Theta(\varepsilon - \varepsilon_n) , \qquad (4)$$

здесь $\Theta(\varepsilon - \varepsilon_n)$ - ступенчатая функция Хэвисайда.

Для определения явного вида уравнения состояния будем исходить из большого термодинамического потенциала электронного газа, который имеет вид:

$$\Omega(T,V,\mu) = -2k_0T \sum_{n,k_x,k_y} \ln\left[1+\frac{\mu-\varepsilon(n,k_x,k_y)}{k_0T}\right], \quad (5)$$

где $\mu$ химический потенциал. Теперь от суммирования перейдем к интегралу с помощью преобразования $\sum_{k_x,k_e} ... \Rightarrow \frac{L_1L_2}{(2\pi)^2}\int(...)dk_x dk_y$. Тогда, для $\Omega$ получим:

$$\Omega = -\frac{Vk_0T}{2\pi a}\sum_n \int \ln\left[1+\frac{\mu-\varepsilon(n,k_x,k_y)}{k_0T}\right]\frac{dk_\perp^2}{d\varepsilon}d\varepsilon, \quad (6)$$

здесь $L_1$ и $L_2$ - соответствующие размеры основной области пленки в плоскости ($x,y$). Один раз интегрируя по частям выражение (6), получим:

$$\Omega = -\frac{V}{2\pi a}\sum_n \int k_\perp^2(\varepsilon,n) f(\varepsilon)d\varepsilon,$$

где $f(\varepsilon) = [1+\exp(\varepsilon-\mu)/k_0T]^{-1}$- равновесная функция распределения Ферми. Учитывая, что $k_\perp^2(\varepsilon,n) = 2m(\varepsilon-\varepsilon_n)/\hbar^2$, получим:

$$\Omega = -\frac{Vm}{\pi a\hbar^2}\sum_n \int_{\varepsilon_n}^{\infty}(\varepsilon-\varepsilon_n) f(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (7)$$

Формулу (7) можно выразить через интегралы Ферми [7]:

$$\Omega = -\frac{Vm(k_0T)^2}{2\pi\hbar^2 a}\sum_n F_2\left(\frac{\mu-\varepsilon_n}{k_0T}\right). \quad (8)$$

Используя асимптотику интеграла Ферми, в случае вырожденного электронного газа для $\Omega$ имеем:

$$\Omega = -\frac{Vm}{2\pi\hbar^2 a}\sum_n (\mu-\varepsilon_n)^2 - \frac{2(k_0T)^2V\pi}{3a}. \quad (9)$$

В случае невырожденного электронного газа для $\Omega$ получим:

$$\Omega = -\frac{Vm(k_0T)^2}{\pi\hbar^2 a}\sum_n \exp\left(\frac{\mu-\varepsilon_n}{k_0T}\right). \quad (10)$$

Исходя из (7), для концентрации $n_{эл} = -V^{-1}(\partial\Omega/\partial\mu)_{T,V}$ и уравнения состояния $P = -(\partial\Omega/\partial V)_{\mu,T}$ двумерного электронного газа в квантовой яме сложной форме найдем:

$$n_{эл} = \frac{m}{\pi a\hbar^2}\sum_n \int_{\varepsilon_n}^{\infty}(\varepsilon-\varepsilon_n)\left(-\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}\right)d\varepsilon, \quad (11)$$

$$P == \frac{m}{2\pi a\hbar^2}\sum_n \int_{\varepsilon_n}^{\infty}(\varepsilon-\varepsilon_n)^2\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)d\varepsilon\,. \qquad (12)$$

Выражения, полученные для данных термодинамических величин (11)-(12), справедливы при любой степени вырождения электронного газа.

В случае вырожденного электронного газа из (9) в первом приближении по вырождению для концентрации имеем:

$$n_{эл} = \frac{m}{\pi a\hbar^2}\sum_{n=0}^{\infty}(\mu-\varepsilon_n)\,. \qquad (13)$$

Для энергетического спектра (2) формула (13) примет вид:

$$n_{эл} = \frac{m}{\pi\hbar^2 a}n\left[\mu-U_0-2\sqrt{\varepsilon_0^2+\varepsilon_0 U_0}\,(n+2)-\frac{4}{3}\varepsilon_0(n^2+3n+2)\right]. \qquad (14)$$

Используя выражение (14), в случае вырожденного электронного газа получим формулу для уровня Ферми:

$$\mu_F = \frac{n_{эл}\pi\hbar^2 a}{mn}+U_0+2\sqrt{\varepsilon_0^2+\varepsilon_0 U_0}\,(n+2)+\frac{4}{3}\varepsilon_0(n^2+3n+2)\,. \qquad (15)$$

Из выражения (15) следует, что уровень Ферми обратно пропорционален толщины пленки.

Для химического потенциала невырожденного электронного газа из (11) получим:

$$\mu = U_0+\varepsilon_0+k_0T\ln\frac{n_{эл}\pi\hbar^2 a}{mk_0TZ}\,, \qquad (16)$$

где $Z=\sum_{n=0}^{n_0}\exp\frac{-\varepsilon_0(1+2n)^2-2\sqrt{U_0\varepsilon_0+\varepsilon_0^2}\,(1+2n)}{k_0T}$.

Из формулы (16) видно, что химический потенциал невырожденного электронного газа уменьшается с увеличением температуры, что согласуется с результатами работы [1]. Исследуя зависимость химического потенциала от концентрации можно сделать вывод, что она немонотонная, при малых концентрациях химический потенциал растет, а затем выходит на насыщение.

В общем случае уравнение состояния двумерного электронного газа определяется из двух уравнений:

$$\begin{cases}\Omega=-PV\\ n_{эл}=\dfrac{m}{\pi a\hbar^2}\sum\limits_n\int\limits_{\varepsilon_n}^{\infty}(\varepsilon-\varepsilon_n)\left(-\dfrac{\partial f}{\partial\varepsilon}\right)d\varepsilon\end{cases}. \qquad (17)$$

В случае вырожденного электронного газа, исходя из (17) и учитывая (12), для уравнения состояния получим:

$$P=\frac{n_{эл}\nu}{2n}\left[1+n\frac{x\varepsilon_0}{\nu}+n(n+2)\frac{2\varepsilon_0}{\nu}\sqrt{1+x}+\frac{4}{3\nu}\varepsilon_0 n(n^2+3n+2)\right]^2\left\{1-\frac{4\varepsilon_0}{3\mu}\left[2n^2+6n+7-2xn-\right.\right.$$

$$\left.-4\sqrt{1+x}(n+2)\right]+\frac{\varepsilon_0^2}{\mu^2}\left[3(n^4+5n^3+12n^2+11n+10)+8\sqrt{1+x}(0{,}1x+n^3+4n^2+7n+4)+\right.$$

$$\left.\left.+x(8n^2+24n+24+x)\right]+\frac{3(k_0T)^2}{\mu^2}\right\}, \qquad (18)$$

здесь

$$\mu=\nu\left[\frac{1}{n}+\frac{x\varepsilon_0}{\nu}+\frac{2\varepsilon_0}{\nu}\sqrt{1+x}(n+2)+\frac{4\varepsilon_0}{3\nu}(n^2+3n+2)\right],$$

и введены обозначения $\nu=n_{эл}\pi\hbar^2 a/m$, $x=U_0/\varepsilon_0$.

На основе формулы (18) построена зависимость давления вырожденного двумерного электронного газа от квантового числа и параметра квантовой ямы (рис.1). При этом использовались следующие значения: $m=0{,}067m_0$, $\varepsilon_0=60\,meV$, $a=10\,nm$, $n=10^{25}m^{-3}$ - для вырожденного случая, $n=10^{18}m^{-3}$ - для невырожденного случая.

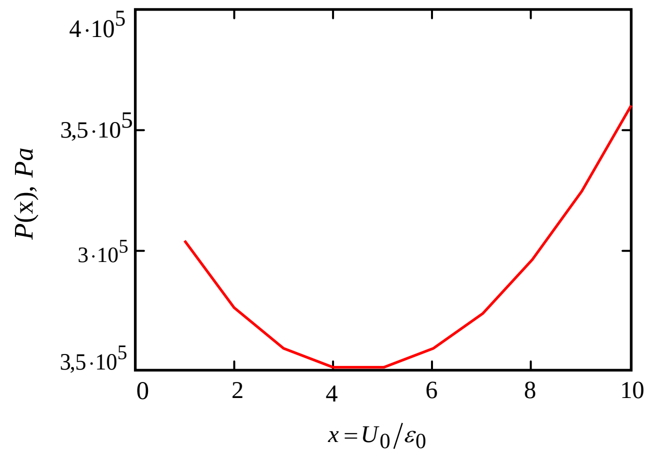


**Рис.1.** Зависимость давления вырожденного двумерного газа от параметра квантовой ямы $U_0/\varepsilon_0$.

Из рис.1 видно, что давление немонотонно зависит от параметра квантовой ямы. При малых значениях квантового числа ( параболическая квантовая яма) давление уменьшается, в то время как для больших значений (прямоугольная квантовая яма ) давление растет.

Для уравнения состояния невырожденного электронного газа из (12) имеем:

$$P = \frac{m(k_0 T)^2}{\pi\hbar^2 a} \exp\frac{\mu - U_0 - \varepsilon_0}{k_0 T} Z \, , \qquad (19)$$

где химический потенциал определяется из уравнения:

$$n_{эл} = \frac{m k_0 T}{\pi\hbar^2 a} \exp\frac{\mu - U_0 - \varepsilon_0}{k_0 T} Z \, , \qquad (20)$$

Из выражений (19)-(20) следует, что $P = n_{эл} k_0 T$ .

На основе численного расчета по формулам (19) и (20) построена зависимость давления невырожденного двумерного электронного газа от параметра квантовой ямы (рис.2). Из рис.2 следует, что, в отличие от вырожденного случая, в невырожденном случае зависимость давления от параметра квантовой ямы монотонная и уменьшается с увеличением потенциала квантовой ямы.

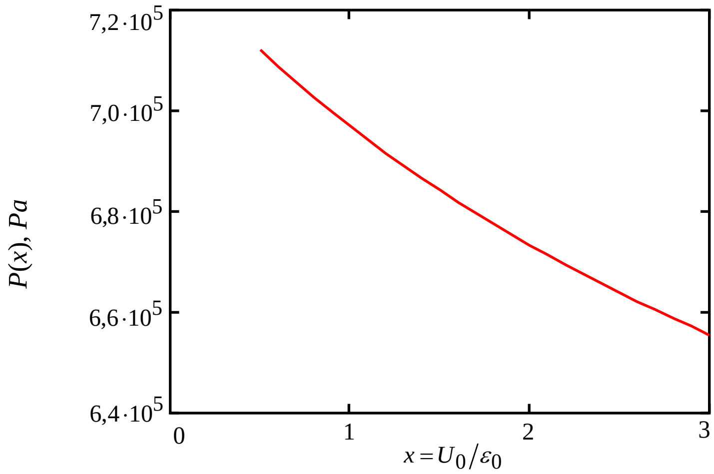


**Рис.2**. Зависимость давления невырожденного двумерного газа от параметра квантовой ямы $U_0 / \varepsilon_0$ .

Из полученных выражений следует, что давление двумерного электронного газа на порядок больше давления трехмерного.

Кроме того отметим, что, изучая зависимость давления двумерного электронного газа от концентрации и параметра квантовой ямы, можно сделать ряд заключений о форме квантовой ямы двумерного электронного газа.

### ЛИТЕРАТУРА


1. Ramos A.C.A., Farias G.A., Almeida N.S. Thermodinamics of a Quasi-two Dimensional Electron Gas: Effects of Magnetic Fields, Temperature and Finite Width. Physic E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures. 43, 2011. 1878-1881 p .
2. Vagner D. Thermodynamics of Two-Dimensional Electron on Landau Levels. HIT Journal of Science and Engineering A, 3, 2006. 102-152 p.
3. Zawadzki W., Thermodynamics of Two-dimensional Electron Gas in a Magnetic Field. Springer

Series in Solid-State Sciences. 53, 1984, 79-85 p.
4. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники. М.: Логос. 2006, 496 с.
5. Щварцбург А.Б. Дисперсия электромагнитных волн в слоистых и неистационарных средах. Успехи физических наук, 170, 2000, с.1297-1324.
6. Əsgərov B.M., Fiqarova S.R., Orucova G.N. Kvant çuxurunda elektronların hal sıxlığı funksiyası BDU Xəbərləri, Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, № 4, 2012, s.101-105.
7. Askerov B.M. Electron Transport Phenomena in Semiconductors. World Scientific, Singapore, 1994. 412 p.

## MÜRƏKKƏB FORMALI KVANT ÇUXURUNDA ELEKTRON QAZININ HAL TƏNLİYİ

**B.M.ƏSGƏROV, S.R.FİQAROVA, M.M.MAHMUDOV, G.N.XASIYEVA**

### XÜLASƏ

İşdə mürəkkəb formalı kvant çuxurunda cırlaşmış və cırlaşmamış ikiölçülü elektron qazının hal tənliyi tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, cırlaşmış elektron qazının təzyiqi kvant çuxurunun parametrindən qeyi-monoton, cırlaşmamış halda isə monoton asılıdır. Bundan başqa, təyin edilmişdir ki, ikiölçülü elektron qazının təzyiqi üçölçülü qazın təzyiqi ilə müqayisədə bir tərtib böyük olur.

**Açar sözlər:** hal tənliyi, ikiölçülü elektron qazı, mürəkkəb formalı kvant çuxuru.

## EQUATİON OF STATES OF ELECTRON GAS İN QUANTUM WELL OF COMPLICATED FORM

**B.M.ASGAROV, S.R.FİGAROVA, M.M.MAHMUDOV, G.N.KHASIYEVA**

### SUMMARY

We have calculated the equation of states both degenerate and nondegenerate two-dimensional electron gas in the quantum well of complicated form. It is shown that in the case of a degenerate electron gas pressure nonmonotonically depends on the parameter of the quantum well, while in the nondegenerate case, this dependence is monotonic. Furthermore, it is shown that the pressure of the two-dimensional electron gas is monotonic and significantly to order greater than in a three-dimensional case.

**Key words:** equation of states, two-dimensional electron gas, the quantum well of complicated form.

*Поступила в редакцию: 17.02.2014 г.*
*Подписано к печати: 04.07.2014 г.*