

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
ЕЛЕКТРОТЕХНИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Душан Б. Топаловић

**АНАЛИЗА И МОДЕЛОВАЊЕ
ЕЛЕКТРОНСКИХ СТАЊА У HgTe
НАНОСТРУКТУРАМА**

докторска дисертација

Београд, 2020.

UNIVERSITY OF BELGRADE
SCHOOL OF ELECTRICAL ENGINEERING

Dušan B. Topalović

**ANALYSIS AND MODELING OF ELECTRON
STATES IN HgTe NANOSTRUCTURES**

Doctoral Dissertation

Belgrade, 2020.

Ментор:

др Владимир Арсоски, ванредни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

Чланови комисије:

др Милан Тадић, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Петар Лукић, редовни професор
Универзитет у Београду – Машински факултет

др Јелена Радовановић, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Петар Матавуљ, редовни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

др Владимир Рајовић, ванредни професор
Универзитет у Београду – Електротехнички факултет

Датум одбране: _____

Захвалница

Велику захвалност дугујем ментору, професору Владимиру Арсоком на предложеној теми за истраживање, стрпљењу и издвојеном времену. Пажљивом анализом мог рада и корисним сугестијама помогао је да успешно савладам проблеме током израде докторске дисертације.

Захваљујем се професору Милану Тадићу зато што је имао довољно вере у мене и пружио ми шансу да укорачим у свет науке. Занимљивим предавањима професор ме је заинтересовао за област наноелектронике, док су његови савети у значајној мери унапредили квалитет мог научног рада.

Посебно бих желео да се захвалим др Немањи Чукарићу на пруженој помоћи приликом реализације програмских кодова за вишезонске k - r моделе и модел јаке везе. Његови стручни савети су ми олакшали разумевање коришћених методолошких процедура на основу којих су произашли резултати из ове дисертације.

I would like to express my gratitude to Professor François Peeters for his generous efforts in helping me to prepare my papers for publication.

Колегама из Института за нуклеарне науке „Винча“ сам захвалан на разумевању које су показали, нарочито у периоду када сам писао докторску дисертацију.

На крају, али и најважније, желим да се захвалим мојим родитељима Војимирки и Браниславу, на исказаној родитељској љубави и безусловној подршци у најтежим тренуцима када сам хтео да одустанем.

Ову докторску дисертацију посвећујем мојим родитељима. Мама и тата хвала Вам на свему!

Наслов дисертације: Анализа и моделовање електронских стања у HgTe наноструктурама

Сажетак: Истражена су електронска стања жива-телурид (хемијска ознака: HgTe) наноструктура различитих димензија коришћењем **k · p** теорије и метода јаке везе. Анализиране су асиметричне двоструке HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантне јаме, дводимензионе (2Д) HgTe нанотачке (квантне тачке) и 2Д HgTe нанопрстенови (квантни прстенови). Представљене су најчешће коришћене технологије производње размотрених наноструктура. Објашњена су основна својства HgTe, CdTe и Cd_xHg_{1-x}Te.

Детаљно су описани теоријски модели. Представљене су основе вишезонске **k · p** теорије која је коришћена за моделовање електронске структуре асиметричних двоструких HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама. Описан је поступак израчунавања зонске структуре масивног полупроводника помоћу пертурбационог **k · p** модела. Да би се могло спровести моделовање зонске структуре полупроводничких квантних јама, извршена је генерализација пертурбационог **k · p** модела у оквиру теорије анвелопних функција. Добијени **k · p** хамилтонијан, који даје потпун опис електрона и шупљина у хетероструктури са периодичним потенцијалом, теоријски представља бесконачну матрицу коју није могуће дијагонализовати. Због тога је потребно редуковати опис зонске структуре на околину фундаменталног енергетског процепа. То је могуће урадити у оквиру теорије пертурбације у присуству квазидегенерације (Левдинов ренормализациони метод, швед. *Löwdin*). Ова теорија је детаљно описана и представљен је осмозонски Кејнов (енгл. *Kane*) **k · p** модел. Вишезонски **k · p** модели веродостојно описују електронску структуру само у околини Γ тачке, што није задовољавајуће за наноструктуре у којима је кретање носилаца наелектрисања ограничено у сва три просторна правца. Зато је зонска структура 2Д HgTe нанотачака и нанопрстенова описана помоћу сложенијег модела јаке везе. У овом моделу укупна таласна функција је приказана као линеарна комбинација атомских орбитала. Представљена је математичка формулација једночестичног модела јаке везе за полупроводнике са сфалеритном кристалном структуром. Показано је како се редукација проблема у моделу може спровести коришћењем двоцентарске апроксимације.

Прво је формиран модел електронских стања у асиметричним HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te двоструким квантним јамама нарастаним у [001] правцу. Коришћен је осмозонски Кејнов **k · p** модел у оквиру апроксимације анвелопних функција. Асиметрија конфинирајућег потенцијала двоструких квантних јама доводи до отварања процепа. Овај процеп не постоји у размотреном симетричном систему и може се отворити применом електричног поља. Спин-орбитно спрезање се јавља услед асиметрије конфинирајућег потенцијала и утиче на енергетски процеп и зоне. Електронска и шупљинска стања су већим делом локализована у различитим јамама и изражена хибридизација између њих доводи до отварања спински зависног хибридизационог енергетског процепа за коначну вредност таласног вектора. Показано је да ширине две квантне јаме као и моларни удео Cd_xHg_{1-x}Te контролишу величину енергетског процепа између шупљинских стања и хибридизационог енергетског процепа. Такође, енергије зона испољавају инвертовани зонски распоред, и због тога је могућа нетривијална промена квантне фазе у размотреном систему.

Испитана су електронска и оптичка својства квази-нултодимензионих наноструктура. Проучене су 2Д HgTe нанотачке и 2Д HgTe нанопрстенови квадратне и хексагоналне геометрије. Формиран је једночестични модел јаке везе у базису $sp^3d^5s^*$ орбитала написан у Слејтер-Костеровој (енгл. *Slater-Koster*) нотацији. Скокови електрона су ограничени на најближе суседне атоме. Истражен је и утицај спин-орбитне интеракције што, приликом имплементације модела, подразумева удвостручење базисног скупа. Утицај магнетског поља је представљен Пајерлсовом (нем. *Peierls*) заменом, која модификује чланове хамилтонијана за скокове електрона између атомских стања увођењем фазног помераја зависног од магнетског вектор потенцијала. Оптичка апсорпција зависи од диполних матричних елемената. Они су одређени укључивањем интраорбиталних чланова што представља добру апроксимацију која је коришћена приликом израчунавања оптичке апсорпције у квантним

тачкама од фосфорена и силицена. Показано је да се у енергетском спектру проучених 2Д наноструктура појављују и балковска и ивична стања. У нормалном магнетском пољу установљено је постојање Ахаронов-Бомових (енгл. *Aharonov-Bohm*) осцилација енергија балковских стања 2Д HgTe нанопрстенова. Ове осцилације нису уочене за 2Д HgTe нанотачке што се може објаснити различитом топологијом ових структура. Варирањем интензитета магнетског поља, ивична стања у квадратним квантним тачкама су организована у квазизоне приближно равних енергетских нивоа. За разлику од квадратних квантних тачака, у квантним прстеновима су пронађена ивична стања која су показала осцилаторна својства у магнетском пољу. Ивична стања у хексагоналним квантним тачкама су локализована слично као ивична стања у квантним прстеновима. Оптичке линије у инфрацрвеном делу спектра потичу од прелаза између ивичних стања. Установљено је да се положај и интензитет линија оптичког спектра HgTe 2Д квантних тачака и прстенова може подешавати применом спољашњег магнетског поља.

На крају, изведени су закључци и наведени су научни доприноси ове докторске дисертације.

Кључне речи: HgTe, квантна јама, квантна тачка, квантни прстен, нанотачка, нанопрстен, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ модел, модел јаке везе, електронска структура, ивична стања, Ландауови нивои, Ахаронов-Бомов ефекат, оптичка апсорпција

Научна област: Електротехника и рачунарство

Ужа научна област: Наноелектроника и фотоника

УДК број: 621.3

Dissertation title: Analysis and modeling of electron states in HgTe nanostructures

Abstract: The electron states of mercury telluride (chemical symbol: HgTe) nanostructures of various dimensionality are investigated by using $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory and tight-binding method. Asymmetric double HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te quantum wells, two-dimensional (2D) HgTe nanodots (quantum dots) and (2D) HgTe nanorings (quantum rings) are all analyzed. The most commonly used manufacturing technologies for the considered nanostructures are presented. The basic properties of HgTe, CdTe, and Cd_xHg_{1-x}Te are explained.

The theoretical models are described in detail. The fundamentals of multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory, which is used for modeling of the electronic band structure of asymmetric double HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te quantum wells, are presented. The procedure for the calculation of the band structure of bulk semiconductors by using the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbation model is described. To model the band structure of semiconductor quantum wells, a generalization of the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ perturbation model in the framework of the envelope-function theory is performed. The resulting $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ hamiltonian, which gives a complete description of electrons and holes in heterostructure with periodic potential, theoretically represents an infinite-dimensional matrix that cannot be diagonalized. Therefore, it is necessary to reduce the description of the band structure to the vicinity of the fundamental band gap. This can be done in the framework of quasi-degenerate perturbation theory (Löwdin partitioning). This theory is described in detail and the eight-band Kane $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model is presented. The multiband $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ models accurately describe the band structure only in the vicinity of the Γ point, and they are not suitable for nanostructures in which the motion of the charge carriers is restricted in all three spatial directions. Therefore, the band structures of 2D HgTe nanodots and nanorings have been described by using a more complex tight-binding model. In this model, the total wave function is represented as a linear combination of atomic orbitals. The mathematical formulation of the single-particle tight-binding model for semiconductors with the zinc-blende lattice is presented. It has been shown that the reduction of problems in the model can be done by using two-center approximation.

The model of electronic states in asymmetric HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te double quantum wells grown in the [001] direction is first developed. The model of the band structure is based on an envelope function approach within the framework of the 8-band Kane $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory. The asymmetry of the confining potential of the double quantum wells results in a gap opening that is absent in the considered symmetric system where it can be induced by an applied electric field. The band gap and the subbands are affected by spin-orbit coupling which is a consequence of the asymmetry of the confining potential. The electron-like and hole-like states are mainly confined in different quantum wells, and the enhanced hybridization between them opens a spin-dependent hybridization gap at a finite in-plane wavevector. It is shown that both the ratio of the widths of the two quantum wells and the mole fraction of the Cd_xHg_{1-x}Te barrier control both the energy gap between the hole-like states and the hybridization gap. The energy subbands are shown to exhibit inverted ordering, and therefore a nontrivial topological phase could emerge in the system.

The electronic and optical properties of quasi-zero-dimensional nanostructures are examined. Square- and hexagonal-shaped 2D HgTe quantum dots and quantum rings are investigated. A single-particle tight-binding model is formed in the $sp^3d^5s^*$ basis written in Slater-Koster notation. The nearest-neighbor approximation is used. The influence of spin-orbit interaction was investigated, which implies doubling of the basis set during implementation. The influence of the magnetic field is included through the Peierls substitution which modifies the off-site matrix by introducing a field-dependent phase shift. The optical absorption depends on dipole matrix elements. The dipole matrix elements are determined by including only intraorbital terms, which was demonstrated to be a reasonable approximation in recent calculations of the absorption spectra of quantum dots made of phosphorene and silicene. It has been shown that both bulklike and edge states appear in the energy spectrum of analyzed 2D nanostructures. The bulklike states in 2D HgTe quantum rings exhibit Aharonov-Bohm oscillations in the magnetic field. Such oscillations are not found in 2D HgTe quantum dots, which are ascribed to the different topology of these two systems. When the magnetic field varies, all the edge states in square quantum dots appear as quasibands

composed of almost fully flat levels. Unlike in square-shaped quantum dots, some edge states in quantum rings are found to oscillate with the magnetic field. The edge states in hexagonal quantum dots are localized like in rings. The absorption lines in the infrared are found to originate from transitions between edge states. It is shown that the magnetic field can be used to efficiently tune the optical absorption of HgTe 2D quantum dot and quantum ring systems.

Finally, conclusions are presented, and the main scientific contributions of this doctoral dissertation are outlined.

Keywords: HgTe, quantum well, quantum dot, quantum ring, nanodot, nanoring, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model, tight-binding model, electronic structure, edge states, Landau levels, Aharonov-Bohm effect, optical absorption

Scientific field: Electrical and Computer Engineering

Research area: Nanoelectronics and Photonics

UDC number: 621.3

Садржај

Захвалница	II
Садржај	VII
Списак слика	IX
Списак табела	XV
1. Увод.....	1
1.1 HgTe наноструктуре.....	2
1.2 Технологије производње.....	6
1.2.1 Израда $Cd_xHg_{1-x}Te$ масивних узорака.....	7
1.2.1.1 Брицманов метод	7
1.2.1.2 Метод путујућег грејача	10
1.2.1.3 Метод поновљене кристализације.....	11
1.2.2 Епитаксијалне методе раста слојевитих структура	12
1.2.2.1 Епитаксија молекуларним снопом	13
1.2.2.2 Металорганска епитаксија из парне фазе.....	16
1.2.2.3 Епитаксија из течне фазе	17
1.2.3 Синтеза HgTe нанотачака у колоидним растворима	18
1.3 Особине HgTe, CdTe и $Cd_xHg_{1-x}Te$ легуре	20
1.4 Структура докторске дисертације	22
2. Методи израчунавања електронских особина HgTe наноструктура	24
2.1 $k \cdot p$ теорија	24
2.1.1 $k \cdot p$ модел за случај масивног полупроводника	25
2.1.2 Једнозонски $k \cdot p$ модел за проводну зону	27
2.1.3 Осмозонски $k \cdot p$ модел.....	28
2.1.4 Моделовање електронских и шупљинских стања у магнетском пољу.....	33
2.1.5 Моделовање напрезања	35
2.2 Метод јаке везе.....	37
2.2.1 Формулација метода јаке везе у чврстим телима	38
2.2.2 Слејтер-Костерова двоцентарска апроксимација	40
2.2.3 Моделовање спин-орбитне интеракције	43
3. Подешавање енергетског процепа у HgTe/Cd $_x$ Hg $_{1-x}$ Te асиметричним квантним јамама	45
3.1 Увод.....	45
3.2 Теоријски модел вишеслојних наноструктура	46
3.3 Резултати и дискусија	48
3.4 Сажетак.....	56
4. Електронска стања у 2Д HgTe наноструктурама у присуству нормалног магнетског поља	58
4.1 Увод.....	58

4.2 Теоријски модел јаке везе за квантне тачке и прстенове	59
4.3 Резултати и дискусија	61
4.3.1 Утицај геометрије, типа наноструктуре и примењених граничних услова	61
4.3.2 Утицај нормалног магнетског поља.....	65
4.3.3 Оптичка апсорпција у присуству магнетског поља.....	69
4.4 Сажетак.....	72
5. Закључак	73
Литература	76
Прилог 1 Нумеричке вредности параметара зонске структуре у осмозонском $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ моделу	87
Прилог 2 Нумеричке вредности параметара у емпиријском моделу јаке везе	88
Прилог 3 Преглед двоцентарских интеграла у моделу јаке везе	89
Прилог 4 Периодичност кристалне структуре: Блохова теорема.....	90
Прилог 5 Теорија анвелопних функција	94
Прилог 6 Теорија пертурбација независних од времена	96
Прилог 7 Левдинова теорија пертурбација	98
Прилог 8 Електронска структура атома	100
Прилог 9 Случај двоатомског молекула.....	106
Биографија аутора.....	110

Списак слика

Слика 1.1. Шематски приказ полупроводничких наноструктура у форми **(а)** квантне јаме, **(б)** квантне жице и **(в)** квантне тачке. Густина електронских стања у функцији енергије у **(г)** квантној јами, **(д)** квантној жици и **(ђ)** квантној тачки.

Слика 1.2. Спински поларизована ивична стања QSH изолатора у структури типа квантне јаме (адаптирано из референце König и сар., 2007В).

Слика 1.3. Скенирајућа електронска микроскопија (SEM) HgTe квантног прстена у HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантној јами. Прстен је мезоскопских димензија и његов пречник износи 1 μm (адаптирано из референце König и сар., 2007А).

Слика 1.4. Шематски приказ монослоја HgTe у саћастој форми сличној графену. Са a_x је означено растојање између атома исте врсте, a_y је растојање између атома различите врсте, α_{hex} је угао између веза атома, док је са S_0 означена површина пројекције примитивне ћелије на x -у раван. Вертикално растојање између Hg и Te атома је означено параметром „извијања“ (енгл. „*buckling*“), h .

Слика 1.5. Фононска дисперзија за акустичке и оптичке модове HgTe монослоја. **Црвена** испрекидана линија представља нулту фреквенцију испод које систем постаје динамички нестабилан (адаптирано из референце Zheng и сар., 2015).

Слика 1.6. (а) (T - x) дијаграм за псеудобинарни систем HgTe-CdTe (адаптирано из референце Carper и Garland, 2011) и **(б)** (p - T) дијаграм за Cd_xHg_{1-x}Te легуру (адаптирано из референце Carper и сар., 2004).

Слика 1.7. Шематски приказ апаратуре за нарастање кристала помоћу Брицмановог метода и температурски профил дуж ампуле (адаптирано из референце Chu и Sher, 2008).

Слика 1.8. Пренос топлоте у области раста на међуповршини између раствора и кристала.

Слика 1.9. Шематски приказ опреме за нарастање кристала ТНМ методом (адаптирано из референце Carper, 2017).

Слика 1.10. Шематски приказ апаратуре за сједињавање елемената Hg, Cd и Te у процесу нарастања Cd_xHg_{1-x}Te кристала SSR методом (адаптирано из референце Carper и Garland, 2011).

Слика 1.11. Шематски приказ МВЕ система за нарастање епитаксијалних слојева HgTe и Cd_xHg_{1-x}Te (адаптирано из референце Franchi и сар., 2003).

Слика 1.12. Шематски приказ RHEED опреме за карактеризацију: D представља растојање између места на којем електронски сноп пада на узорак и фотолуминесцентног екрана, l је растојање између тачака (означених жутом бојом) на екрану на које падају зраци одбијени од узорка, док је α упадни угао светлости на узорак.

Слика 1.13. RHEED осцилације за (001) оријентацију HgTe слојева нараслих помоћу МВЕ метода. Интензитет осцилација опада са променом температуре супстрата, док на температурама изнад 177 °C осцилације више нису видљиве (адаптирано из референце Oehling и сар., 1996).

Слика 1.14. Компоненте реакционе коморе која се користи у склопу МOCVD метода (адаптирано из референце Carper и сар., 2017).

Слика 1.15. Основне технике нарастања слојевитих структура помоћу LPE метода: **(а)** нагињање (адаптирано из референце Pohl, 2013), **(б)** урањање (адаптирано из референце Rao и сар., 2018) и **(в)** техника клизног носача (адаптирано из референце Suh и сар., 1992).

Слика 1.16. **(а)** Апаратура за колоидну синтезу HgTe квантних тачака (адаптирано из референце Zhao и Rosei, 2017), **(б)** Уобичајена структура колоидних квантних тачака.

Слика 1.17. **(а)** ТЕМ снимак HgTe наночестица са средњом дужином стране од 14,5 nm, **(б)** HRTEM снимак једне HgTe наночестице у облику троугла (адаптирано из референце Keuleyan и сар., 2011A).

Слика 1.18. Јединична ћелија кристала HgTe са сфалеритном решетком.

Слика 1.19. Зонска структура масивних **(а)** HgTe и **(б)** CdTe полупроводника (адаптирано из референце Yan и De Visser, 2014).

Слика 1.20. Зависност величине енергетског процепа $Cd_xHg_{1-x}Te$ легуре од моларног удела (x) и температуре (T).

Слика 2.1. Зонска структура масивног HgTe на температури од 0 K. Плавим линијама су представљени резултати добијени помоћу емпиријског метода јаке везе, док су црвеним тачкама приказани резултати GW модела (адаптирано из референце Allan и Delerue, 2012).

Слика 2.2. Илустрација декомпозиције p_x орбитале на паралелну и антипаралелну компоненту у односу на вектор везе $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n$.

Слика 2.3. Хибридизација између s и p_x орбитале уз приказ декомпозиције p_x орбитале на $|x_\sigma\rangle$ и $|x_\pi\rangle$ компоненте.

Слика 2.4. Пример хибридизације између атомских орбитала представљене помоћу $sp^3d^5s^*$ базиса (адаптирано из референце Goldmann, 2014).

Слика 3.1. Тродимензиони шематски приказ HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te ADQW структуре нарастане у [001] кристалографском правцу. w_1 и w_2 су ширине HgTe слојева (QW₁ и QW₂, респективно), l је растојање између њих (B₂), d_b представља ширину Cd_xHg_{1-x}Te баријера (B₁, B₃), док је x вредност моларног удела.

Слика 3.2. Енергетски дијаграм најниже проводне зоне (означене са CB) и највише валентне зоне (означене са VB) у ADQW структури, када се примени напон V . У HgTe слојевима зонски распоред у Γ тачки је инвертован. Зона Γ_8 симетрије која води порекло од p -орбитала је енергетски изнад зоне са Γ_6 симетријом која води порекло од s -орбитале.

Слика 3.3. Дисперзионе релације у SDQW структури за вредности $w_1 = w_2 = 6$ nm и $l = 2,5$ nm у одсуству напрезања (пуне линије) и када је у модел укључен утицај напрезања (испрекидане линије). Леви панел слике се односи на случај када је $k_{||} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{||} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Услед симетрије конфинирајућег потенцијала, стања су спински дегенерисана.

Слика 3.4. Дисперзионе релације у SDQW структури за вредности $w_1 = w_2 = 6$ nm и $l = 2,5$ nm **(а)** када је $B = 5$ T и **(б)** када је $B = 40$ T. Услед дејства нормалног магнетског поља долази до нарушавања спинске дегенерације. Стања су енергетски померена због Земановог ефекта. Леви панел слика **(а)-(б)** се односи на случај када је $k_{||} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{||} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Спин горе (спин доле) стања су представљена **црном (наранџастом)** линијом. Умечи на сликама приказују енергије око Фермијевог нивоа између којих долази до антиукрштања и измене доминантне спинске компоненте.

Слика 3.5. Дисперзионе релације у SDQW структури која је слична двослојном графену за вредности $w_1 = w_2 = 6$ nm и $l = 2,5$ nm **(а)** када је $F_{el} = 15$ kV/cm што доводи до отварања енергетског процепа Δ између H_1 и H_2 зона и појаве спинског цепања услед Рашбиновог ефекта. **(б)** Дисперзионе релације ADQW структуре када је $w_1 = 6$ nm, $w_2 = 7,8$ nm и $l = 2,5$ nm у одсуству електричног поља. Услед структуралне асиметрије енергетски процеп Δ између H_1 и H_2 зона инхерентно постоји, а спинска дегенерација између енергетских нивоа је нарушена. Хибридациони процеп је означен са Δ_h . Леви панел слика **(а)-(б)** се односи на случај када је $k_{||} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{||} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Пуне/испрекидане линије означавају стања која су доминантно спин горе/доле.

Слика 3.6. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0)$ nm⁻¹ за SDQW структуру када је $w_1 = w_2 = 6$ nm и $F_{el} = 0$. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу **(а)**, док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу **(б)**. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

Слика 3.7. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0)$ nm⁻¹ за SDQW структуру када је $w_1 = w_2 = 6$ nm и $F_{el} = 15$ kV/cm. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу **(а)**, док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу **(б)**. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

Слика 3.8. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0)$ nm⁻¹ за ADQW структуру када је $w_1 = 6$ nm, $w_2 = 7,8$ nm и $F_{el} = 0$. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу **(а)**, док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу **(б)**. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

Слика 3.9. Укупна густина вероватноће у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0)$ nm⁻¹ за ADQW структуру када је $w_1 = 6$ nm, $w_2 = 7,8$ nm и $F_{el} = 0$. Вертикалне **(зелене)** испрекидане линије представљају границе слојева. Пуне/испрекидане линије означавају спин горе/доле стања. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално раздвојене за 0,2 (рел. јед.).

Слика 3.10. Укупна густина вероватноће у тачки $(k_x, k_y) = (0,14, 0)$ nm⁻¹ за ADQW структуру када је $w_1 = 6$ nm, $w_2 = 7,8$ nm и $F_{el} = 0$. Вертикалне **(зелене)** испрекидане линије представљају границе слојева. Пуне/испрекидане линије означавају спин горе/доле стања. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално раздвојене за 0,2 (рел. јед.).

Слика 3.11. (а) Енергетски процеп Δ између H_1 и H_2 зона као функција релативног односа $\xi = w_2/w_1$ за вредности моларног удела $x \in \{0,5, 0,7, 0,9\}$ на температури $T = 0$ К.

Слика 3.12. Хибридациони процеп Δ_n између E_1 и H_2 зона као функција релативног односа $\xi = w_2/w_1$ за вредности моларног удела $x \in \{0,5, 0,7, 0,9\}$ на температури $T = 0$ К. Спинска стања су означена стрелицама непосредно уз одговарајућу линију.

Слика 4.1. Шематски приказ у x - y равни нумерички истражених (а) SQD и (б) HQD. d_{out} је дужина ивице полигоналне QD. AC и ZZ означавају фотелјасте и цик-цак тип ивица, респективно. Зелени (црвени) кружићи означавају Te(Hg) атоме.

Слика 4.2. Шематски приказ у x - y равни нумерички истражених (а) SQR и (б) HQR. d_{out} је дужина спољашње ивице за QR, d_{in} је дужина унутрашње ивице, и w је ширина QR. AC и ZZ означавају фотелјасте и цик-цак тип ивица, респективно. Зелени (црвени) кружићи означавају Te(Hg) атоме.

Слика 4.3. (а) Дистрибуција енергетских нивоа у S(H)QD и S(H)QR наноструктурама у зависности од редног броја стања n . Резултати за различите структуре су померени за $\Delta n = 400$. Део енергетског спектра који одговара енергетском процепу 2Д HgTe је означен са хоризонталним испрекиданим линијама љубичасте боје. (б) Варијација густине електронских стања са енергијом у S(H)QD и S(H)QR наноструктурама. Резултати за различите структуре су померени за 1000 eV^{-1} .

Слика 4.4. Детаљан приказ енергетских нивоа који су на сл. 4.3 (а) осенчени жутим правоугаоником. Густина електронских стања за неколико одабраних стања која су означена римским бројевима I, II и III је приказана на сл. 4.5 и сл. 4.6.

Слика 4.5. Густина вероватноће налажења за стање са дна проводне зоне, ивичних стања и стања са врха валентне зоне у SQD и HQD која су означена римским бројевима I, II и III на сл. 4.4 када је магнетско поље једнако нули. Горњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски најнижег стања из проводне зоне $|\psi_I|^2$ у (а) SQD и (б) HQD. Средњи панел: Сума густина вероватноћа налажења $|\psi_{II}|^2$ ивичних стања у (в) SQD и (г) HQD. Доњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски највишег стања из валентне зоне $|\psi_{III}|^2$ у (д) SQD и (ђ) HQD.

Слика 4.6. Густина вероватноће налажења за стање са дна проводне зоне, ивичних стања и стања са врха валентне зоне у SQR и HQR која су означена римским бројевима I, II и III на сл. 4.4 када је магнетско поље једнако нули. Горњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски најнижег стања из проводне зоне $|\psi_I|^2$ у (а) SQR и (б) HQR. Средњи панел: Сума густина вероватноћа налажења $|\psi_{II}|^2$ ивичних стања у (в) SQR и (г) HQR. Доњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски највишег стања из валентне зоне $|\psi_{III}|^2$ у (д) SQR и (ђ) HQR.

Слика 4.7. Зависност енергетских нивоа од нормалног магнетског поља у (а) SQD и (б) SQR. Горњи панел приказује електронска стања са дна проводне зоне, средишњи панел приказује ивична стања, док су на доњем панелу представљена стања са врха валентне зоне. Стање спина горе је загасито црвене боје, док је стање спина доле тамно плаве боје. Спински мешана стања са доминантним уделом стања спина горе (доле) су приказана различитим нијансама црвене (плаве) боје.

Слика 4.8. Зависност енергетских нивоа од нормалног магнетског поља у (а) HQD и (б) HQR. Горњи панел приказује електронска стања са дна проводне зоне, средишњи панел

приказује ивична стања, док су на доњем панелу представљена стања са врха валентне зоне. Стање спина горе је **загасито црвене** боје, док је стање спина доле **тамно плаве** боје. Спински мешана стања са доминантним уделом стања спина горе (доле) су приказана различитим нијансама **црвене** (**плаве**) боје.

Слика 4.9. Густина вероватноће за случај када је магнетско поље једнако нули за два равна ивична стања (означена са *Равно-I* и *Равно-II*) и једног осцилаторног ивичног стања (означено са *Осцилаторно*) у **(а-в)** 1,23-, **(г-ђ)** 1,55- и **(е-з)** 1,87-nm широком SQR. **(и)** Енергетски нивои за *Равно-I* и *Равно-II* ивична стања у функцији нормалног магнетског поља за SQR ширине 1,23-, 1,55- и 1,87-nm. Спин горе (спин доле) стања су представљена **црвеном** (**плавом**) линијом. **(ј)** Зависност енергетских нивоа осцилаторног ивичног стања од нормалног магнетског поља у 1,23-, 1,55- и 1,87 nm широким прстеновима. Спин горе (спин доле) стања су представљена **црвеном** (**плавом**) линијом.

Слика 4.10. Густина вероватноће налажења за **(а)** равно ивично стање из SQD и **(б)** за осцилаторно ивично стање из HQD. Енергије приказаних стања су означене зеленим квадратима на сл. 4.7 (а) и 4.8 (а).

Слика 4.11. Спектар оптичке апсорпције за SQD наноструктуру у одсуству спољашњих поља за *x* и *y* поларизације. Резултати за *y* поларизацију су на слици померени за 10 релативних јединица. **Црвена** вертикална линија означава фундаментални процеп, док сива вертикална испрекидана линија означава минимум енергије која је потребна за (b-e) транзицију. На слици су назначени енергетски опсежи за (b-b) и (b-e) транзиције као и доминантни (e-e) пикови за обе поларизације светлости. Фермијев ниво износи $E_F = 0,9 \text{ eV}$.

Слика 4.12. Спектар оптичке апсорпције за HQD наноструктуру у одсуству спољашњих поља за *x* и *y* поларизације. Резултати за *y* поларизацију су на слици померени за 10 релативних јединица. **Црвена** вертикална линија означава фундаментални процеп, док сива вертикална испрекидана линија означава минимум енергије која је потребна за (b-e) транзицију. На слици су назначени енергетски опсежи за (b-b) и (b-e) транзиције као и доминантни (e-e) пикови за обе поларизације светлости. Фермијев ниво износи $E_F = 1,07 \text{ eV}$.

Слика 4.13. Контурни пртеж зависности амплитуде оптичке апсорпције која настаје услед прелаза између **(а)** равних ивичних стања у SQD и **(б)** осцилаторних ивичних стања у HQD од магнетског поља и енергије апсорпције. Овде је апсорпција израчуната као средња вредност апсорпција за *x* и *y* поларизације и скалирана тако да њен максимум одговара јединици. Умеци на сликама приказују енергетска стања око Фермијевог нивоа која значајно доприносе оптичком спектру.

Слика П.1. Шематски приказ потенцијала једнодимензионе периодичне кристалне структуре.

Слика П.2. Промена анвелопне таласне функције и брзопроменљиве Блохове функције у оквиру теорије анвелопних функција.

Слика П.3. Илустрација водониковог атома.

Слика П.4. Трансформација Декартових координата у сферне координате.

Слика П.5. Угаона зависност квадрата модула сферних хармоника који се користе као атомске орбитале у методу јаке везе. Први ред: *s*-орбитала; Други ред: *p*-орбитале; Трећи ред: *d*-орбитале (преузето из референце Goldmann, 2014).

Слика П.6. Модел хомополарног двоатомског молекула. Поједностављени модел две идентичне спрегнуте квантне јаме.

Слика П.7. Две „непертурбоване“ квантне јаме са потенцијалима $V_1(z)$ и $V_2(z)$. Решења Шредингерове једначине за прву квантну јаму су E_s и $\Psi_1(z)$, док су решења за другу квантну јаму означена са E_s и $\Psi_2(z)$.

Слика П.8. Илустрација формирања везујућих и антивезујућих орбитала у хомополарном двоатомском молекулу H_2 помоћу поједностављеног примера система две идентичне спрегнуте квантне јаме.

Списак табела

Табела 1.1. Преглед структуралних параметара монослоја HgTe: a_x је растојање између атома исте врсте, a_y је растојање између пројекција положаја атома различите врсте на x -у раван, α_{hex} је угао везе између суседних атома, S_0 је површина пројекције примитивне ћелије на x -у раван и h је вертикално растојање између Hg и Te атома.

Табела 3.1. Преглед геометријских параметара (d_b , w_1 , w_2), растојања (l) и типа проучених DQW. Ширине HgTe слојева су означене са w_1 и w_2 , d_b је ширина $Cd_xHg_{1-x}Te$ баријера, док l представља растојање између HgTe слојева. w_2 има различите вредности, док су d_b , w_1 и l исти за све структуре.

Табела 4.1. Преглед геометријских параметара (d_{out} , d_{in} , w) и броја ивичних атома ($N_{\Sigma,ea}$) за одређени облик и тип наноструктуре. d_{out} означава дужину ивице за QD или дужину спољашње ивице за QR, d_{in} је дужина унутрашње ивице за QR, док је w ширина прстена. AC и ZZ су ознаке за фотелести и цик-цак тип ивица, респективно.

Табела 4.2. Вредности енергетског процепа (дате у јединицама eV) у S(H)QD и S(H)QR структурама.

Табела II.1. Параметри зонске структуре HgTe на температури $T = 0$ K. Вредности за Δ , E_g и $2m_0P^2/\hbar^2$ су дате у (eV) док су остали параметри без димензије (Novik и сар., 2005).

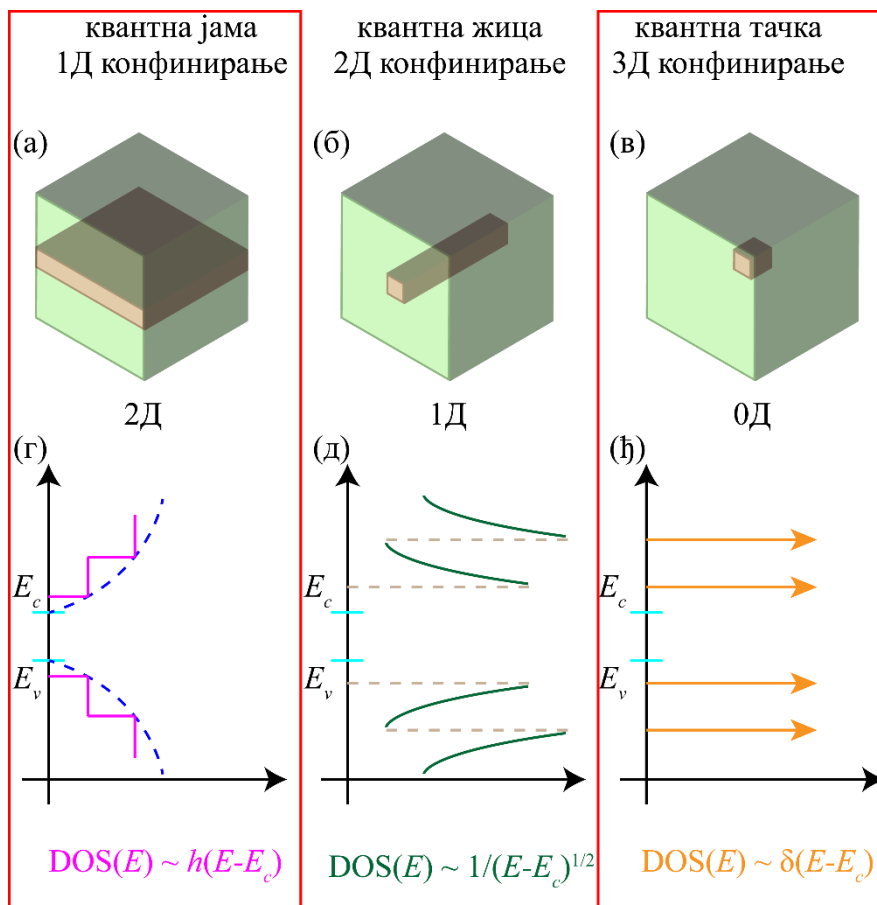
Табела II.2. Параметри зонске структуре CdTe на температури $T = 0$ K. Вредности за Δ , E_g и $2m_0P^2/\hbar^2$ су дате у (eV) док су остали параметри без димензије (Novik и сар., 2005).

Табела II.3. Параметри метода јаке везе за HgTe у базису $sp^3d^5s^*$ орбитала по Слејтер-Костеровој нотацији. Вредности параметара су представљене у (eV) за случај када је температура $T = 0$ K. Ознаке (a) и (c) се односе на ознаку за анјон (Te) и катјон (Hg), док се ознаке (ac) и (ca) односе на скокове са анјона (катјона) на катјон (анјон) (Allan и Delerue, 2012).

Табела II.4. Двоцентарски интегрални између различитих орбитала из $sp^3d^5s^*$ базисног скупа написани преко дирекционих косинуса (Slater и Koster, 1954).

1. Увод

Физика кондензованог стања је грана физике у којој се проучавају феномени проузроковани интеракцијама између фундаменталних структурних јединица у чврстим телима или флуидима. Од посебног интереса у овој области су структуре формиране од једног или више полупроводника које имају бар једну димензију мању од 100 nm. Оне су у литератури обично познате под називом *полупроводничке квантне наноструктуре* јер су у њима изражени квантно-механички ефекти. С обзиром да су њихове димензије упоредиве са де Брољевог (франц. *de Broglie*) таласном дужином електрона, у наноструктурама долази до квантизације енергетских стања. То се одражава на електрична, оптичка и механичка својства наноструктура, која се истражују због потенцијалних примена у области електронике, фотонике и квантног рачунарства (Luryi, 1988; Haraguchi и сар., 1992; Davies, 1997; Chichibu, 1998; Haque и Khondker, 2000; Berg и сар., 2001; Ekins-Daukes и сар., 2001; Delerue и Lannoo, 2004; Harrison, 2005; Sugawara и Usami, 2009; De Franceschi и сар., 2010; Ihn, 2010; Michetti и Trauzettel, 2013; Mashford и сар., 2013). У зависности од изабране технологије производње, полупроводничке наноструктуре могу бити различите димензионалности. Најчешће су анализиране структуре у форми квантне јаме, жице и тачке (Woggon, 1997; Guyot-Sionnest и сар., 1999; Malinowski и сар., 2000; Voese и сар., 2000; Harrison, 2005).



Слика 1.1. Шематски приказ полупроводничких наноструктура у форми (а) квантне јаме, (б) квантне жице и (в) квантне тачке. Густина електронских стања у функцији енергије у (г) квантној јами, (д) квантној жици и (ђ) квантној тачки.

На сл. 1.1 је дат шематски приказ структура типа квантне јаме (дводимензионе, скр. 2Д) (а), квантне жице (једнодимензионе, скр. 1Д) (б) и квантне тачке (нултодимензионе, скр. 0Д)

(в), као и облици зависности њихових густина електронских стања од енергије. У квантним јамама кретање електрона је ограничено у једном просторном правцу, док је слободно у преостала два правца (видети слику сл. 1.1 (а)). Под одређеним условима у овој структури може доћи до акумулације електрона у танком слоју, тј. до формирања такозваног *двoдимензиoног електронског гаса*. У том случају, густина електронских стања (енгл. *Density of States-DOS*) у квантним јамама је степенаста функција енергије, што се може видети на сл. 1.1 (г). Квантне жице ограничавају кретање електрона у два просторна правца (сл. 1.1 (б)) и у њима се фомира *једнодимензиони електронски гас*. Густина електронских стања је обрнуто пропорционална квадратном корену енергије ($DOS \sim 1/\sqrt{E}$), са видљивим Ван-Ховеовим (хол. *Van-Hove*) сингуларитетима у тачкама које одговарају енергијама ивица (екстремума) подзона (сл. 1.1 (д)). На сл. 1.1 (в) је дат шематски приказ квантне тачке у којој је кретање електрона ограничено у сва три просторна правца. У овим системима се реализује концепт *нултодимензионог електронског гаса*. Квантне тачке поседују дискретни енергетски спектар, а густина стања је представљена сумом Диракових (енгл. *Dirac*) импулса (сл. 1.1 (ђ)). Квантне тачке се могу реализовати и у форми квантног прстена у којима је кретање електрона додатно ограничено услед постојања централног отвора, што у тополошком смислу структуру чини двоструко повезаном. Последица ове специфичне морфологије је постојање ефеката квантне интерференције попут Ахаронов-Бомовог ефекта (Aharonov и Bohm, 1959) који се манифестује у виду осцилација енергија дискретних стања са променом јачине магнетског поља.

У овој глави је дат преглед наноструктура заснованих на једињењу HgTe. Приказане су најчешће коришћене технологије за производњу масивног материјала од $Cd_xHg_{1-x}Te$ у широком опсегу вредности моларног удела (x), као и HgTe квантних јама, тачака и прстенова. Наведене су најзначајније особине HgTe, CdTe једињења и њихове легуре $Cd_xHg_{1-x}Te$. Затим је описана структура докторске дисертације и дат преглед научних доприноса представљених у овој тези.

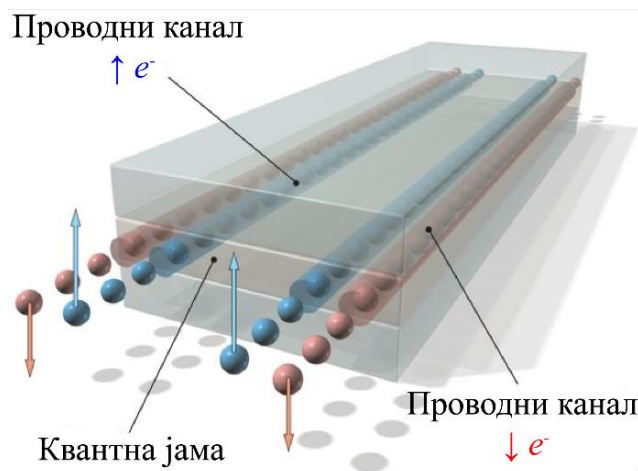
1.1 HgTe наноструктуре

HgTe припада групи полупроводничких II-VI једињења за које је карактеристично да им вредности енергетског процепа леже у широком опсегу и крећу се од вредности које могу бити мање од 0,02 eV, до вредности које су чак и веће од 4 eV (Bhargava, 1985). Квалитет произведених узорака је обично лошији у поређењу са III-V једињењима или силицијумом (хемијска ознака: Si) због чега се II-VI једињења углавном користе за производњу оптоелектронских направа (Bhargava, 1985). Ипак, ова једињења могу да формирају и наноструктуре које се могу искористити за реализацију модерних електронских компоненти (Zhang и сар., 2017).

И поред изражене токсичности живе (хемијска ознака: Hg), електронске и оптичке особине HgTe масивног материјала (балка) и суперрешетки су почеле веома рано да се проучавају (Blue, 1964; Scott, 1969; Jones и сар., 1985; Vaukus и сар., 1986). HgTe се одликује малом ефективном масом и високом вредношћу покретљивости електрона. Користи се за реализацију веома осетљивих сензора инфрацрвеног зрачења са релативно брзим одзивом (Chu и Sher, 2008). У задњих десет година наноструктуре које се базирају на овом једињењу се интензивно проучавају и због њихових специфичних тополошких особина (Bernevig и сар., 2006; König и сар., 2007B; Zhou и сар., 2008; Yang и сар., 2008; Rothe и сар., 2010; Guigou и сар., 2011; Prodan, 2011; Brüne и сар., 2011; Chen и сар., 2012; Xu и сар., 2013; Korkusinski и Hawrylak, 2014; Bocquillon и сар., 2017; Bendias и сар., 2018; Topalović и сар., 2019A; Topalović и сар., 2019; Topalović и сар., 2020).

HgTe поседује инвертовани зонски распоред. У структурама смањене димензионалности које се базирају на овом материјалу могућа је појава нове квантне фазе, *двoдимензиoног (2D) тополошког изолатора* која се још назива и *квантни спински Холов*

(енгл. *Quantum Spin Hall*; скр. **QSH**) *изолатор*. Установљено је да у HgTe квантној јами између Cd_xHg_{1-x}Te баријера, долази до појаве ове фазе под одређеним условима (Bernevig и сар., 2006; König и сар., 2007B). Она се карактерише присуством ивичних стања која су заштићена симетријом заснованом на инверзији времена (Roth и сар., 2009; Brüne и сар., 2010; Hart и сар., 2014). У овој фази стања супротних спинова се крећу у супротним смеровима дуж наноструктуре (сл. 1.2). Ивична стања стварају проводне канале, у којима се електрони крећу без губитка енергије. У QSH стању спинска Холова проводност износи $2e^2/h$, док је њена вредност једнака нули када је HgTe квантна јама у стању нормалног изолатора. Када се структура изложи дејству магнетског поља, тада долази до нарушавања симетрије засноване на инверзији времена (Hasan и Kane, 2010; Qi и Zhang, 2011), чиме се ствара могућност расејања електрона са спином горе (↑) и спином доле (↓) на ивицама структуре (видети сл. 1.2). Због одсуства дисипације при електронском транспорту, ова наноструктура би потенцијално могла да се искористи као компонента нових интегрисаних електронских кола.

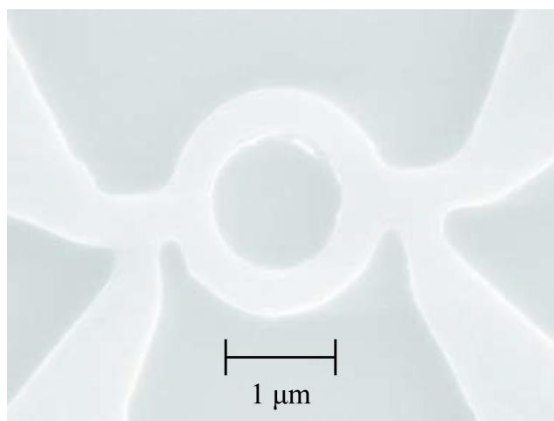


Слика 1.2. Спински поларизована ивична стања QSH изолатора у структури типа квантне јаме (адаптирано из референце König и сар., 2007B).

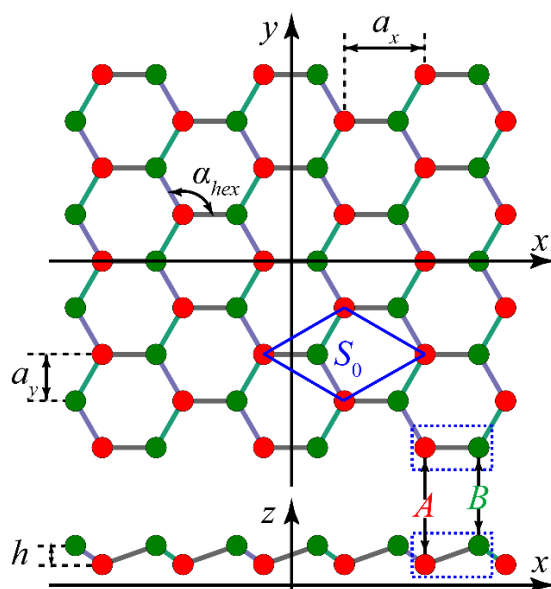
За потребе детекције светлости из блиског и средњег инфрацрвеног дела спектра могуће је користити колоидне HgTe квантне тачке (енгл. *Colloidal Quantum Dots-CQD*) (Kershaw и сар., 1999; Rogach и сар., 2001; Keuleyan и сар., 2014; Shen и сар., 2017). Синтеза у колоидним растворима је једноставнији и јефтинији поступак у односу на уобичајене методе производње квантних тачака као што су хемијска депозиција из парне фазе (енгл. *Chemical Vapor Deposition-CVD*) или епитаксија молекуларним снопом (енгл. *Molecular Beam Epitaxy-MBE*). Због тога CQD представљају јефтину алтернативу за реализацију фотодетектора за инфрацрвени део спектра (Tang и Lai, 2016). Услед израженог квантног конфинирања, HgTe CQD структуре имају већи оптички процеп у односу на HgTe масивни материјал. Технолошки услови одређују димензију формираних тачака, што ствара предуслов за контролу величине оптичког процепа. Показано је да CQD веома малог дијаметра може имати позитивни енергетски процеп (Zhang и Xia, 2006). Анализом фактора који утичу на фотолуминесценцију пронађено је да HgTe CQD у воденом раствору поседује јака луминесцентна својства у телекомуникационим опсезима у околини 1,3 μm и 1,5 μm (Harrison и сар., 1999). За експериментално произведене HgTe нанокристале (нано тачке) величине од 3 nm до 6 nm је демонстрирана вредност квантне ефикасности од чак 48% у делу спектра од 800 nm до 1400 nm (Rogach и сар., 1999). Да би HgTe CQD структуре могле да буду саставни део модерних фотодетектора у инфрацрвеном делу спектра, потребно је решити неколико проблема. Неопходно је: 1) пронаћи метод за ефикасну енкапсулацију квантне тачке због изражене осетљивости Hg на повишеним температурама, 2) решити

проблем стабилности у амбијенталним условима и 3) редуковати струју мрака (Jagtap и сар., 2018).

Поред HgTe квантних тачака произведени су и HgTe квантни прстенови који поседују двоструко повезану топологију и испољавају интересантна транспортна својства у магнетском пољу. HgTe квантни прстенови се могу искористити за реализацију спинских интерферометара (König и сар., 2007A). HgTe структуре у форми прстена су произведене у HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантним јамама са високом покретљивошћу електрона (König и сар., 2007A). На сл. 1.3 је представљен скенирајући електронски микрограф (енгл. *Scanning Electron Micrograph-SEM*) једног таквог HgTe прстена. Радијус приказаног прстена износи 1 μm , док је ширина контаката 300 nm (König и сар., 2007A). Са даљим развојем метода за синтезу HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама очекује се да ће димензије произведених прстеноликих структура бити још мање, због чега ће и ефекти квантне интерференције у њима бити израженији.



Слика 1.3. Скенирајућа електронска микроскопија (SEM) HgTe квантног прстена у HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантној јама. Прстен је мезоскопских димензија и његов пречник износи 1 μm (адаптирано из референце König и сар., 2007A).

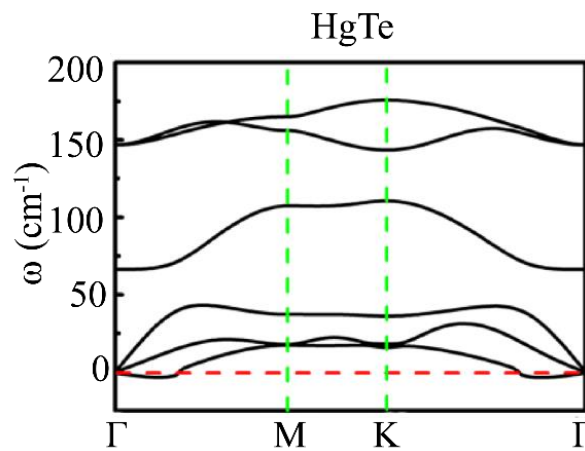


Слика 1.4. Шематски приказ монослоја HgTe у саћастој форми сличној графену. Са a_x је означено растојање између атома исте врсте, a_y је растојање између атома различите врсте, α_{hex} је угао између веза атома, док је са S_0 означена површина пројекције примитивне ћелије на x - y раван. Вертикално растојање између Hg и Te атома је означено параметром „извијања“ (енгл. „*buckling*“), h .

Табела 1.1. Преглед структуралних параметара монослоја HgTe: a_x је растојање између атома исте врсте, a_y је растојање између пројекција положаја атома различите врсте на x -у раван, α_{hex} је угао везе између суседних атома, S_0 је површина пројекције примитивне ћелије на x -у раван и h је вертикално растојање између Hg и Te атома.

Параметар	Вредност
a_x (nm)	0,39
a_y (nm)	0,23
h (nm)	0,09
α_{hex}	109,47°
S_0 (nm ²)	0,18

Недавно је моделовањем фононске дисперзије монослоја HgTe указано на динамичку стабилност овог материјала у 2Д форми (Zheng и сар., 2015), што отвара могућност реализације и танкослојних HgTe направа. Шематски приказ HgTe монослоја је дат на слици 1.4. Може се уочити да, за разлику од најпознатијег 2Д материјала графена, монослој HgTe није савршено планаран. Атоми Hg и Te су померени у нормалном правцу у односу на раван у чијој се пројекцији формира структура облика пчелињег саћа, слична структури графена. Узрок померања до сада није разјашњен, мада се претпоставља да има везе са присуством d електрона у валентној зони Hg (Zheng и сар., 2015). Ово померање је описано „*buckling*“ параметром, h . a_x је растојање између атома исте врсте, a_y је растојање између пројекција положаја атома различите врсте (означених са A и B) на x -у раван, α_{hex} је угао везе између суседних атома, док је са S_0 означена површина пројекције примитивне ћелије на x -у раван. Вредности наведених структуралних параметара су дате у табели 1.1.



Фононска дисперзија

Слика 1.5. Фононска дисперзија за акустичке и оптичке модове HgTe монослоја. Црвена испрекидана линија представља нулту фреквенцију испод које систем постаје динамички нестабилан (адаптирано из референце Zheng и сар., 2015).¹

Фононска дисперзија монослоја HgTe је приказана на сл. 1.5. Монослој HgTe има три акустичка и три оптичка мода. Са сл. 1.5 се јасно види да ни један од модова нема имагинарну фреквенцију што указује на добру динамичку стабилност овог материјала. Уколико буде произведен, монослојни HgTe би имао широк спектар примена у електроници, оптоелектроници, као и у јако корелисаној електроници (Zheng и сар., 2015).

¹ Овде је коришћена ознака за фреквенцију cm^{-1} , која се заправо односи на интензитет таласног вектора који одговара зрачењу дате фреквенције у вакууму.

1.2 Технологије производње

Особине наноструктура зависе од њихових димензија, облика, материјала и технолошког поступка помоћу којег су направљене. Квантне наноструктуре засноване на једињењима HgTe, CdTe и њиховим легурама различите димензионалности се најчешће израђују епитаксијалним методама (или техникама) које се понекад користе у комбинацији са литографијом.

Литографско процесирање Hg(Cd)Te није толико уобичајено и не среће се често у литератури. Обично се користи за додатно структурирање узорака који су формиран неким другом методом. Разлог за то је што ово једињење није стабилно на повишеним температурама, а истовремено Hg у поступку израде ступа у нежељене реакције са другим елементима формирајући различите врсте легура (Maier и сар., 2011). Уместо стандардних позитивних оптичких резиста, попут поли-метил метакрилата (PMMA), користе се алтернативни фоторезисти за оптичку литографију и литографију електронским снопом на температурама од око 80 °C (Daumer и сар., 2003). У стандардном литографском поступку је тешко формирати омске контакте на HgTe. На пример, маска за ецовање се обично прави од Ti који ступа у реакцију са Hg што утиче на квалитет узорка и на ефикасност електрода (Maier и сар., 2011). То је велики проблем, ако се узму у обзир чињенице да се литографским поступком добијају структуре које се: 1) релативно једноставно могу користити за монолитну интеграцију са другим направама, 2) могу имати релативно мале димензије, 3) чији се облик може лако контролисати и 4) да је већина експериментална адаптирана за структуре произведене помоћу литографије. Да би се решио овај проблем, обично се у литографском поступку уводи додатни корак у којем се Hg и Ti раздвајају слојем силицијум-диоксида (хем. ознака: SiO₂) (Maier и сар., 2011). Литографија и влажно хемијско ецовање су до сада коришћени као додатак процедури епитаксије молекуларним снопом за добијање HgTe структуре у форми прстена (König и сар., 2007A).

Епитаксијално нарастање представља поступак нарастања слојева кристала јасно дефинисане оријентације која зависи од избора и оријентације кристалне подлоге. Ова техника се најчешће користи за израду слојевитих структура које се базирају на HgTe. Приликом нарастања потребно је обезбедити да усаглашеност параметара кристала полупроводничке матрице, на чијој се површини врши нарастање, и једињења које се нараста буде што већа. За HgTe се обично користе следеће матрице: Si, GaAs, Ge, InSb и Cd_xHg_{1-x}Te. CdTe може да има улогу баферског слоја за HgTe приликом епитаксијалног нарастања (Carrer и Garland, 2011). Уколико једињење и полупроводничка матрица поседују велику неусаглашеност кристалне решетке долази до значајног напрезања структуре у близини раздвојне површи. За овако добијене наноструктуре карактеристичан је проблем везан за формирање електричних контаката. У литератури постоје разне варијације епитаксијалног раста којима се могу добити квалитетни узорци различитог облика и димензионалности. Овај метод се најчешће користи за израду квантних јама и суперрешетки (Faurie и сар., 1982; Guldner и сар., 1983; Jones и сар., 1985; Goschenhofer и сар., 1998; Becker и сар., 2000; Zhang и сар., 2001; Daumer и сар., 2003; Gui и сар., 2004; Mikhailov и сар., 2006; Minkov и сар., 2019), али може да се користи и за фабрикацију квантних тачака које се базирају на HgTe (König и сар., 2007A).

HgTe квантне тачке се најчешће производе у поступку синтезе у колоидним растворима (Lhuillier и сар., 2012; Kovalenko и сар., 2006; Lhuillier и сар., 2013; Tang и сар., 2018; Askerman и сар., 2018). Оне се распоређују (диспергују) у матрицу домаћина као што је стакло или нека друга врста кристала. Ове структуре су ограничене омотачем који служи за пасивизацију површине. Омотач има улогу медијатора између квантне тачке и спољашње средине. Од квалитета и особина омотача зависи и успешност интеграције ове врсте квантних тачака у друге системе. Омотачи се обично формирају од органских молекула.

У овој секцији ће прво бити објашњени најчешћи поступци нарастања масивних (балковских) узорака Cd_xHg_{1-x}Te монокристала. Затим ће бити представљене епитаксијалне

методе у оквиру којих је могуће произвести квантне јаме базиране на HgTe материјалу. На крају ће бити објашњен поступак синтезе HgTe квантних тачака у колоидним растворима.

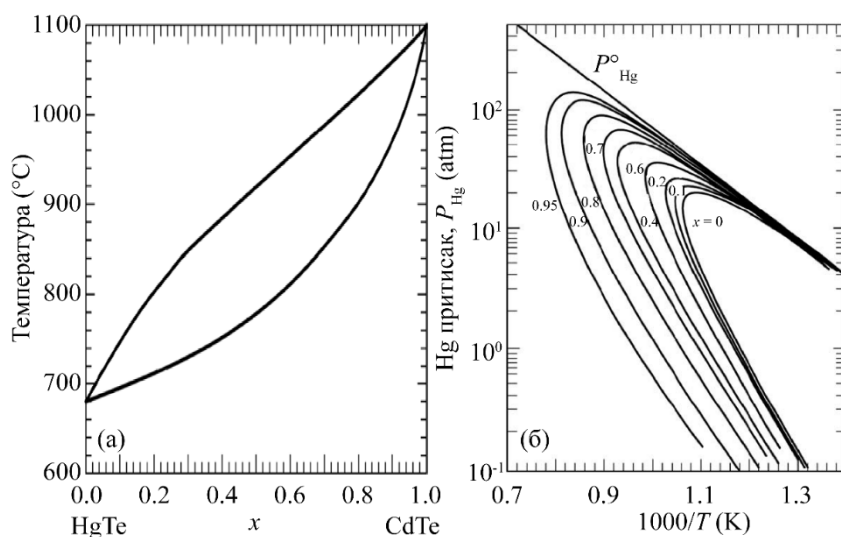
1.2.1 Израда $Cd_xHg_{1-x}Te$ масивних узорака

Масивни полупроводник се користи као подлога на којој се нарастају или се у њој формирају слојеви електронских/оптоелектронских компонената. Најчешће коришћен масиван полупроводнички узорак за формирање наноструктурних система на бази HgTe је $Cd_xHg_{1-x}Te$ легура. Разлог за то је температурска стабилност ове легуре у поређењу са HgTe. Променом вредности моларног удела (x) могуће је подешавати њена електронска својства што је од великог значаја са становишта примене у оптоелектроници (Capper и сар., 2004). Прво ће бити представљене традиционалне технике нарастања масивних материјала који се базирају на $Cd_xHg_{1-x}Te$. Нарастање може бити из парне фазе и из течне фазе. За $Cd_xHg_{1-x}Te$ масивне узорке се најчешће користи техника раста из течне фазе (Capper и Garland, 2011). У оквиру ове технике долази до топљења и преласка чврстог агрегатног стања у течно. Чврсто агрегатно стање се одликује високим степеном просторне уређености основних структурних јединица и структуралном симетријом. У процесу топљења долази до повећања унутрашње енергије, при чему атоми напуштају своје равнотежне положаје у кристалној решетки. Довођење топлоте неопходне за фазни прелаз се обично постиже загревањем. Када материјали у чврстом агрегатном стању достигну *талиште* (температуру топљења), њихова молекуларна структура прелази из чврстог у течно агрегатно стање. У наставку ће, у кратким цртама, бити приказане три основне технике раста масивних $Cd_xHg_{1-x}Te$ узорака из течне фазе: 1) Брицманов метод (енгл. *Bridgman*), 2) Метод путујућег грејача (енгл. *Traveling Heater Method-THM*) и 3) Метод поновљене кристализације (енгл. *Solid State Recrystallization-SSR*).

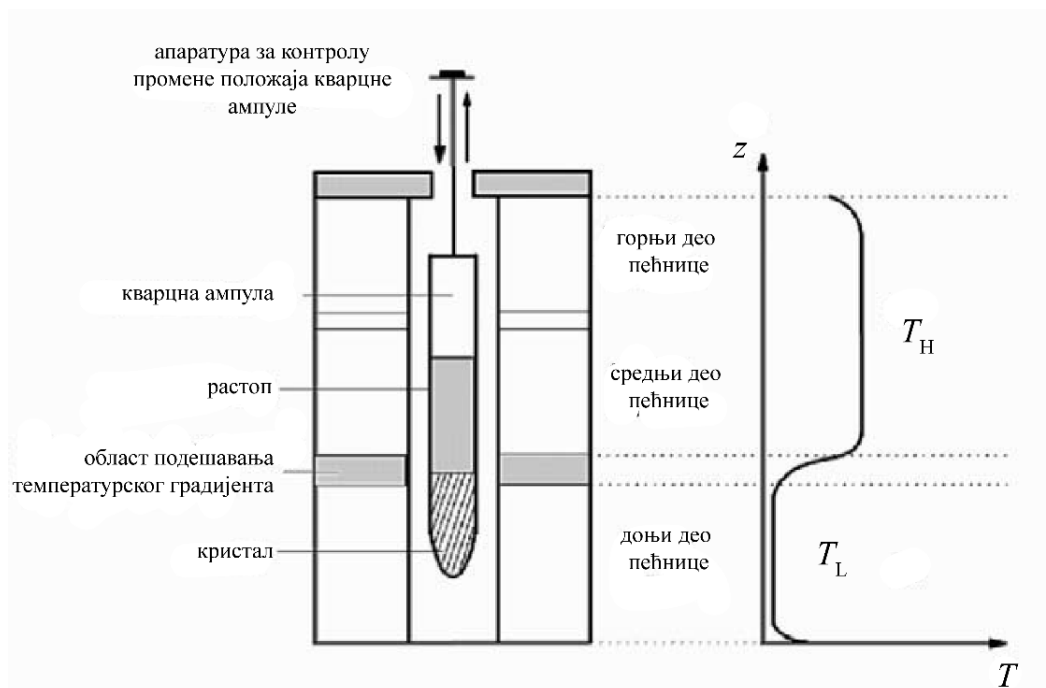
1.2.1.1 Брицманов метод

Брицманов метод (Bridgman, 1925) представља процес вештачке синтезе кристала и припада групи метода у којима долази до измене између чврстог и течног агрегатног стања. Представља једну од најстаријих и најзначајнијих метода за израду масивних $Cd_xHg_{1-x}Te$ узорака. Често се назива и Брицман-Стокбаргером (енгл. *Bridgman-Stockbarger*) методом, с обзиром на велики допринос америчког физичара Стокбаргера овој методи који се односи на увођење модификација за унапређење контроле градијента температуре у комори (Stockbarger, 1936). Кристал нараста из растопа, слично као и у често коришћеној Чохралски (чеш. *Czochralski*) методи (Czochralski, 1918). За успешну синтезу кристала овом методом неопходно је познавати *фазни дијаграм* псеудобинарног система HgTe-CdTe (Ray и Spencer, 1967). Овај дијаграм омогућава боље разумевање процеса нарастања у оквиру којег се може мењати вредност моларног удела (x) Cd у $Cd_xHg_{1-x}Te$ легури, чиме се подешавају електронске и оптичке особине кристала. Фазни дијаграми представљају међусобну зависност између температуре (T), притиска (p) и моларног удела (x). Са њих се читавају вредности унутрашњих и спољних параметара под којима се термодинамички различите фазе појављују и коегзистирају у стању равнотеже (еквilibријума). Саставни део фазног дијаграма су *линије равнотеже* које означавају услове под којима фазе могу да коегзистирају у равнотежном стању. Фазни прелази се одвијају дуж линија равнотеже. На сл. 1.6 (а) и (б) су приказани (T - x) и (p - T) фазни дијаграми за псеудобинарни систем HgTe-CdTe, редом. Са сл. 1.6 (а) се може видети изражено раздвајање чврсте и течне фазе између HgTe и CdTe у области термодинамичке равнотеже што представља ограничавајући фактор приликом нарастања кристала (Ray и Spencer, 1967). На сл. 1.6 (б) је приказан (p - T) фазни дијаграм за различите вредности моларног удела x . Изнад P^o_{Hg} линије Hg је у парној фази. Линије на

дијаграму представљају притиске Hg на којима је чврсти растворак увек у равнотежи са течном и/или гасовитом фазом за дату вредност моларног удела (Саррег и сар., 2004).



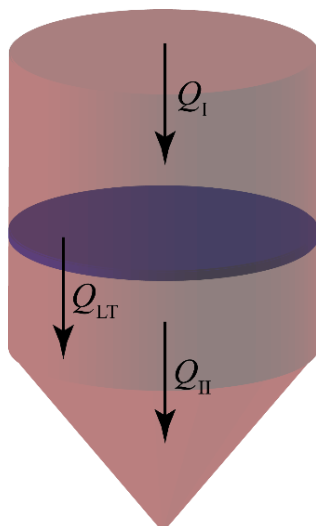
Слика 1.6. (а) $(T-x)$ дијаграм за псеудобинарни систем HgTe-CdTe (адаптирано из референце Саррег и Garland, 2011) и (б) $(p-T)$ дијаграм за $Cd_xHg_{1-x}Te$ легуру (адаптирано из референце Саррег и сар., 2004).



Слика 1.7. Шематски приказ апаратуре за нарастање кристала помоћу Брицмановог метода и температурски профил дуж ампуле (адаптирано из референце Chu и Sher, 2008).

Шематски приказ апаратуре која се користи за вертикално нарастање кристала помоћу Брицманове методе је дат на сл. 1.7. Систем се састоји од пећи (коморе) у којој се налази кварцни лончић (ампула). Кварцна ампула је круто повезана са ротационим дисковима који се могу померати и у аксијалном правцу. У доњи део ампуле се убацује парче монокристала. Оријентација монокристала одређује кристалографски правац нарастања масивног узорка. У ампулу се такође уводи поликристални материјал који се претвара у

растоп, јер се налази у зони повишене температуре коју ствара пећ у којој је убачена кварцна ампула. Простор између монокристала и поликристалног растопа је одвојен преградом да би се осигурала термичка изолација (Carrer, 2017). Поликристал се растапа у области високе температуре и доводи у контакт са монокристалом. У области контакта вршни делови монокристала улазе у процес топљења чиме се формира међуповршина за нарастање. На међуповршини је потребно остварити висок температурски градијент у аксијалном правцу и истовремено обезбедити незнатне температурске промене у радијалном правцу (Carrer, 2017).



Слика 1.8. Пренос топлоте у области раста на међуповршини између раствора и кристала.

Дирекциона кристализација се врши спорим померањем лончића ка области пећнице са нижом температуром. Растоп на међуповрши први долази у област ниже температуре на којој долази до преласка из течног у чврсто стање. При преласку у чврсто стање нарастли слој има структуру која је идентична монокристалу. Шематски приказ процеса нарастања је дат на сл. 1.8. Динамика раста је условљена начином расподеле топлоте у пећници. Нека је dQ_I/dt количина топлоте у јединици времена која се пренесе од поликристалног растопа до међуповршине, dQ_{II}/dt количина топлоте у јединици времена која се пренесе од међуповршине до монокристала, а dQ_{LT}/dt промена количине топлоте која се ослободи на међуповрши при преласку из течног у чврсто стање. Ако се са S означи површина граничне области између чврсте и течне фазе, тада се наведене топлоте у јединици времена дефинишу на следећи начин (Carrer и Garland, 2011):

$$\frac{dQ_I}{dt} = k_I S \left[\frac{dT}{dz} \right]_I, \quad (1.2.1)$$

$$\frac{dQ_{II}}{dt} = k_{II} S \left[\frac{dT}{dz} \right]_{II}, \quad (1.2.2)$$

$$\frac{dQ_{LT}}{dt} = L \frac{dm}{dt} = L \frac{d}{dt} [\rho S z] = L \rho S \frac{dz}{dt}. \quad (1.2.3)$$

У једначинама (1.2.1-1.2.3), dz/dt представља брзину раста, ρ је густина монокристала, k_I и k_{II} су топлотне проводности, L је латентна топлота, а $[dT/dz]_I$ и $[dT/dz]_{II}$ су аксијални температурски градијенти, растопа и монокристала, редом. Ако се претпостави једнодимензиони ток топлоте и примени закон одржања енергије добија се следећа једначина (Carrer и Garland, 2011):

$$k_I S \left[\frac{dT}{dz} \right]_I + L \rho S \frac{dz}{dt} = k_{II} S \left[\frac{dT}{dz} \right]_{II}, \quad (1.2.4)$$

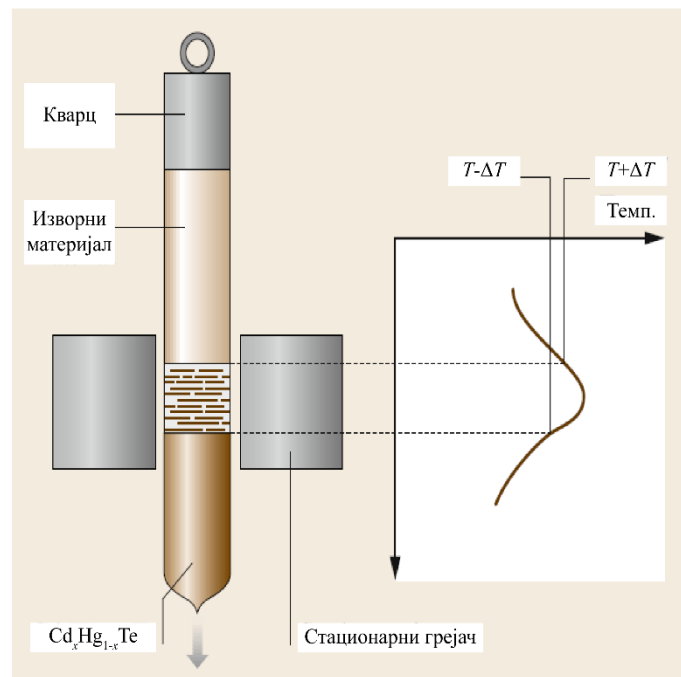
одакле следи

$$\frac{dz}{dt} = \frac{1}{L \rho} \left[k_{II} \left[\frac{dT}{dz} \right]_{II} - k_I \left[\frac{dT}{dz} \right]_I \right]. \quad (1.2.5)$$

Из једначине (1.2.5) се може закључити да, поред физичких особина материјала, на брзину нарастања кристала у значајној мери утичу и аксијални температурски градијенти у растопу и монокристалу. Када је $[dT/dz]_I = 0$ брзина нарастања је максимална. Концентрација дислокација које се јављају у кристалу је већа од 10^4 cm^{-2} , док је брзина нарастања у опсегу 0,1-30 mm/h (Carrer, 2017).

1.2.1.2 Метод путујућег грејача

Метод путујућег грејача (енгл. *Traveling Heater Method*, скр. **THM**) или Трибулеов (франц. *Triboulet*) метод је једна од најпопуларнијих техника за нарастање II-VI кристала која се одвија у условима снижене температуре и притиска. Ова техника је слична техници лебдеће зоне (енгл. *Floating Zone*, скр. **FZ**) која се користи за производњу силицијума. Помоћу овог метода добијају се узорци високе чистоће, са релативно малим бројем дефеката, што је резултат смањеног стварања и пропагације дислокација (Benz и Müller, 1979; Colombo и сар., 1988; Gille и сар., 1993; Triboulet и Marfaing, 1981; Senchenkov и сар., 1999; Triboulet, 2015). За имплементацију метода се користи једноставна и јефтина апаратура. За разлику од Брицмановог метода, потребно је контролисати велики број технолошких параметара због чега је реализација самог процеса захтевна. Да би се спречило „суперхлађење“ неопходно је реализовати стрми температурски градијент у зони раста кристала (Carrer, 2017).



Слика 1.9. Шематски приказ опреме за нарастање кристала ТНМ методом (адаптирано из референце Carrer, 2017).

Принципска шема ТНМ метода је представљена на сл. 1.9. Слично као у Брицмановој методи и овде се користи лончић (ампула) у којој се врши нарастање $Cd_xHg_{1-x}Te$ кристала. Иницијално, у ампули се налази поликристални материјал у чврстом агрегатном стању који се још зове и *изворни материјал*. Он се загрева помоћу грејача релативно уског температурског профила који може да мења позицију. Загревањем се ствара зона топлења која се помера кроз изворни материјал. У вршном делу зоне топлења долази до растварања изворног материјала који се онда депонује у доњем делу исте зоне услед релативног кретања грејача у односу на ампулу. Транспорт материјала се врши дифузијом и конвекцијом због постојања температурског градијента у зони топлења (Capper и Garland, 2011; Triboulet, 2015). Предност овог метода је у томе што се раст кристала дешава на температурама испод температуре кристализације (Capper, 2017). Као и у Брицмановој методи и овде се може контролисати кристалографски правац нарастања увођењем монокристала на дно ампуле као супстрата за нарастање. За разлику од Брицмановог метода, ТНМ методом се производе кристали већег дијаметра (Triboulet, 2015; Capper, 2017). У ТНМ методу често долази до појаве „суперхлађења“ у зони топлења која може да доведе до појаве нестабилности на површини нарастања (Triboulet, 2015). Додатни недостатак је у томе што концентрација нечистоћа у кристалу расте са временом у току процеса нарастања кристала (Capper, 2017). Додатну неповољност представља чињеница да, поред температуре, и други параметри могу да утичу на брзину нарастања (Capper, 2017).

1.2.1.3 Метод поновљене кристализације

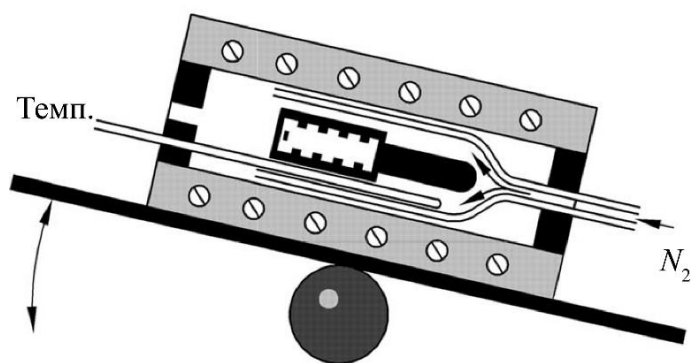
Метод поновљене кристализације (енгл. *Solid State Recrystallization*, скр. **SSR**) представља технику нарастања из чврсте фазе на температурама блиским тачки топлења (Vere и сар., 1982; Schmit, 1983; Colombo и сар., 1985; Schaake и сар., 1985; Tregilgas и сар., 1985; Williams и Vere, 1987; Sharma и сар., 1989; Sharma и сар., 1993; Tregilgas, 1994; Capper и Garland, 2011). Кристал $Cd_xHg_{1-x}Te$ се формира у процесима „гашења“ и „жарења“. Гашење је тип механичке обраде у којем долази до брзог хлађења материјала у уљу, води или ваздуху. Брзим хлађењем се спречавају нежељени процеси на сниженим температурама чиме се побољшавају својства материјала. Са друге стране, жарење је супротан процес у којем се материјал загрева и обично се одвија на температурама које су блиске тачки топлења $HgTe$ (Tregilgas, 1994). Ова техника се најчешће користи за производњу индустријских $Cd_xHg_{1-x}Te$ кристала због своје једноставности и релативно малих трошкова за реализацију (Triboulet, 2003). SSR метод се одвија у неколико фаза (Tregilgas, 1994):

- припрема чистих елемената Hg, Cd и Te и њихово енкапсулирање у ампулу,
- формирање легуре од чистих елемената након чега следи поступак гашења,
- жарење са новом кристализацијом (поновљена кристализација) и
- жарење у Hg пари након друге кристализације.

У почетној фази се припрема ампула за смештање материјала. Она се обично израђује од природног или синтетичког кварца. Основна компонента кварца је SiO_2 који поседује хексагоналну ромбоедарску кристалну структуру. Дебљина зидова ампуле се пажљиво подешава. За интерни пречник ампуле од 8 mm-12,5 mm дебљина зидова има вредности од 2 mm-3 mm (Capper и Garland, 2011). Након пажљивог одабира ампуле у којој ће се нарастати материјал, у њу се смештају чисти елементи Hg, Cd и Te. Под термином „чисти“ подразумева се да су из ових елемената уклоњени оксиди. Подешавањем количина енкапсулираних елемената се подешава вредност моларног удела Cd у $Cd_xHg_{1-x}Te$ легури. За различите вредности моларног удела (x), тачке топлења и кристализације својства $Cd_xHg_{1-x}Te$ легуре могу у значајној мери да варирају (Tregilgas, 1994). Жељени моларни удео дефинише оптичка својства материјала и температурски опсег у којем ће се вршити процес нарастања. Одабрани елементи се сједињавају у ампули током процеса њиховог топлења, а мешање се постиже померањем (љуљањем) ампуле помоћу механизма који је приказан на сл. 1.10.

Након сједињавања елемената у ампули прелази се у другу фазу поступка. У оквиру ове фазе спроводи се поступак гашења у којем се нагло снижава температура $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ растопа. Брзим снижавањем температуре растоп прелази у чврсто агрегатно стање чиме се добија поликристални $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ са микроструктуралним нехомогеностима које су последица појаве „дендритског смрзавања“ (Triboulet, 2003). Због тога се прелази на трећу фазу у којој се врши жарење дендритског поликристалног $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ узорка.

Механизам за померање ампуле



Слика 1.10. Шематски приказ апаратуре за сједињавање елемената Hg, Cd и Te у процесу нарастања $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ кристала SSR методом (адаптирано из референце Capper и Garland, 2011).

Жарење се врши у опсегу температура у околини тачке топљења HgTe ($650\text{ }^\circ\text{C}$ - $680\text{ }^\circ\text{C}$). Ово је поступак који траје око седам дана, током којег се примећује настанак кристалних зрна и хомогенизација дендритске структуре. На овај начин се добија хомогени $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ кристал p -типа. На крају, у оквиру четврте фазе поновним жарењем хомогеног узорка у Hg пари, добија се $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ полупроводник n -типа. Жарење у четвртој фази се врши на температурама од $200\text{ }^\circ\text{C}$ - $300\text{ }^\circ\text{C}$ (Tregilgas, 1994).

1.2.2 Епитаксијалне методе раста слојевитих структура

Епитаксија је процес у којем долази до контролисаног сједињавања више материјала у вештачке структуре са прецизношћу на атомском нивоу (Faurie и Million, 1981; Faurie и сар., 1982; So и сар., 1990; Koguchi и сар., 1991; Monterrat и сар., 1992; Oehling и сар., 1996; Yang и сар., 1999; Schlom и сар., 2001; Zhou и сар., 2003; Schlom и сар., 2008; Mattox, 2010). Реч епитаксија води порекло од две грче речи *ἐπί* што у преводу значи „на“ или „преко“ и *τάξις* што значи „уређено размештање“. Развијена је за потребе индустрије полупроводника и најчешће се користи за формирање слојевитих структура у електронским и фотонским системима. Епитаксијални слојеви се депонују на полупроводничку матрицу или супстрат. При томе, ови слојеви могу имати исти или различит хемијски састав у односу на супстрат. Уколико су епитаксијални слојеви и супстрат од истог материјала тада се ради о *хомоепитаксији*. У супротном је у питању процес *хетероепитаксије*. Нарастање се може вршити помоћу хемијских реакција или физичком депозицијом. Најпознатије технике епитаксијалног раста су:

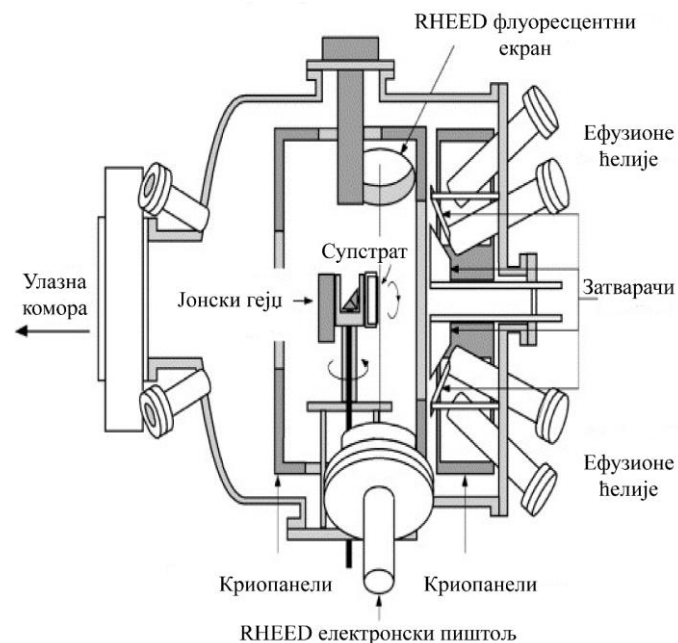
- епитаксија молекуларним снопом (енгл. *Molecular Beam Epitaxy-MBE*),
- металорганска епитаксија из парне фазе (енгл. *Metalorganic Vapour Phase Epitaxy-MOVPE* или енгл. *Metalorganic Chemical Vapour Deposition-MOCVD*),
- епитаксија из течне фазе (енгл. *Liquid Phase Epitaxy-LPE*).

МВЕ представља технику физичке депозиције епитаксијалног слоја на супстрат, док су MOVPE и LPE епитаксијални процеси у којима се нарастање врши помоћу хемијских реакција. Наведене методе се могу искористити за израду слојевитих структура на бази HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te једињења. Проблеми са нарастањем су углавном повезани са нестабилношћу Hg на повишеним температурама и израженом интердифузијом. МВЕ и MOVPE се користе за израду сложенијих структура као што су квантне јаме и суперрешетке, док се LPE техника најчешће користи за реализацију *p*⁺-*n* спојева (Norton, 2002).

1.2.2.1 Епитаксија молекуларним снопом

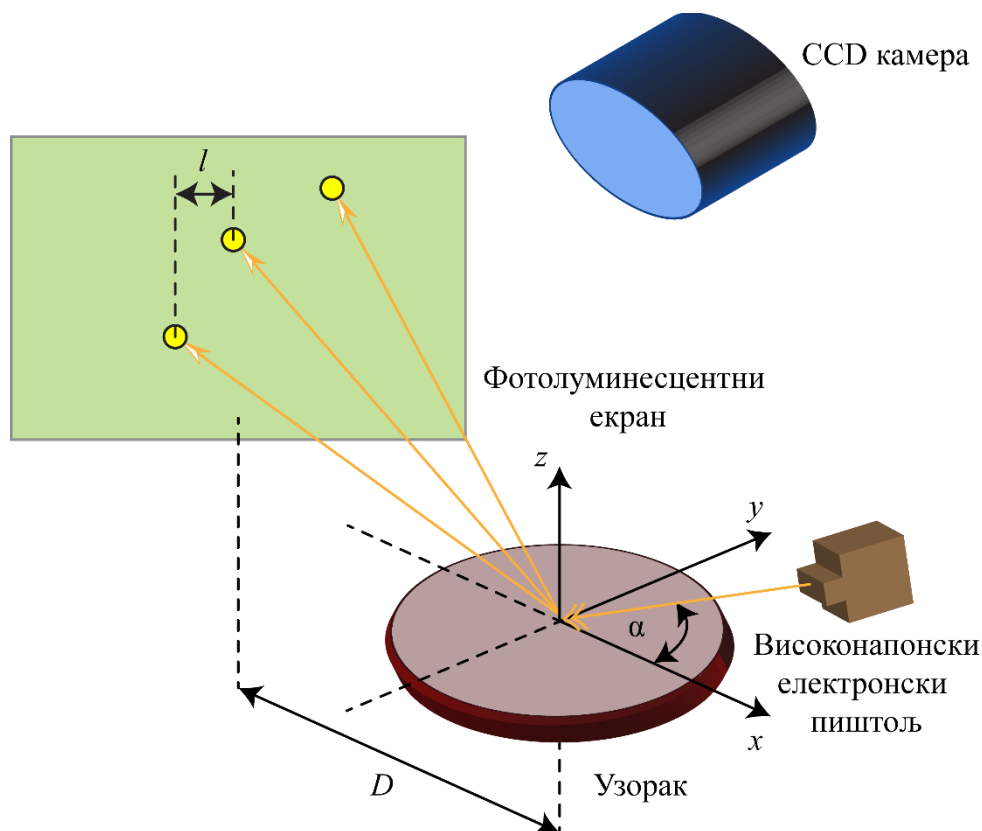
Квантне јаме и суперрешетке које се базирају на HgTe и Cd_xHg_{1-x}Te се најчешће израђују епитаксијом молекуларним снопом (МВЕ). Предност ове технике је у томе што се одвија на температурама између 160 °C и 200 °C (Norton, 2002), чиме се смањују нежељени ефекти интердифузије. Нарастање слојева се одвија у контролисаним условима и обично у *Frank-van der Merwe* епитаксијалном моду за нарастање 2Д структура (Hatch, 2010). Коришћењем ове технике остварује се добра контрола дебљине и униформност слојева. Због смањене интердифузије, МВЕ пружа могућност реализације веома танких слојева са стрмом променом хемијског састава у правцу нарастања. Недостатак МВЕ метода је у томе што се приликом реализације процеса мора пронаћи решење за компензацију губитака Hg. Додатни проблем је раздвојеност чврсте и течне фазе HgTe и CdTe (видети сл. 1.6) због чега је проблематично пронаћи оптималне термодинамичке параметре за извођење МВЕ поступка.

МВЕ се одвија у условима високог вакуума ($133,3 \cdot 10^{-3}$ Pa- $133,3 \cdot 10^{-4}$ Pa) (Norton, 2002). То овој техници пружа могућност *in situ* („на месту“) карактеризације површинских слојева узорака у реалном времену помоћу RHEED (енгл. *Reflection High Energy Electron Diffraction-RHEED*) технике (Chow и Johnson, 1985; Clemens и сар., 1989; Braun, 1999; Sakamoto и сар., 2010). На сл. 1.11 је приказан МВЕ систем са главним деловима: 1) комора за нарастање, 2) ефузионе ћелије и 3) носач за супстрат на којем се депонују епитаксијални слојеви. За успешно нарастање веома је важно контролисати температуру супстрата и флукс из ефузионих ћелија (Chow и Johnson, 1985).



Слика 1.11. Шематски приказ МВЕ система за нарастање епитаксијалних слојева HgTe и Cd_xHg_{1-x}Te (адаптирано из референце Franchi и сар., 2003).

У комори се морају одржавати услови високог вакуума како би се добили квалитетни узорци који нису контаминирани нечистоћама. То је сложен процес, с обзиром да је током нарастања притисак у комори знатно већи у односу на стандардне вредности под којима би требало да се одвија МВЕ. Ово се дешава првенствено због испаравања Hg на повишеним температурама, али и због присуства споредних гасова. Hg се обично изолује протоком течног азота (хем. ознака: N₂) кроз криопанеле који се налазе на ободима коморе. Хлађењем, један део Hg се кондензује у течно стање и одлаже у посебан резервоар, док се други део који је у чврстом стању веже за криопанеле. Важно је напоменути да пре и после процеса нарастања, комора мора да се загрева у периоду од једне недеље на температури од око 100 °C како би се очистила од резидуалних материјала који могу да контаминирају узорак. У комори се налазе и ротациони држач за супстрат, анализатори флукса ефузионих ћелија и сензори који проверавају концентрације гасова током процеса епитаксије.

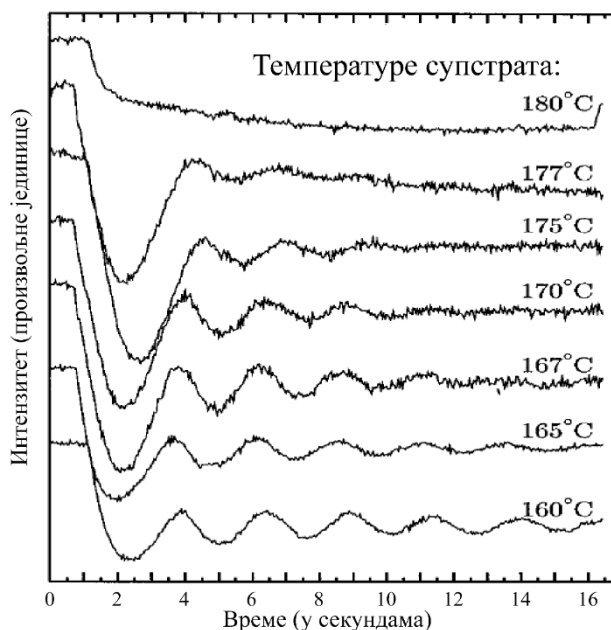


Слика 1.12. Шематски приказ RHEED опреме за карактеризацију: D представља растојање између места на којем електронски сноп пада на узорак и фотолуминесцентног екрана, l је растојање између тачака (означених жутом бојом) на екрану на које падају зраци одбијени од узорка, док је α упадни угао светлости на узорак.

Ефузионе ћелије се налазе у условима високог вакуума. У њих се убацује изворни материјал који је обично у елементарном облику. Најчешће се користе Hg, Te и CdTe (Hatch и сар., 2006). Важно је напоменути да постоје изражене разлике у термодинамичким параметрима при којима долази до дисоцијације Hg и Te из HgTe. То је главни разлог зашто се користе посебне ефузионе ћелије за ове елементе. У систему се налазе и додатне ефузионе ћелије које се пуне елементима за n или p допирање узорка (Jung и сар., 2006; Tsen и сар., 2008). Контејнери за све материјале, осим Hg, су направљени од бор-нитрида (BN), док је контејнер за Hg од кварца због сниженог коефицијента лепљења Hg за зидове. Такође, само контејнер за Hg има могућност пуњења у току нарастања. То је због тога што је потребно компензовати губитке Hg из коморе, с обзиром на ниску температуру испаравања коју овај елемент поседује. Hg се одлаже у течном стању у контејнер, док су остали материјали

иницијално у чврстом стању. Током МВЕ процеса, контејнери се загревају и тада долази до процеса евапорације (испаравања) изворних материјала. Молекулски снопови излазе из ефузионих ћелија и депонују се на супстрат. У случају када је извор жељеног елемента неко једињење, пре депоновања се врши дисоцијација молекула на атоме. Тиме се стварају услови за нуклеацију атома на површини супстрата, који се онда постепено кондензују у монокристалну структуру (Hatch, 2010; Ledentsov, 1999). Флукс снопа из ефузионих ћелија се контролише помоћу механичких затварача чије је време одзива веома кратко. Прецизном контролом флукса се могу формирати слојевите структуре мале дебљине и жељеног хемијског састава.

Да би нуклеација пристиглих атома била успешна, неопходно је одржавати униформну температуру супстрата. То се постиже помоћу грејача који се налази у комори за нарастање. Температура супстрата се контролише помоћу сензора и обично износи 180 °C (Besker и сар., 2007). Супстрат је смештен на држач направљен од материјала који добро проводи топлоту, испод којег се налази грејач (Hatch, 2010). На овај начин се обезбеђује ефикасан пренос топлоте између грејача и супстрата. Материјали који се често користе као супстрат за нарастање су $Cd_xZn_{1-x}Te$ (Lansari и сар., 1989; Ortner и сар., 2001), CdTe (Chow и Johnson, 1985) и GaAs (Kadykov и сар., 2018). Физички процеси који се дешавају током епитаксијалног раста зависе од оријентације супстрата. Покретљивост атома на површини супстрата, коефицијенти кондензације, па чак и кристални дефекти енергетски могу бити фаворизовани одређеном оријентацијом (Hatch, 2010). У литератури се срећу (001) и (112) површинске оријентације за $Cd_xZn_{1-x}Te$ (Hatch и сар., 2006), (013) оријентација за супстрат од GaAs (Kvon и сар., 2009) и (111) (Chow и Johnson, 1985) или (001) оријентација (Oehling и сар., 1996) за CdTe супстрате.



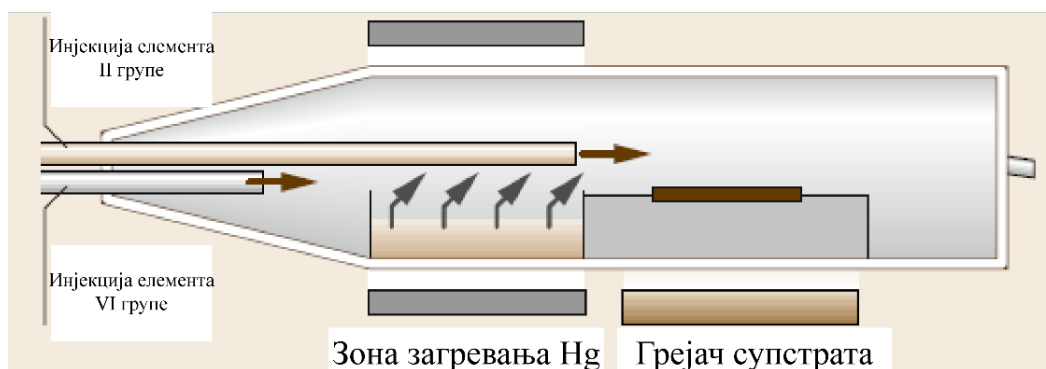
Слика 1.13. RHEED осцилације за (001) оријентацију HgTe слојева нарастлих помоћу МВЕ метода. Интензитет осцилација опада са променом температуре супстрата, док на температурама изнад 177 °C осцилације више нису видљиве (адаптирано из референце Oehling и сар., 1996).

RHEED техника за карактеризацију добијених узорака користи таласна својства електрона. Шема RHEED апаратуре за анализу је представљена на сл. 1.12. Са ове слике се може видети да су основне компоненте RHEED система: 1) високонапонски „електронски топ“, 2) фотолуминесцентни екран и 3) CCD камера. Из електронског топа излази снап електрона који пада под релативно малим углом у односу на површину узорка који се

анализира. Пристигли електрони се дифрактују са површине кристала и, за одређене углове дифракције, долази до појаве шаблона конструктивне интерференције на фотолуминесцентном екрану која се прати помоћу CCD камере. Због малог упадног угла, помоћу RHEED технике могуће је испитивати само површинске слојеве узорка. Интензитет RHEED сигнала има осцилаторни облик, где један период осцилација одговара расту једног монослоја. На сл. 1.13 је представљен пример RHEED осцилација за HgTe узорак који је оријентисан у (001) правцу. Са ове слике се може приметити да период осцилација зависи од температуре. Повећавањем температуре супстрата интензитет осцилација опада, док се на температури од 178 °C оне више не могу детектовати. Тада долази до транзиције облика нарастања у виду 2Д острва у тзв. *step-flow* механизам нарастања (Oehling и сар., 1996).

1.2.2.2 Металорганска епитаксија из парне фазе

Металорганска епитаксија из парне фазе (MOCVD) је слична претходно описаној техници епитаксије молекуларним снопом (МВЕ). Овде се нарастање не спроводи путем физичке депозиције, већ на основу хемијских реакција у комори (Нокс и Lemonias, 1986; Cinader и сар., 1990; Bhat и сар., 1992). Формирање HgCdTe епитаксијалних слојева путем MOCVD се одвија на температурама између 275 °C-400 °C и притисцима од 133,3-300 Pa до 133,3·760 Pa (Norton, 2002). Чистоћа добијених узорака је приближно иста као и код МВЕ технике, док је концентрација дислокација већа у односу на МВЕ.



Слика 1.14. Компоненте реакционе коморе која се користи у склопу MOCVD метода (адаптирано из референце Carper и сар., 2017).

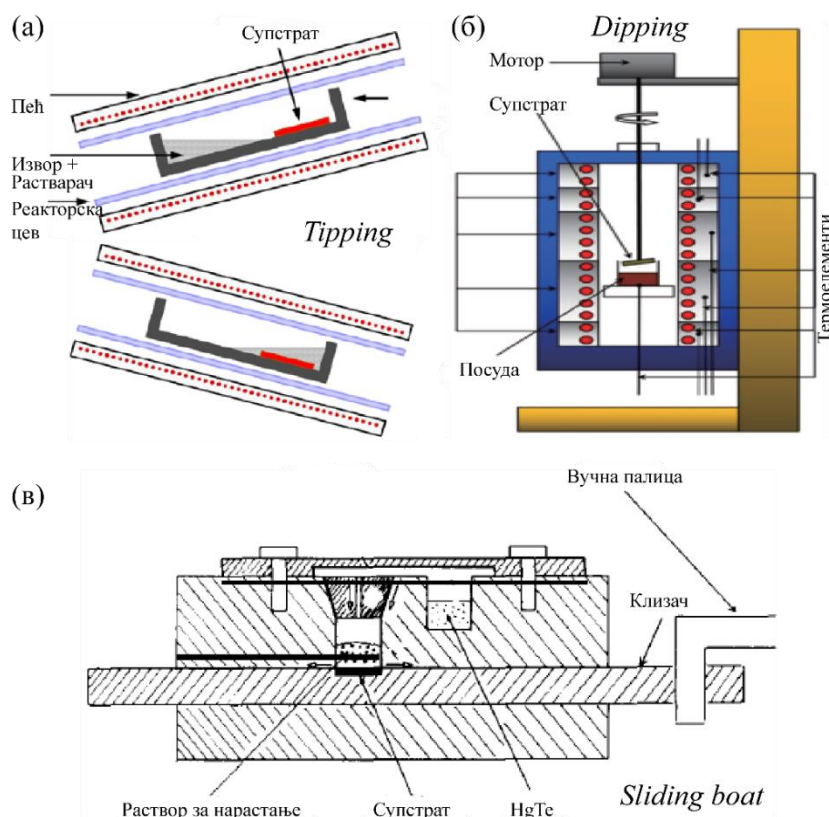
На сл. 1.14 је приказана реакциона комора за спровођење поступка нарастања HgTe-Cd_xHg_{1-x}Te слојева MOCVD методом. Зидови коморе треба да буду у могућности да поднесу температуре изнад 200 °C и да буду направљени од нереактивног материјала (често се користи кварц). За разлику од реакционе коморе за нарастање III-V једињења, која се хлади да би се смањила реактивност њених зидова, овде се комора загрева на температуру супстрата како би се спречила кондензација Hg (Carper и сар., 2017). У комори се налазе и посебни инјектори прекурсорских гасова који су извори елемената из II и VI групе. Металоргански прекурсорски гас за Cd је диметилкадмијум (DMCd), а за Te је диизопропилтелурид (DIPTe). Контејнер за Hg у елементарном облику се такође налази у комори и поседује посебан грејач. У овом контејнеру Hg се налази у течном стању и загревањем прелази у гасовито стање. Ово је једини случај у оквиру MOCVD метода да се један од прекурсорских гасова налази у елементарном облику. DMCd се у реакционој комори инјектује после Hg како би се избегле непожељне хемијске реакције (Carper и сар., 2017). Након убацивања прекурсорских гасова у комору, они се крећу ка површини супстрата који се налази у комори. Када се нађу у околини супстрата, долази до пиролизе. Пиролиза представља процес термалне декомпозиције прекурсорских гасова на тзв. прекурсорске

подврсте које се адсорбују на супстрату. Температура на којој ће се одвијати процес пиролизе зависи од јачине хемијских веза атома метала са угљениковим атомима у металорганским прекурсорима. Што је веза слабија температуре потребне за одвијање овог процеса су ниже. Оптимална температура за настање $\text{HgTe-Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ слојева је око 250 °C (Carper и сар., 2017). Након што су одговарајуће прекурсорске подврсте депоноване на површину супстрата, оне ступају у хемијске реакције које доводе до раста епитаксијалних слојева.

1.2.2.3 Епитаксија из течне фазе

Епитаксијом из течне фазе (LPE) се нарастају епитаксијални слојеви фазним прелазом из течног у чврсто агрегатно стање (Bowers и сар., 1980; Johnston и сар., 1991; Suh и сар., 1992). У почетној фази се најпре формира засићени раствор. Он подразумева да је растворак у равнотежи са растварачем. Равнотежа подразумева да су брзина солватације (окруживања честица раствора молекулима растварача) и преципитације (таложње растворене супстанце) једнаке. Променом температуре и/или притиска раствор се може довести у презасићено („суперзасићено“) стање. Обично се у технолошком процесу мења температура. Контролисани повратак раствора у равнотежно стање може се остварити додавањем „клице“ (у овом случају је то супстрат) на чијој површини се иницира преципитација која је праћена процесом кристализације на површини. Постоје три различите технике како се раствор и супстрат могу довести у контакт и то су (Bowers и сар., 1980; Carper и сар., 2017):

- техника нагињања (енгл. *Tipping*),
- техника урањања (енгл. *Dipping*),
- техника клизног носача-брода (енгл. *Sliding boat*).



Слика 1.15. Основне технике нарастања слојевитих структура помоћу LPE метода: **(а)** нагињање (адаптирано из референце Pohl, 2013), **(б)** урањање (адаптирано из референце Rao и сар., 2018) и **(в)** техника клизног носача (адаптирано из референце Suh и сар., 1992).

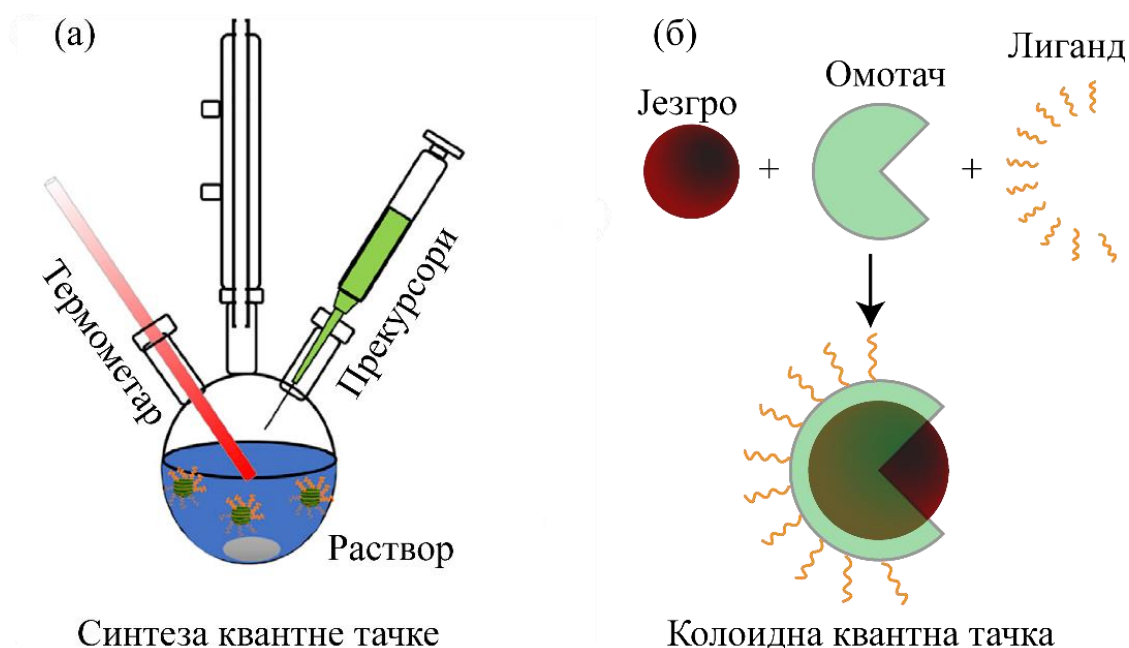
На сл. 1.15 су представљене принципске шеме наведених техника. Нарастање се обично одвија на супстрату од CdTe, Si, сафира или CdZnTe (Bowers и сар., 1980; Johnston и сар., 1991; Adamiec и сар., 2000). У оквиру технике нагињања, супстрат и раствор су смештени на супротним крајевима силицијумског или графитног носача („брода“). Носач је постављен између грејача који загревају раствор. Када се постигне жељена температура, носач се нагиње тако да се раствор, који је у течном стању услед загревања, доведе у контакт са супстратом. „Суперхлађењем“ долази до појаве кристализације раствора на површини супстрата.

Техника урањања се одвија у вертикалном моду. Супстрат је смештен на покретни држач од силицијума или графита. Раствор је обично у посуди од нерђајућег челика која је обложена кварцом. У систему се налазе грејачи који загревају раствор до температуре изнад тачке топљења. Затим се врши померање држача помоћу одређеног механизма тако да се супстрат доводи у контакт са раствором. Слично као и код претходне технике, наглим хлађењем раствора долази до нарастања новог монокристалног слоја.

Техника клизног носача је најчешће коришћена техника којом се раствор и супстрат доводе у непосредни контакт. За њено извођење користи се систем који је подељен на два дела која се најчешће израђују од графита. Основни део је носач који је непокретан и у њему је направљен простор за супстрат. Изнад основног дела је покретни део у којем је смештен контејнер за одлагање раствора. Померањем покретног дела контејнер са раствором се доводи у контакт са супстратом. Нарастање се може спровести из раствора Hg или из раствора Te (Norton, 2002). Поступак нарастања из раствора Hg се одвија на температурама од 350 °C и 550 °C, док је поступак нарастања из раствора Te на нешто већим температурама између 400 °C и 550 °C (Norton, 2002).

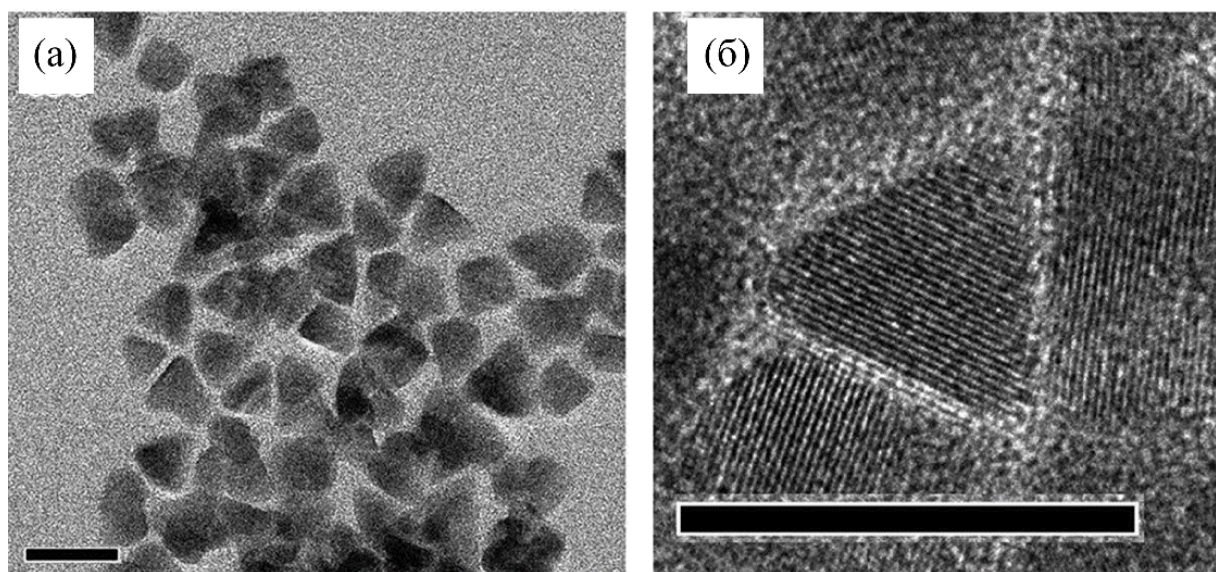
1.2.3 Синтеза HgTe нанотачака у колоидним растворима

Квантне тачке које су реализоване у раствору путем хемијских реакција се називају колоидне квантне тачке (CQD). Оне настају у колоидним растворима (колоидима). Шематски приказ апаратуре за колоидну синтезу је представљен на сл. 1.16.



Слика 1.16. (а) Апаратура за колоидну синтезу HgTe квантних тачака (адаптирано из референце Zhao и Rosei, 2017), (б) Уобичајена структура колоидних квантних тачака.

У комори се налази реакциона смеша у коју се уносе прекурсори неопходни за одвијање хемијске реакције. Обично се металоргански прекурсори инјектују у органски растварач на температурама од 120 до 360 °C (Shirasaki и сар., 2013). Загревањем реакционе смеше прекурсори се разлажу на мање јединице које ступају у процес нуклеације и формирају нанокристале. Синтезом у колоидним растворима се израђују квантне тачке са израженом особином фотолуминесценције (Abdelazim и сар., 2017). Колоидне квантне тачке се састоје од језгра, омотача и лиганда (сл. 1.16). Језгро је неоргански полупроводник димензија до 10 nm. Омотач је такође неоргански полупроводник са ширим енергетским процепом. Лиганд је јон или молекул који се везује за централни атом (у овом случају квантну тачку) формирајући комплексно једињење. Лиганди су органске природе и доприносе растворљивости нанокристала у различитим неполарним растварачима и онемогућавају спајање квантних тачака у раствору. Као лиганди који ефикасно врше пасивизацију површине везивањем за Hg атоме се често користе тиоли (Shen и сар., 2017). Везе између лиганда и колоидне квантне тачке се могу раскинути чиме се добијају структуре типа *језгро-омотач*.

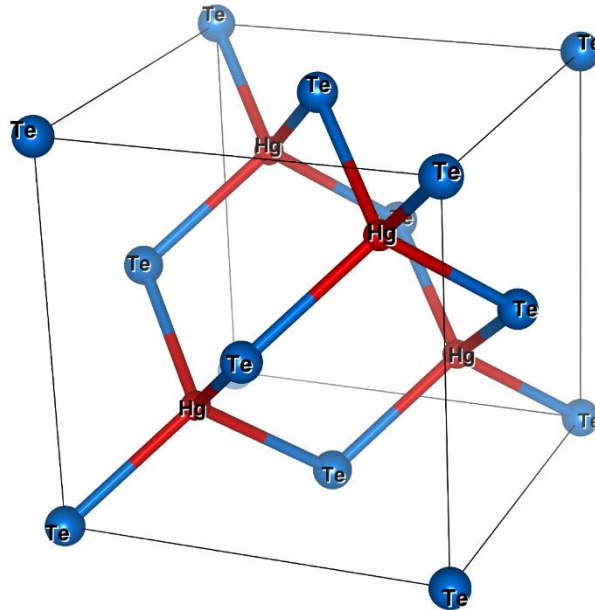


Слика 1.17. (а) ТЕМ снимак HgTe наночестица са средњом дужином стране од 14,5 nm, (б) HRTEM снимак једне HgTe наночестице у облику троугла (адаптирано из референце Keuleyan и сар., 2011А).

HgTe квантне тачке се синтетишу из органског (Keuleyan и сар., 2011А) или воденог раствора (Kovalenko и сар., 2006). Колоидне квантне тачке имају неколико предности у односу на квантне тачке које су произведене на узорку или у матрици. Прва предност је у томе што је могуће произвести колоидне квантне тачке од различитих материјала са унапред дефинисаним својствима. Друго, колоидни системи пружају могућност промене растварача у којима се налазе нанокристали. На пример, могуће је произвести HgTe нанотачку у воденом раствору, а онда је пребацити у органски раствор. На крају, могуће је и депоновање квантне тачке таложеним (преципитацијом) или дифузијом на супстрат што пружа флексибилност у поступку производње. Карактеризација добијених узорака се најчешће врши помоћу трансмисионе електронске микроскопије (енгл. *Transmission Electron Microscopy-TEM*) и трансмисионе електронске микроскопије високе резолуције (енгл. *High Resolution Transmission Electron Microscopy-HRTEM*). На сл. 1.17 (а) је приказан ТЕМ снимак већег броја HgTe наночестица средње вредности дужине ивице од 14,5 nm, док је на сл. 1.17 (б) приказан HRTEM снимак једне наночестице чији облик и димензије могу да варирају у зависности од примењеног метода израде (Keuleyan и сар., 2011А).

1.3 Особине HgTe, CdTe и Cd_xHg_{1-x}Te легуре

HgTe и CdTe су бинарна хемијска једињења која припадају II-VI групи тетраедарски оријентисаних полупроводника. Сваки атом из II групе (Hg или Cd) је повезан са четири атома из VI (Te) групе поларним ковалентним везама које међусобно заклапају угао од 109,5°. Ковалентне везе у HgTe су формиране између 6s електрона Hg атома и 5p електрона Te атома, док се у CdTe ковалентне везе стварају између 5s електрона Cd атома и 5p електрона Te атома. Оба једињења имају сфалеритну кристалну структуру (енгл. *Zinc-blende*) која је представљена комбинацијом две површински центриране кубичне кристалне решетке померене за четвртину главне дијагонале са $F\bar{4}3m$ просторном групом симетрије.

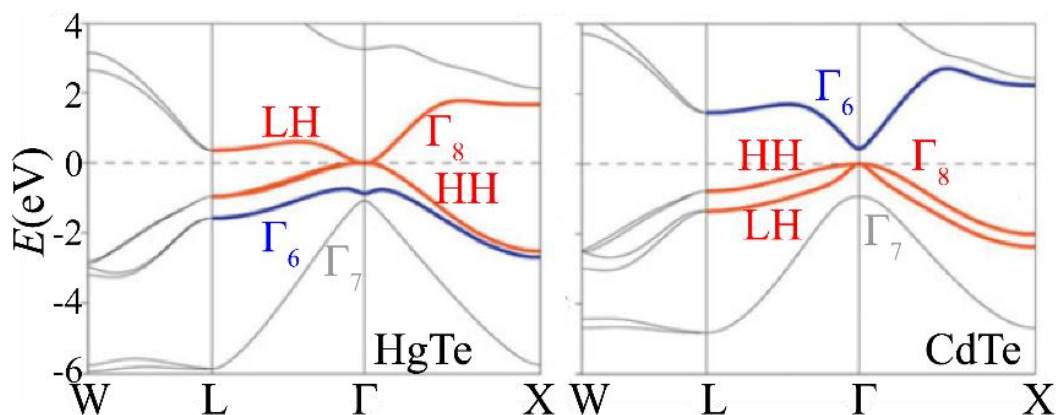


Слика 1.18. Јединична ћелија кристала HgTe са сфалеритном решетком.

На сл. 1.18 је приказана *јединична ћелија* сфалеритног кристала која садржи осам атома. Атоми су смештени на следећим позицијама: $(0, 0, 0)$, $(a_0/2, a_0/2, 0)$, $(0, a_0/2, a_0/2)$, $(a_0/2, 0, a_0/2)$, $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$, $(3a_0/4, 3a_0/4, a_0/4)$, $(a_0/4, 3a_0/4, 3a_0/4)$, $(3a_0/4, a_0/4, 3a_0/4)$, где је a_0 параметар кристалне решетке. Атомски пар (димер) на позицијама $(0, 0, 0)$ и $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ у јединичној ћелији дефинише *примитивну ћелију* чијом се translацијом може репродуковати кристал (Zheng и сар., 2015). С обзиром да сфалеритни кристали садрже атоме две врсте, у њима не постоји центар инверзионе симетрије. Параметар кристалне решетке на температури од 300 К за HgTe износи $a_{0,HgTe} = 6,4615 \text{ \AA}$, док је за CdTe $a_{0,CdTe} = 6,4823 \text{ \AA}$ (Krishtopenko и сар., 2016A). Разлике у вредностима параметара кристалне решетке за HgTe и CdTe су веома мале. Због тога су ови материјали погодни за реализацију хетероструктура у којима није изражен утицај напрезања које се јавља услед неусаглашености параметара кристалне решетке.

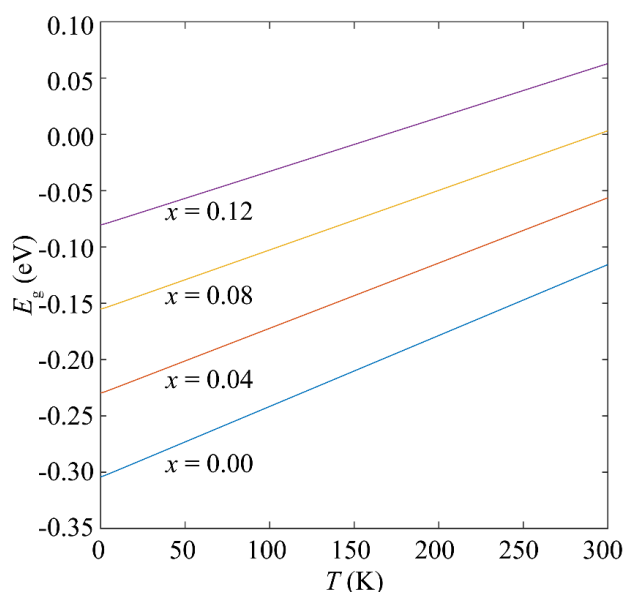
На сл. 1.19 је приказана зонска структура масивних (балковских) HgTe и CdTe полупроводника у Брилуеновој зони (франц. *Brillouin*). CdTe поседује нормалан зонски распоред. Најнижа проводна зона са Γ_6 симетријом ($j=1/2$) је енергетски изнад највише валентне зоне са Γ_8 симетријом ($j=3/2$) која је дегенерисана у Γ тачки (Sengupta и сар., 2013). CdTe има директан енергетски процеп $E_g(\Gamma)=1,606 \text{ eV}$, док је зона отцепљена услед спин-орбитне интеракције са Γ_7 симетријом позиционирана $\Delta=0,91 \text{ eV}$ испод валентне зоне (Novik и сар., 2005). Hg и Te су тешки елементи у којима су изражени релативистички ефекти. Услед јаке спин-орбитне интеракције, у масивном HgTe долази до појаве инверзије подзона

због чега се ово једињење понаша као полуметал (Vernevig и сар., 2006). Слично као код CdTe, стање са Γ_8 симетријом је дегенерисано у Γ тачки и састоји се од зоне тешких шупљина (енгл. *Heavy Hole*-HH) и зоне лаких шупљина (енгл. *Light Hole*-LH). Шупљинска стања су енергетски изнад стања са Γ_6 симетријом. Због тога HgTe има негативан енергетски процеп $E_g(\Gamma) = -0,303$ eV. Зона отцепљена услед спин-орбитне интеракције са Γ_7 симетријом се налази $\Delta = 1,08$ eV испод валентне зоне. У HgTe носиоци наелектрисања попуњавају зону са Γ_6 симетријом за разлику од материјала са „нормалним зонским распоредом“ у којима електрони попуњавају једну од зона са Γ_8 симетријом.



Слика 1.19. Зонска структура масивних (а) HgTe и (б) CdTe полупроводника (адаптирано из референце Yan и De Visser, 2014).

Другим речима, наелектрисања у HgTe су прерасподељена тако да HH зона представља популисану валентну зону, док је LH зона већим делом празна и има улогу проводне зоне (Yan и Zhang, 2012). Због ограниченог кретања електрона у наноструктурама које се базирају на HgTe долази до промене вредности енергија стања у околини Γ тачке. Уколико је конфинурање кретања довољно изражено, могуће је отварање енергетског процепа између HH и LH зоне што може бити испраћено топологијом условљене промене квантне фазе. Вредности параметара зонске структуре за HgTe и CdTe коришћене у нумеричким симулацијама су приказане у Прилогу 1.



Слика 1.20. Зависност величине енергетског процепа $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ легуре од моларног удела (x) и температуре (T).

Од Hg, Cd и Te елемената је могуће формирати и тернарну легуру $Cd_xHg_{1-x}Te$. Тернарна легура се такође карактерише сфалеритном кристалном решетком са нешто сложенијом композицијом атомских врста. У једној површински центрираној кубичној кристалној решетки се налазе само атоми Te, док су у другој смештени атоми Hg и Cd у одређеном количинском односу. Удео атома Cd у $Cd_xHg_{1-x}Te$ легури се квантификује моларним уделом (x). Поред температуре (T), енергетски процеп $Cd_xHg_{1-x}Te$ зависи и од моларног удела према следећем изразу (Krishnamurthy и сар., 1995):

$$E_g(x, T) = -304 + \frac{0,63T^2}{11 + T}(1 - 2x) + 1858x + 54x^2, \quad (1.3.1)$$

где је вредност енергетског процепа изражена у милиелектронволтима (meV). На сл. 1.20 је представљена варијација величине енергетског процепа $Cd_xHg_{1-x}Te$ легуре са променом температуре (T) за неколико дискретних вредности моларног удела (x). Параметар закривљења (енгл. *bowing parameter*) износи $C=54$ meV и описује одступање од линеарне зависности. Ова вредност је мала, тако да се једначина (1.3.1) може апроксимирати коришћењем само линеарних чланова по x .

1.4 Структура докторске дисертације

У овој докторској дисертацији су истражене следеће наноструктуре:

- HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te двоструке квантне јаме,
- HgTe квантне тачке и
- HgTe квантни прстенови.

За моделовање електронских особина двоструких квантних јама коришћен је $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел, док је рачун електронске структуре HgTe квантних тачака и прстенова спроведен помоћу метода јаке везе.

У првој глави докторске дисертације представљене су наноструктуре које се базирају на HgTe. Описани су технолошки поступци који се користе за њихову производњу и дат је преглед основних особина за следеће материјале: 1) HgTe, 2) CdTe и 3) $Cd_xHg_{1-x}Te$.

У другој глави су представљени методи коришћени за моделовање електронске структуре. Прво је анализирана вишезонска $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорија која даје задовољавајуће резултате само у околини тачке $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Развијен је $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел за случај масивног полупроводника у којем је непозната таласна функција представљена помоћу коначног броја Блохових (нем. *Bloch*) функција. Приликом развоја модела, описан је поступак за укључивање утицаја спин-орбитне интеракције. Затим је помоћу теорије пертурбација у присуству квазидегенерације формиран модел који експлицитно описује само проводну зону. Утицај осталих зона је урачунат коришћењем Левдинове теорије пертурбација. Представљен је осмозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел и објашњен је поступак моделовања напрезања, спољашњег електричног и спољашњег магнетског поља. Напрезање је моделовано коришћењем Бир-Пикусовог формализма (рус. *Бир*, рус. *Пикус*). Утицај електричног поља је урачунат модификацијом дијагоналних чланова $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ хамилтонијана, док је магнетско поље моделовано помоћу Пајерлсове замене и хамилтонијана који описује Земанов ефекат. Затим је описан метод јаке везе који веродостојно описује електронску структуру у читавој Брилуеновој зони. За разлику од $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела, у оквиру којег је таласна функција приказана као линеарна комбинација раванских таласа, таласна функција у оквиру формализма метода јаке везе је представљена линеарном комбинацијом атомских орбитала. Описана је двоцентарска апроксимација и формиран је модел јаке везе за кристале са сфалеритном кристалном структуром у који је укључен ефекат спин-орбитне интеракције.

У трећој глави су представљени резултати за $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ симетричне и асиметричне двоструке квантне јаме са $[001]$ правцем нарастања. Описано је како се електронска стања ових наноструктура мењају у присуству напрезања и спољашњег електричног и магнетског поља. Резултати су добијени помоћу осмозонског Кејновог $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела. Проблеми на границама хетероспојева су решени применом Бартових (енгл. *Burt*) симетризационих правила. Демонстрирано је да се прелаз из полуметалног у нетривијално изолаторско стање код вишеструких асиметричних квантних јама може ефикасно контролисати подешавањем односа дебљина јамског материјала. Показано је да у двоструким јамама постоји просторна раздвојеност између стања са дна проводне и врха валентне зоне и да промена моларног удела у баријерама, која утиче на спрезање јама, може имати значајан утицај на зонску структуру и услове за тополошку транзицију.

У четвртој глави су представљене електронске и оптичке особине 2Д HgTe квантних тачака и прстенова. За моделовање електронске структуре је коришћен метод јаке везе у $sp^3d^5s^*$ базисном скупу. Вредности матричних елеманата су одређене параметризацијом за случај масивног HgTe материјала. Приликом развоја модела коришћена је двоцентарска апроксимација у којој се занемарује велики број матричних елемената који су представљени троцентарским интегралима. У оквиру модела јаке везе је уведена спин-орбитна интеракција. Утицај магнетског поља је урачунат преко Пајерлсове замене, док је оптичка апсорпција израчуната коришћењем уобичајене интраорбиталне апроксимације. Показано је да у нанотачкама и нанопрстеновима постоји велики утицај ивичних стања на оптичку апсорпцију у терахерцној области, која се може фино подешавати применом магнетског поља. Пронађене су интензивне Ахаронов-Бомове осцилације стања у проводној и валентној зони код нанопрстенова. Установљено је да постоје специфична ивична стања локализована дуж читавих ивица структуре која доводе до манифестације Ахаронов-Бомових осцилација чак и у једнострукно повезаној структури попут квантне тачке.

У петој глави је дат сумарни приказ добијених резултата и продискутовани су најважнији научни доприноси ове докторске дисертације.

У Прилогу 1 и 2 су представљени зонски параметри за HgTe и CdTe и параметри метода јаке везе по Слејгер-Костеровој нотацији, редом. У Прилогу 3 је дат списак двоцентарских интеграла између различитих орбитала из $sp^3d^5s^*$ базисног скупа који су написани преко дирекционих косинуса. У Прилогу 4 је изведена Блохова теорема као полазна основа приликом развоја било ког зонског модела за полупроводнике. У Прилогу 5. су представљене основе теорије анвелопних функција за анализу електронских особина хетероструктура смањене димензионалности. У Прилозима 6 и 7 је дато детаљно извођење теорије пертурбација независних од времена и Левдинове пертурбационе теорије које се користе приликом развоја вишезонских $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела. У Прилогу 8 су представљени сферни хармоници који се користе као базисне функције у моделу јаке везе. На крају, у Прилогу 9 је описан прототипски модел јаке везе за двоатомски молекул.

2. Методи израчунавања електронских особина HgTe наноструктура

У овој глави ће бити представљени методи који су коришћени за моделовање зонске структуре HgTe наноструктура. Прво ће бити анализирана вишезонска $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорија која се са задовољавајућом тачношћу може применити у случају симетричних и асиметричних двоструких HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама. Затим ће бити описан емпиријски метод јаке везе (енгл. *Tight Binding*) помоћу којег су моделована електронска и оптичка својства квази-нултодимензионих структура типа квантне тачке и квантног прстена.

2.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорија

Приликом одређивања електронских особина слојевитих наноструктура најчешће се користи *апроксимација анвелопним функцијама* (Rossi, 2011) помоћу које је могуће описати електронска и шупљинска стања (видети Прилог 5) чак и у присуству спољашњих поља или напрезања (Winkler, 2003). Најједноставнији приступ у оквиру апроксимације анвелопним функцијама је добро позната *теорија ефективних маса* (Wannier, 1937; Slater, 1949; Morrow, 1987; Winkler, 2003). У оквиру ове теорије се посматра кретање једног електрона док се његове интеракције са другим електронима, као и утицај периодичног кристалног потенцијала, описују помоћу тензора ефективне масе, m^* . Електрон има таласну природу и његова енергија у околини екстремума (врха или дна) зоне се може одредити следећом једначином (Slater, 1949; Bir и Pikus, 1974):

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_z}, \quad (2.1.1)$$

где је E_c енергија ивице посматране зоне, \hbar редукована Планкова (нем. *Planck*) константа, а m_x , m_y и m_z компоненте тензора ефективне масе. Из једначине (2.1.1) се може закључити да се у теорији ефективних маса посматра само једна зона са параболичном зависношћу у реципрочном простору (Winkler, 2003). Ефективна маса може бити позитивна или негативна. Уколико је ефективна маса електрона негативна, тада спољашња поља на електрон делују као да је он позитивно наелектрисан. Због тога се у оквиру ове теорије уводи и појам позитивно наелектрисане квазичестице која се назива *шупљина* (Luttinger и Kohn, 1955).

Теорија ефективних маса се може користити само у случају материјала са једноставном зонском структуром. Ова теорија се не може применити на HgTe који има сфалеритну кристалну решетку у којој не постоји центар инверзионе симетрије (Man и Pan, 1991). У овом бинарном једињењу постоји изражено спрезање између највише валентне и најниже проводне зоне које узрокује непараболичност проводне зоне (Novik и сар., 2005). HgTe поседује инвертовану зонску структуру (Sengupta и сар., 2013), а додатне компликације приликом моделовања су проузроковане постојањем дегенерације HH и LH зона у Γ тачки (Winkler, 2003; Novik и сар., 2005). Овај материјал се карактерише и израженом спин-орбитном интеракцијом коју је потребно укључити у модел (Sengupta и сар., 2013). Због тога се за рачунање електронске структуре слојевитих наноструктура, које се базирају на HgTe, користе сложенији вишезонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модели у којима је урачунат утицај спрезања већег броја зона, као и спин-орбитна интеракција.

У оквиру вишезонске $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорије таласна функција која фигурише у Шредингеровој (нем. *Schrödinger*) једначини је представљена као линеарна комбинација Блохових функција (Bloch, 1929) у центру Брилуенове зоне. Блохове функције имају особину периодичности са периодом који одговара параметру кристалне решетке. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метод је иницијално коришћен за моделовање електронске структуре масивних полупроводника (Luttinger и Kohn, 1955; Kane, 1956; Kane, 1957), али се уз извесне модификације хамилтонијана за масивни

полупроводник може искористити и за приближни opis зонске структуре полупроводничких хетероструктура (Moyses Cohen и Eugenio Marques, 1990; Aversa и Sipe, 1994; Zawadzki и сар., 1994; Novik и сар., 2005; Sengupta и сар., 2013; Topalović и сар., 2019; Topalović и сар., 2020). Измене се односе на приказивање компонената таласног вектора у операторској форми (Galeriu, 2005). Такође, хамилтонијан се додатно мења помоћу *ad hoc* симетризационих правила услед чињенице да параметри који зависе од положаја у структури не комутирају са оператором момента количине кретања (Novik и сар., 2005; Galeriu, 2005). Предност $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метода је релативно једноставно укључивање унутрашњих и спољашњих ефеката као што су спољашње електрично и магнетско поље, парамагнетске интеракције или механичко напрезање (Winkler, 2003; Ćukarić, 2015). Помоћу овог метода могуће је укључити и спин-орбитну интеракцију што је нарочито важно за материјале сачињене од тешких елемената. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорија не захтева значајне рачунарске ресурсе, за разлику од метода израчунавања из првих принципа (познатих и као *ab initio* методи) код којих се полази од фундаменталних законитости. Модел заснован на $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорији не зависи од великог броја параметара и може се искористити за израчунавање оптичких и транспортних особина полупроводничких наноструктура (Novik и сар., 2005; Botha, 2012). Важно је напоменути да је помоћу стандарних $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела могуће израчунати електронску структуру само у околини неке тачке у реципрочном простору. У дисертацији је зонска структура симетричних и асиметричних двоструких HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама описана у околини тачке $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

У овој секцији су прво анализирани основни концепти $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорије за масивни полупроводник и начин укључивања спин-орбитне интеракције у модел. Помоћу теорије пертурбација независних од времена (видети Прилог 6) у којој се члан сразмеран са $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ и спин-орбитна интеракција третирају као пертурбације, формиран је модел у којем је експлицитно размотрена једна зона. Затим је коришћењем Левдиновог пертурбационог метода (видети Прилог 7) формиран осмозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел у оквиру теорије анвелопних функција (видети Прилог 5). На примеру овог модела је објашњено како се моделују напрезање, спољашње електрично и спољашње магнетско поље.

2.1.1 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел за случај масивног полупроводника

Помоћу $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метода је могуће одредити зонску структуру масивног полупроводника са задовољавајућом прецизношћу у околини тачке експанзије \mathbf{k}_0 у реципрочном простору (Man и Pan, 1991; Galeriu, 2005; Ćukarić, 2015). Приликом развоја $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела полази се од Шредингерове једначине (Winkler, 2003):

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.2)$$

у којој фигуришу маса слободног електрона m_0 и детаљни потенцијал кристала $V_0(\mathbf{r})$. За полупроводничке материјале који се састоје од тешких елемената, због чега значајан утицај имају релативистички ефекти, потребно је урачунати и ефекте спин-орбитне интеракције модификацијом једначине (2.1.2) (Kane, 1957; Kittel, 1987):

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} \right) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.1.3)$$

преко члана $\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p}$, где је $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ вектор Паулијевих (нем. *Pauli*) матрица. На основу Блохове теореме (видети Прилог 4) непозната таласна функција $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

се може приказати као производ раванског таласа и брзопроменљиве Блохове функције (Bloch, 1929):

$$\Psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.1.4)$$

где је \mathbf{k} таласни вектор, а n индекс зоне. Пошто је могуће једноставно утврдити утицај оператора кинетичке енергије на равански талас $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, заменом (2.1.4) у (2.1.3) добија се Шредингерова једначина по непознатим Блоховим функцијама $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{k} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ & = \left(E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

У једначини (2.1.5) спински квантни број σ није добар квантни број, док се индексом n означавају истовремено орбитални и спински степен слобде. Блохова таласна функција $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, има форму двокомпонентног спинора (Kittel, 1987). У хамилтонијану фигурише и члан сразмеран са $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ по којем је метод добио назив. Овај члан се третира као пертурбација у околини екстремума зона (Џукарић, 2015). Чланови хамилтонијана којима се моделује утицај спин-орбитне интеракције се такође урачунавају у пертурбативном смислу (Winkler, 2003). Наредни корак у развоју модела је избор тачке експанзије \mathbf{k}_0 у реципрочном простору. У дисертацији је посматран случај када је $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$. За ову тачку важи да Блохове таласне функције, $u_{\eta,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$, чине комплетан скуп ортонормираних функција (Bloch, 1929):

$$\langle \eta, \mathbf{k}_0 | \eta', \mathbf{k}_0 \rangle = \delta_{\eta,\eta'}. \quad (2.1.6)$$

Због тога се непозната Блохова таласна функција у било којој тачки \mathbf{k} може представити као линеарна комбинација таласних функција у центру Брилуенове зоне $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ (Kane, 1956; Kane, 1957; Winkler, 2003):

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\eta',\sigma'=\uparrow,\downarrow} a_{n,\eta',\sigma'}(\mathbf{k}) u_{\eta',\sigma',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (2.1.7)$$

Заменом једначине (2.1.7) у једначину (2.1.5), затим множењем добијеног израза са леве стране чланом $u_{\eta,\sigma,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ и интеграцијом по читавом простору добија се једначина у матричном облику (Winkler, 2003; Galeriu, 2005)

$$\begin{aligned} & \sum_{\eta',\sigma'=\uparrow,\downarrow} \left\{ E_{\eta'}(\mathbf{0}) \delta_{\eta,\eta'} \delta_{\sigma,\sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{\Pi}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} + \Delta_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} \right\} a_{n,\eta',\sigma'}(\mathbf{k}) \\ & = E_n(\mathbf{k}) a_{n,\eta,\sigma}(\mathbf{k}) - \sum_{\eta',\sigma'=\uparrow,\downarrow} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{\eta,\eta'} \delta_{\sigma,\sigma'} \right\} a_{n,\eta',\sigma'}(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

где је

$$\mathbf{\Pi}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} = \left\langle \eta', \sigma', \mathbf{k}_0 \left| \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \right| \eta, \sigma, \mathbf{k}_0 \right\rangle, \quad (2.1.9)$$

$$\Delta_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} = \left\langle \eta', \sigma', \mathbf{k}_0 \left| \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} \right| \eta, \sigma, \mathbf{k}_0 \right\rangle. \quad (2.1.10)$$

Из једначине (2.1.8) се може лако видети да дијагонални чланови матрице потичу од кинетичког и потенцијалног дела (непертурбованог) хамилтонијана једначине (2.1.5) (Ћукарић, 2015). Вандијагонални елементи у матрици воде порекло од $\mathbf{P}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'}$ и $\mathbf{A}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'}$ елемената у којима фигуришу \mathbf{k} и \mathbf{p} . Блохове таласне функције у центру Брилуенове зоне имају симетрију s или p атомских орбитала (Winkler, 2003). Приликом примене модела није могуће користити теоријски бесконачан базис, већ се узима коначан број Блохових функција у центру Брилуенове зоне, N . Утицај осталих зона се може урачунати помоћу Левдинове пертурбационе теорије (Löwdin, 1950; Löwdin, 1951). Најједноставнији модел се добија уколико је $N = 1$. Овај модел је заснован на једној зони и, сходно томе, назива се *једнозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел*. Са повећавањем броја N модел постаје тачнији и у литератури се могу пронаћи различити *вишезонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модели*: 6-зонски (Zitouni и сар., 2006), 8-зонски (Bahder, 1990), 10-зонски (Chakir и сар., 2017) и 14-зонски (Botha, 2012). Такође, користе се и знатно компликованији 30-зонски (Ћукарић и сар., 2013) и 40-зонски (Saïdi и сар., 2010) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модели који могу да опишу зонску структуру полупроводника у читавој Брилуеновој зони. Након формирања модела, дијагонализацијом својственог проблема који је представљен једначином (2.1.8), добијају се непознате енергије $E_n(\mathbf{k})$ и коефицијенти експанзије $a_n(\mathbf{k})$.

2.1.2 Једнозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел за проводну зону

Помоћу теорије пертурбација за недегенерисана стања (Rayleigh, 1877; Schrödinger, 1926) која је представљена у Прилогу 6, могуће је формирати $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел којим се описује проводна зона полупроводника који поседују сфалеритну кристалну решетку. Приликом развоја модела дефинишу се непертурбовани и пертурбативни хамилтонијани на следећи начин (Galergiu, 2005; Yu и Cardona, 2010):

$$H_0 = \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}), \quad (2.1.11)$$

$$H^p = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}. \quad (2.1.12)$$

На основу теорије пертурбација првог реда (видети Прилог 6) изрази за непознате $E_n(\mathbf{k})$ и $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ имају следећи облик (Yu и Cardona, 2010):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \langle u_{n,0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (2.1.13)$$

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,0}(\mathbf{r}) + \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m,0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle}{E_n(0) - E_m(0)} u_{m,0}(\mathbf{r}). \quad (2.1.14)$$

Код већине II-VI полупроводничких једињења $u_{n,0}(\mathbf{r})$ стања имају јасно дефинисану симетрију по одређеној координати. Момент \mathbf{p} мења парност функције $u_{n,0}(\mathbf{r})$, па самим тим и парност укупне подинтегралне функције матричног елемента која постаје непарна. То је веома значајно јер, управо због ове особине, за матричне елементе из једначине (2.1.13) важи $\langle u_{n,0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle \cong 0$ имајући у виду да се интеграција врши на симетричном домену. То није случај за матричне елементе из једначине (2.1.14) у којима је могуће преклапање различитих стања која не морају имати исту врсту симетрије. Пошто по теорији пертурбација првог реда не постоји корекција за енергију $E_n(\mathbf{k})$, израз за $E_n(\mathbf{k})$ је неопходно написати коришћењем теорије пертурбација другог реда (видети Прилог 6) (Rayleigh, 1877; Schrödinger, 1926):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{q \neq n} \frac{|\langle u_{q,0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}. \quad (2.1.15)$$

За разлику од теорије пертурбација првог реда, по којој је ефективна маса електрона у полупроводнику са сфалеритном кристалном решетком једнака маси слободног електрона, по теорији пертурбација другог реда за једнозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел израз за ефективну масу има следећи облик (Џукарић, 2015):

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{k^2 m_0^2} \sum_{q \neq n} \frac{|\langle u_{q,0}(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}. \quad (2.1.16)$$

Уколико се у Шредингерову једначину укључи и члан којим се моделује спин-орбитна интеракција, израз за енергију добија следећу форму (Galeriu, 2005):

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \left\langle u_{n,0}(\mathbf{r}) \left| \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \right) \right| u_{n,0}(\mathbf{r}) \right\rangle + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{q \neq n} \frac{\left| \left\langle u_{q,0}(\mathbf{r}) \left| \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \right) \right| u_{n,0}(\mathbf{r}) \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}. \quad (2.1.17)$$

Енергије добијене преко једнозонског $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела се обично израчунавају на основу експериментално одређене ефективне масе уместо рачунања матричних елемената пертурбације (Џукарић, 2015). Такође, аналитички модел је прецизан само за случај широкозонских полупроводника код којих није изражено *мешање зона* репрезентовано помоћу коефицијената експанзије у изразу (2.1.14) (Winkler, 2003; Galeriu, 2005; Џукарић, 2015). Ову теорију је могуће применити само за случај проводне зоне за коју су стања у центру Брилуенове зоне недегенерисана (Џукарић, 2015). У валентној зони у тачки $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ стања су дегенерисана и у том случају се користи *теорија пертурбација у присуству дегенерације* или, знатно чешће, Левдинова теорија пертурбација (Löwdin, 1951) која је објашњена у Прилогу 7.

2.1.3 Осмозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел

У овом одељку ће бити представљен модел којим се описује мешање 4 зоне од интереса (Bahder, 1990; Galeriu, 2005; Novik и сар., 2005; Sengupta и сар, 2013): 1) проводне зоне (скр. **CB-Conduction Band**), 2) зоне тешких шупљина (скр. **HH-Heavy Hole**), 3) зоне лакших шупљина (скр. **LH-Light Hole**) и 4) зоне отцепљене услед спин-орбитне интеракције (скр. **SO-Split-Off**). Утицај осталих зона се урачунава на основу Левдинове теорије пертурбација (Löwdin, 1951). Овај модел се користи за ускозонске полупроводнике са дијамантском или сфалеритном кристалном решетком (Galeriu, 2005; Џукарић, 2015). Пошто је у модел укључен спински степен слободе, базис се удвостручава. Добија се систем осам алгебарских једначина за случај масивног полупроводника или систем осам спрегнутих диференцијалних једначина када се моделују полупроводничке наноструктуре (Novik и сар., 2005).

Непозната Блохова функција $u_{n,\mathbf{k} \neq \mathbf{0}}(\mathbf{r})$ се развија преко познатих функција у центру Брилуенове зоне ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$) које поседују симетрију s, p_x, p_y, p_z орбитала (Galeriu, 2005):

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\eta'} a_{n,\eta',\uparrow}(\mathbf{k}) u_{\eta',\mathbf{0}}(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle + \sum_{\eta'} a_{n,\eta',\downarrow}(\mathbf{k}) u_{\eta',\mathbf{0}}(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle, \quad (2.1.18)$$

где је $(n = 1, \dots, 8) \wedge \eta' \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$, док су $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$ својствени спинори стања спин горе и спин доле, редом. У изразу (2.1.18) непозната таласна функција је развијена преко базисних функција које су својствене функције орбиталног момента \mathbf{L} и спина \mathbf{S} . Овакав базис се назива LS базис. Члан спин-орбитне интеракције пропорционалан са \mathbf{k} је мањи од члана спин-орбитне интеракције који је пропорционалан са \mathbf{p} и обично се занемарује (Čukarić, 2015):

$$\left(\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.19)$$

Наредни корак је раздвајање чланова хамилтонијана једначине (2.1.19) на део без спина и део са спином. Прво се посматра део без спина:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right) \sum_{\eta'} a_{n,\eta'}(\mathbf{k}) u_{\eta',\mathbf{0}}(\mathbf{r}) \\ &= \left(E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \sum_{\eta'} a_{n,\eta'}(\mathbf{k}) u_{\eta',\mathbf{0}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.1.20)$$

где је $(n = 1, \dots, 4) \wedge \eta' \in \{s, p_x, p_y, p_z\}$. Множењем једначине (2.1.20) са леве стране чланом $u_{\eta',\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ и интеграцијом по просторном домену формира се следећи хамилтонијан (Galeriu, 2005):

$$H_I(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} E_c(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & \frac{\hbar k_x}{m_0} P & \frac{\hbar k_y}{m_0} P & \frac{\hbar k_z}{m_0} P \\ \frac{\hbar k_x}{m_0} P^* & E_v(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\ \frac{\hbar k_y}{m_0} P^* & 0 & E_v(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\ \frac{\hbar k_z}{m_0} P^* & 0 & 0 & E_v(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \end{bmatrix}, \quad (2.1.21)$$

где су искоришћене особине:

$$\langle u_{s,\mathbf{0}} | p_i | u_{p_j,\mathbf{0}} \rangle = P \delta_{i,j}, \quad (2.1.22)$$

$$\langle u_{p_k,\mathbf{0}} | p_i | u_{p_j,\mathbf{0}} \rangle = 0, \quad (2.1.23)$$

као и чињеница да, услед особине симетрије, ненулни матрични елементи имају исте вредности. Овај хамилтонијан ће бити искоришћен за конструкцију осмозонског модела. Пре тога, потребно је размотрити члан који се односи на спин-орбитну интеракцију из једначине (2.1.19) (Winkler, 2003; Galeriu, 2005):

$$H_{SO} \approx \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V_0 \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.1.24)$$

Овај члан се у оквиру теорије пертурбација у присуству дегенерације третира као пертурбација првог реда. Матрични елементи за H_{SO} у оквиру поправки првог реда се могу поједноставити коришћењем особине да је $\nabla V_0 \times \mathbf{p}$ аксијални вектор или тзв. псевдовектор (Galeriu, 2005). Базис стања за рачун матричних елемената се формира од Блохових функција које воде порекло од p орбитала:

$$u_{p_x,0}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, u_{p_y,0}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, u_{p_z,0}(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, u_{p_x,0}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle, u_{p_y,0}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle, u_{p_z,0}(\mathbf{r})|\downarrow\rangle.$$

Моделовањем спин-орбитне интеракције долази до појаве новог параметра Δ који се дефинише путем матричних елемената (Galeriu, 2005; Ćukarić, 2015):

$$\begin{aligned} \left\langle u_{p_x,0} \left| \frac{\partial V_0}{\partial x} p_y - \frac{\partial V_0}{\partial y} p_x \right| u_{p_y,0} \right\rangle &= \left\langle u_{p_y,0} \left| \frac{\partial V_0}{\partial y} p_z - \frac{\partial V_0}{\partial z} p_y \right| u_{p_z,0} \right\rangle = \left\langle u_{p_z,0} \left| \frac{\partial V_0}{\partial z} p_x - \frac{\partial V_0}{\partial x} p_z \right| u_{p_x,0} \right\rangle \\ &= \Delta \frac{4m_0^2 c^2}{i3\hbar}. \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

За компоненте вектора Паулијевих матрица $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ дате у форми:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (2.1.26)$$

коришћењем особина симетрије између функција које воде порекло од s и p орбитала добија се следећа матрица спин-орбитне интеракције за осмозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел (Galeriu, 2005):

$$H_{II} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & i & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \frac{\Delta}{i3}. \quad (2.1.27)$$

Када су дефинисани хамилтонијани H_I и H_{II} , лако се добија укупни хамилтонијан осмозонског модела који се може написати у облику:

$$H^{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} H_I(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H_I(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + H_{II}. \quad (2.1.28)$$

Уколико се помоћу Левдинове теорије пертурбација (Löwdin, 1951) укључи и утицај удаљених зона, тада долази до модификације једначине (2.1.28) (Galeriu, 2005):

$$H^{8 \times 8}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} H_I(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H_I(\mathbf{k}) \end{bmatrix} + H_{II} + \begin{bmatrix} H_{LP}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H_{LP}(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (2.1.29)$$

где је $H_{LP}(\mathbf{k})$ ренормализовани део $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ члана у којем фигуришу параметри из Дрезелхаус-Кип-Кителовог хамилтонијана (енгл. *Dresselhaus, Kip, Kittel*) (Dresselhaus и сар., 1955):

$$H_{LP}(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} Ak^2 & Bk_y k_z & Bk_x k_z & Bk_x k_y \\ Bk_y k_z & Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Bk_x k_z & Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) & Nk_y k_z \\ Bk_x k_y & Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}. \quad (2.1.30)$$

Коришћењем особина симетрије базисних функција, које воде порекло од s и p орбитала, лако се долази до израза за параметре из једначине (2.1.30) (Dresselhaus и сар., 1955; Galeriu, 2005):

$$A = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \neq s, p_x, p_y, p_z} \frac{\langle u_{s,0} | p_x | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_x | u_{s,0} \rangle}{E_c(\mathbf{0}) - E_n}, \quad (2.1.31)$$

$$B = \frac{2\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \neq s, p_x, p_y, p_z} \frac{\langle u_{s,0} | p_x | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_y | u_{z,0} \rangle}{(E_c(\mathbf{0}) + E_v(\mathbf{0}))/2 - E_n}, \quad (2.1.32)$$

$$L = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \neq s, p_x, p_y, p_z} \frac{\langle u_{p_x,0} | p_x | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_x | u_{p_x,0} \rangle}{E_v(\mathbf{0}) - E_n}, \quad (2.1.33)$$

$$M = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \neq s, p_x, p_y, p_z} \frac{\langle u_{p_x,0} | p_y | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_y | u_{p_x,0} \rangle}{E_v(\mathbf{0}) - E_n}, \quad (2.1.34)$$

$$N = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta \neq s, p_x, p_y, p_z} \frac{\langle u_{p_z,0} | p_z | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_x | u_{p_x,0} \rangle + \langle u_{p_z,0} | p_x | u_{\beta,0} \rangle \langle u_{\beta,0} | p_z | u_{p_x,0} \rangle}{E_v(\mathbf{0}) - E_n}. \quad (2.1.35)$$

HgTe се одликује израженом непараболичношћу зона. Дисперзиона релација за електроне примарно зависи од вандијагоналних $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ чланова који спрежу најнижу проводну зону (Γ_6) и две највише валентне зоне (Γ_7 , Γ_8). Ови чланови су пропорционални Кејновом матричном елементу P и поседују сферну симетрију. Они не доприносе анизотропији, али утичу на непараболичност дисперзионе релације за електроне (Winkler, 2003). За опис спрезања између Γ_6 , Γ_7 и Γ_8 зона, изабране су уобичајене базисне функције (Kane, 1957):

$$u_1 = |\Gamma_6, +1/2\rangle = S \uparrow, \quad (2.1.36a)$$

$$u_2 = |\Gamma_6, -1/2\rangle = S \downarrow, \quad (2.1.36б)$$

$$u_3 = |\Gamma_8, +3/2\rangle = (1/\sqrt{2})(X + iY) \uparrow, \quad (2.1.36в)$$

$$u_4 = |\Gamma_8, +1/2\rangle = (1/\sqrt{6})[(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow], \quad (2.1.36г)$$

$$u_5 = |\Gamma_8, -1/2\rangle = -(1/\sqrt{6})[(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow], \quad (2.1.36д)$$

$$u_6 = |\Gamma_8, -3/2\rangle = -(1/\sqrt{2})(X - iY) \downarrow, \quad (2.1.36ђ)$$

$$u_7 = |\Gamma_7, +1/2\rangle = (1/\sqrt{3})[(X + iY) \downarrow + Z \uparrow], \quad (2.1.36е)$$

$$u_8 = |\Gamma_7, -1/2\rangle = (1/\sqrt{3})[(X - iY) \uparrow - Z \downarrow]. \quad (2.1.36ж)$$

Комбинацијом ових осам функција се формирају различите зоне. Кејнов осмозонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ хамилтонијан има следећи облик (Novik и сар., 2005):

$$H(\mathbf{k}) = \begin{bmatrix} T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{6}}Pk_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_- \\ 0 & T & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}Pk_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z & \frac{1}{\sqrt{2}}Pk_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}Pk_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}Pk_z \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}k_{-P} & 0 & U+V & -\bar{S}_- & R & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_- & -\sqrt{2}R \\ \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & -\frac{1}{\sqrt{6}}k_{-P} & -\bar{S}_-^\dagger & U-V & C & R & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_- \\ \frac{1}{\sqrt{6}}k_{+P} & \sqrt{\frac{2}{3}}k_zP & R^\dagger & C^\dagger & U-V & \bar{S}_+^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+ & -\sqrt{2}V \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}k_{+P} & 0 & R^\dagger & \bar{S}_+ & U+V & \sqrt{2}R^\dagger & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+ \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}k_zP & -\frac{1}{\sqrt{3}}k_{-P} & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_-^\dagger & \sqrt{2}V & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_+^\dagger & \sqrt{2}R & U-\Delta & C \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}k_{+P} & \frac{1}{\sqrt{3}}k_zP & -\sqrt{2}R^\dagger & -\sqrt{\frac{3}{2}}\tilde{S}_-^\dagger & -\sqrt{2}V & \frac{1}{\sqrt{2}}\bar{S}_+^\dagger & C^\dagger & U-\Delta \end{bmatrix}, \quad (2.1.37)$$

где је:

$$T = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} [(2F+1)k_{\parallel}^2 + k_z(2F+1)k_z], \quad (2.1.38a)$$

$$U = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 k_{\parallel}^2 + k_z \gamma_1 k_z), \quad (2.1.38б)$$

$$V = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_2 k_{\parallel}^2 - 2k_z \gamma_2 k_z), \quad (2.1.38в)$$

$$R = -\frac{\hbar^2}{2m_0} (\sqrt{3}\mu k_+^2 - \sqrt{3}\bar{\gamma} k_-^2), \quad (2.1.38г)$$

$$\bar{S}_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_{\pm} (\{\gamma_3, k_z\} + [\kappa, k_z]), \quad (2.1.38д)$$

$$\tilde{S}_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_{\pm} \left(\{\gamma_3, k_z\} - \frac{1}{3} [\kappa, k_z] \right), \quad (2.1.38ђ)$$

$$C = \frac{\hbar^2}{m_0} k_- [\kappa, k_z], \quad (2.1.38е)$$

$$k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2.1.38ж)$$

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad (2.1.38з)$$

$$k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.1.38и)$$

У једначинама (2.1.38) k_x и k_y су добри квантни бројеви, док је k_z оператор. γ_1 , γ_2 и γ_3 су Латинцерови параметри, κ и F описују спрезање удаљених зона, а $\bar{\gamma}$ и μ се дефинишу преко Латинцерових параметара $\bar{\gamma} = (\gamma_3 + \gamma_2)/2$ и $\mu = (\gamma_3 - \gamma_2)/2$. У аксијалној апроксимацији важи $\mu = 0$. $[A, B] = AB - BA$ је ознака за уобичајени комутатор оператора, док је $\{A, B\} = AB + BA$ антикомутатор оператора A и B . Вредности коришћених параметара за CdTe и HgTe на температури $T = 0$ К су приказане у Прилогу 1.

2.1.4 Моделовање електронских и шупљинских стања у магнетском пољу

У овом одељку ће бити приказано како се моделује утицај магнетског поља \mathbf{B} на наноструктуру у оквиру $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела за структуру типа квантне јаме. Магнетско поље примењено нормално на површ у којој се формира дводимезиони електронски гас, \mathbf{B}_\perp , нема исто дејство као паралелно магнетско поље, \mathbf{B}_\parallel . Применом \mathbf{B}_\perp на квантне јаме долази до интензивних промена у њиховим електронским особинама, које се манифестују у виду пуне квантизације кретања носиоца наелектрисања у Ландауове нивое (Winkler, 2003). За моделовање магнетског поља могуће је применити два приступа, са или без коришћења аксијалне апроксимације (Novik и сар., 2005). За случај $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ асиметричне двоструке квантне јаме са [001] правцем нарастања оба приступа пружају сличне резултате (Novik и сар., 2005). Размотрен је само утицај нормалног магнетског поља, при чему није коришћена аксијална апроксимација. Генерални приступ у моделовању утицаја магнетског поља \mathbf{B} у оквиру вишезонске теорије је увођење Пајерлсове замене којом се канонски момент \mathbf{p} замењује са кинетичким моментом $\mathbf{\Pi}$ (Čukarić, 2015):

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{\Pi} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}, \quad (2.1.39)$$

где је \mathbf{A} магнетски вектор потенцијал, а e елементарно наелектрисање. Магнетски вектор потенцијал мора да задовољи једначину:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (2.1.40)$$

Због тога је потребно пронаћи адекватан облик за \mathbf{A} . Из тог разлога се обично користе симетрична калибрација $\mathbf{A} = B/2 \cdot (-y, x, 0)$ (Winkler, 2003) или Ландауова калибрација $\mathbf{A} = B \cdot (0, x, 0)$ (Krishtopenko и сар., 2016B) за нормално магнетско поље. Кинетички момент $\mathbf{\Pi}$ мора да задовољи следеће комутационе релације које сугеришу постојање калибрационе инваријантности (Winkler, 2003; Novik и сар., 2005):

$$[\mathbf{\Pi}, \mathbf{\Pi}] = -e\hbar B, \quad (2.1.41)$$

$$[\Pi_i, \Pi_j] = 0, \quad (2.1.42)$$

где је $i, j \in \{x, y, z\}$. У присуству магнетског поља оператори анихилације и креације су (Winkler, 2003):

$$a = \frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x - i\Pi_y), \quad (2.1.43)$$

$$a^\dagger = \frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x + i\Pi_y), \quad (2.1.44)$$

где је магнетска дужина дефинисана са

$$l_c = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (2.1.45)$$

Оператори анихилације и креације се могу написати и на следећи начин:

$$a = \frac{l_c}{\sqrt{2}} k_-, \quad (2.1.46)$$

$$a^\dagger = \frac{l_c}{\sqrt{2}\hbar} k_+, \quad (2.1.47)$$

где су k_+ и k_- дати у (2.1.38з). Они делују на хармонијске осцилаторне функције ζ_n (Novik и сар., 2005) за које важе следеће релације:

$$a\zeta_n = \sqrt{n}\zeta_{n-1}, \quad (2.1.48)$$

$$a^\dagger\zeta_n = \sqrt{n+1}\zeta_{n+1}, \quad (2.1.49)$$

$$aa^\dagger\zeta_n = n\zeta_n. \quad (2.1.50)$$

У претходним једначинама $n = 0, 1, \dots$ су својствене вредности оператора aa^\dagger . У присуству магнетског поља долази и до појаве Земановог (хол. *Zeeman*) ефекта (Zeeman, 1897). Овај ефекат се не може моделовати помоћу конвенционалне Шредингерове једначине. Уместо тога, потребно је користити Диракову једначину из које се може видети да, услед овог ефекта, долази до цепања стања различитог спина. Спинско цепање је описано чланом $\mu_B g \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$, где је μ_B Боров (дан. *Bohr*) магнетон, $\boldsymbol{\sigma}$ вектор Паулијевих матрица, док је $g \approx 2$ Ландеов (нем. *Landé*) фактор (Sakurai, 1994). У присуству нормалног магнетског поља хамилтонијан $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела поприма следећи облик (Winkler, 2003; Ćukarić, 2015):

$$\left(\frac{(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot \mathbf{k} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A}) + \mu_B \frac{g}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.1.51)$$

Земанов ефекат се укључује додавањем члана H^Z матрици (2.1.37). Овај члан је такође матрица реда 8×8 и има следећу форму (Novik и сар., 2005):

$$H^Z = \hbar \frac{eB}{m_0} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3}{2}\kappa & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2}\kappa & 0 & 0 & -\frac{\kappa+1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}\kappa & 0 & 0 & -\frac{\kappa+1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3}{2}\kappa & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\kappa+1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\left(\kappa + \frac{1}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\kappa+1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \kappa + \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad (2.1.52)$$

где је κ четврти Латинџеров (енгл. *Luttinger*) параметар (Lawaetz, 1971) који ће детаљније бити представљен у трећој глави.

2.1.5 Моделовање напрезања

Напрезање може бити вештачки индуковано или се јавља услед неусаглашености параметара решетке различитих материјала у хетероструктурама. Неусаглашеност доводи до деформације кристалне решетке у близини споја што може да доведе до значајних промена у електронским својствима напругнуте структуре. У овом одељку ће бити објашњено како се напрезање у квантним јамама може укључити у вишезонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел. Напрезање се обично моделује у оквиру Бир-Пикусовог формализма (Bir и Pikus, 1974) тако што се модификује хамилтонијан (2.1.37). Први корак у формирању модела напрезања је прорачун расподеле напрезања у структури која се може одредити коришћењем континуално-механичких (Davies, 1998) или атомистичких модела (Keating, 1966).

Примена напрезања смањује симетрију непертурбованог кристалног потенцијала $V_0(\mathbf{r})$ (Winkler, 2003). Уколико је неусаглашеност константи решетке између слоја јаме a_w и баријерног материјала a_b незнатна, тј. уколико је релативна разлика у параметрима решетке

$$\varepsilon_0 = \frac{a_w - a_b}{a_b}, \quad (2.1.53)$$

реда неколико процената, тада су компоненте тензора напрезања дате следећом релацијом (Arsoski, 2013):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right]. \quad (2.1.54)$$

Овде, r_i представљају компоненте вектора положаја \mathbf{r} , u_i су компоненте вектора помераја \mathbf{u} , док се индекси i, j односе на x, y, z координате. Приликом деформације материјала све његове тачке се померају и уводи се „деформисани“ координатни систем који се дефинише на следећи начин (Bahder, 1990):

$$r_i' = \sum_j (\delta_{ij} - \varepsilon_{ij}) r_j. \quad (2.1.55)$$

Овом заменом потенцијал деформисаног кристала $V_D[(1 + \varepsilon)\mathbf{r}]$, има исту периодичност као непертурбовани потенцијал $V_0(\mathbf{r})$. Овај потенцијал се може развити у ред по ε (Bahder, 1990; Winkler, 2003):

$$V_D[(1 + \varepsilon)\mathbf{r}] = V_0(\mathbf{r}) + \sum_{ij} \varepsilon_{ij} V_{ij}(\mathbf{r}) + \dots, \quad (2.1.56)$$

где је

$$V_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2 - \delta_{ij}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{V_D[(1 + \varepsilon)\mathbf{r}] - V_0(\mathbf{r})}{\varepsilon_{ij}}. \quad (2.1.57)$$

У присуству напрезања у оквиру хамилтонијана $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела долази до појаве нових чланова од којих су најважнији представљени следећом једначином (Bahder, 1990):

$$D_{ij}^{\eta\eta'\sigma\sigma'} = \left\langle \eta, \sigma \left| -\frac{p_i p_j}{m_0} + V_{ij} \right| \eta', \sigma' \right\rangle. \quad (2.1.58)$$

Ови чланови се називају *деформациони потенцијали* и пропорционални су са тензором ε . Чланови напрезања у осмозонском $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ хамилтонијану укључују хидростатичке C и a , и униаксијалне b и d деформационе потенцијале (Novik и сар., 2005). Поред тога као чланови у хамилтонијану фигуришу и компоненте тензора ε_{ij} . Може се показати да се за Бир-Пикусов хамилтонијан, H_{BP} , добија исти израз као када се у хамилтонијану $H(\mathbf{k})$ направи смена (Novik и сар., 2005; Arsoski, 2013; Ćukarić, 2015):

$$k_i k_j \rightarrow \varepsilon_{ij}, \quad (2.1.59)$$

док се чланови у којима фигуришу Латинцерови параметри модификују преко деформационих потенцијала за хидростатичко и униаксијално напрезање. У осмозонском моделу, услед спрезања Γ_6 , Γ_8 и Γ_7 зона, долази до појаве нових матричних елемената који су пропорционални Кејновом матричном елементу. Они се занемарују зато што имају малу вредност (Novik и сар., 2005). Бир-Пикусов хамилтонијан за квантне јаме са [001] правцем нарастања има следећи облик (Novik и сар., 2005):

$$H_{BP} = \begin{bmatrix} T_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & T_\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_\varepsilon + V_\varepsilon & S_\varepsilon & R_\varepsilon & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\varepsilon & -\sqrt{2}R_\varepsilon \\ 0 & 0 & S_\varepsilon^\dagger & U_\varepsilon - V_\varepsilon & 0 & R_\varepsilon & \sqrt{2}V_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\varepsilon \\ 0 & 0 & R_\varepsilon^\dagger & 0 & U_\varepsilon - V_\varepsilon & -S_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\varepsilon^\dagger & -\sqrt{2}V_\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & R_\varepsilon^\dagger & -S_\varepsilon^\dagger & U_\varepsilon + V_\varepsilon & \sqrt{2}R_\varepsilon^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\varepsilon^\dagger \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\varepsilon^\dagger & \sqrt{2}V_\varepsilon & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\varepsilon & \sqrt{2}R_\varepsilon & U_\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{2}R_\varepsilon^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S_\varepsilon^\dagger & -\sqrt{2}V_\varepsilon & -\frac{1}{\sqrt{2}}S_\varepsilon & 0 & U_\varepsilon \end{bmatrix}, \quad (2.1.60)$$

где је

$$T_\varepsilon = \text{Ctr}(\varepsilon), \quad (2.1.61)$$

$$U_\varepsilon = \text{atr}(\varepsilon), \quad (2.1.62)$$

$$V_\varepsilon = \frac{1}{2}b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}), \quad (2.1.63)$$

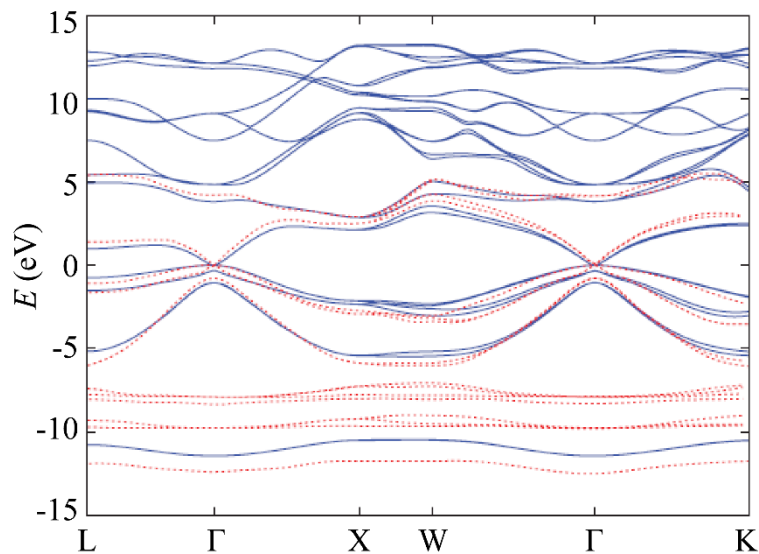
$$S_\varepsilon = -d(\varepsilon_{xz} - i\varepsilon_{yz}), \quad (2.1.64)$$

$$R_\varepsilon = -\frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) + id\varepsilon_{xy}. \quad (2.1.65)$$

Овде је $\text{tr}(\varepsilon) = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ траг тензора напрезања ε .

2.2 Метод јаке везе

За разлику од стандарних вишезонских $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела, помоћу метода јаке везе је могуће довољно добро описати зонску структуру HgTe у читавој Брилуеновој зони. Метод јаке везе за чврста тела је први развио немачки физичар Феликс Блох 1929. године (Bloch, 1929). Овај метод је пружао тачан опис енергетских зона у полупроводнику и омогућавао је опис зонске структуре не само у тачкама високе симетрије, већ у произвољној тачки у реципрочном простору. Слејтер и Костер су 1954. године схватили да је Блохов приступ непрактичан јер је готово немогуће решити велики број интеграла преклапања између атомских орбитала. Они су предложили алтернативу у којој се Блохов метод јаке везе не би користио као примарни метод израчунавања зонске структуре чврстог тела, већ као врста интерполационог метода (Slater и Koster, 1954). Предлог који су дали Слејтер и Костер је укључивао низ апроксимација које су требале да поједноставе коришћење метода.



Слика 2.1. Зонска структура масивног HgTe на температури од 0 K. Плавим линијама су представљени резултати добијени помоћу емпиријског метода јаке везе, док су црвеним тачкама приказани резултати GW модела (адаптирано из референце Allan и Delerue, 2012).

Без обзира на приступ који се користи, приликом развоја модела јаке везе полази се од скупа атомских орбитала (Harrison, 1989). Обично се користе неке од следећих орбитала: $|s\rangle$, $|p_x\rangle$, $|p_y\rangle$, $|p_z\rangle$, $|d_{xy}\rangle$, $|d_{zx}\rangle$, $|d_{yz}\rangle$, $|d_{x^2-y^2}\rangle$ и $|d_{3z^2-r^2}\rangle$ (Allan и Delerue, 2012). Број и врсте атомских орбитала које ће бити укључене у модел зависе од елемената који сачињавају кристал и облика *јединичне ћелије*, тј. од особина симетрије полупроводника чија се електронска структура одређује. Атомске орбитале позициониране на атомима јединичне ћелије не формирају ортогонални базисни скуп. Због тога је неопходно дефинисати нове атомске орбитале као линеарну комбинацију оригиналних атомских орбитала за које су Блохове суме нормиране и ортогоналне (Slater и Koster, 1954). У методу јаке везе се често праве додатне апроксимације које поједностављују рачун (Finnis, 2003):

- претпоставка да су троцентарски интегрални занемарљиви у поређењу са двоцентарским интегралима,
- занемаривање међуатомских Кулонових (франц. *de Coulomb*) интеракција и
- занемаривање трансфера наелектрисања.

У докторској дисертацији је коришћен емпиријски метод јаке везе у којем је извршена параметризација двоцентарских интеграла. Хамилтонијан модела је представљен као

функција параметара који су добијени у процедури „фитовања“ на две референтне зонске структуре (Allan и Delerue, 2012):

- у Г тачки на зонску структуру која је добијена помоћу $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ метода,
- у остатку Брилуенове зоне на зонску структуру која је добијена у GW апроксимацији.

GW апроксимација представља методу одређивања енергија квазичестица у полупроводницима и изолаторима на основу првих принципа. У GW апроксимацији се врши експанзија оператора енергије преко динамички екранизоване Кулонове интеракције W и Гринове (енгл. *Green*) функције једночестичних стања G (Hybertsen и Louie, 1986), што у првој апроксимацији даје корекцију сразмерну производу GW. На сл. 2.1 је дато поређење зонске структуре масивног HgTe која је добијена помоћу емпиријског метода јаке везе са хибридном GW рачуном (Svane и сар., 2011; Allan и Delerue, 2012). Резултати добијени помоћу метода јаке везе су представљени плавом линијом, док црвена тачкаста линија представља резултате добијене помоћу GW модела. Са слике се може видети да постоји добро слагање између посматраних модела. Предност емпиријског метода јаке везе је у томе што се параметризовањем (фитовањем) интеграла преклапања атомских орбитала на тачније методе (GW хибридни метод) постиже уштеда рачунарских ресурса и повећава брзина извршавања. На основу формализма метода јаке везе могуће је израчунати густину електронских стања (Sapra и сар., 2002; Farjam и Rafii-Tabar, 2009), оптичка (Pороv и Henrard, 2004; Magorrian и сар., 2016) и транспортна својства (Klimeck и сар., 2000; Hancock и сар., 2010) моделованог система.

У овој секцији је уз помоћ анализе електронске структуре изолованог атома (видети Прилог 8) и двоатомског молекула (видети Прилог 9), представљена математичка формулација модела јаке везе за полупроводнике са сфалеритном кристалном структуром. Такође, овде је објашњена двоцентарска апроксимација и начин моделовања ефеката спин-орбитне интеракције у моделу јаке везе.

2.2.1 Формулација метода јаке везе у чврстим телима

У овом одељку ће бити представљен формализам метода јаке везе који се користи за моделовање електронских особина полупроводничких кристала. Помоћу метода јаке везе су формиран једночестични хамилтонијани у структурама типа HgTe квантне тачке и квантног прстена, на основу којих су одређене једночестичне таласне функције и енергије. Постоје два приступа у одређивању вредности матричних елемената различитих орбитала у оквиру овог метода: 1) на основу првих принципа или *ab initio* рачуна (Matthew и сар., 1989; Lewis и сар., 2001) и 2) параметризацијом која у значајној мери редукује време извршавања програма и експлоатацију рачунарских ресурса (Slater и Koster, 1954; Jancu и сар., 1998). У докторској дисертацији је коришћен приступ параметризације двоцентарских интеграла. Двоцентарски интеграл се прво параметризује за случај масивног (балковског) HgTe материјала, а ове исте параметре је могуће применити и на HgTe структуре са нарушеном транслационом симетријом, као што су квантне тачке (Allan и Delerue, 2012). Развој модела за периодични кристал који се састоји од више атома започиње анализом изолованог атома на положају \mathbf{R}_n . Шредингерова једначина за изоловани атом се може написати на следећи начин (Slater и Koster, 1954):

$$H^A |\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle = \left(\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{R}_n, a) \right) |\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle = E_{(a,o)}^A |\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle, \quad (2.2.1)$$

где је m_0 -маса слободног електрона, $V(\mathbf{R}_n, a)$ -потенцијал атома a на позицији \mathbf{R}_n , $|\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle$ -таласне функције (атомске орбитале) које формирају базис за експанзију непознате таласне функције у кристалу и $E_{(a,o)}^A$ -одговарајућа енергија. У општем случају

атоми могу бити различите врсте и могу имати већи број орбитала које су означене са o . Пошто се посматра и спински степен слободе, вредности спина се разликују помоћу индекса σ . У сложенијем систему са већим бројем атома, као што је полупроводнички кристал, једноелектронски хамилтонијан се може написати помоћу атомског хамилтонијана H^A (Goldmann, 2014):

$$H^K = H^A(\mathbf{R}_m, a) + \sum_{l \neq m, a'} V(\mathbf{R}_l, a'). \quad (2.2.2)$$

Овде је сумарно урачунат допринос потенцијала услед Кулонове интеракције свих атома a' у структури са посматраним атомом a . Применом Блохове теореме (Bloch, 1929), Шредингерова једначина се може написати у следећем облику:

$$H^K \sum_n \sum_{a, o, \sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} u_{a, o, \sigma}(\mathbf{k}) |\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle = E(\mathbf{k}) \sum_n \sum_{a, o, \sigma} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} u_{a, o, \sigma}(\mathbf{k}) |\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle, \quad (2.2.3)$$

где је таласни вектор \mathbf{k} ограничен на прву Брилуенову зону услед периодичног распореда атома у кристалу. Множењем једначине (2.2.3) са леве стране функцијом $\langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' |$, добија се матрична једначина која представља генерализовани својствени проблем који се посебно решава за сваку вредност \mathbf{k} (Slater и Koster, 1954; Jancu и сар., 1998):

$$\sum_{a, o, \sigma} H_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}^K(\mathbf{k}) u_{a, o, \sigma}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) \sum_{a, o, \sigma} M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k}) u_{a, o, \sigma}(\mathbf{k}). \quad (2.2.4)$$

У једначини (2.2.4) матрични елементи преклапања $M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k})$ између орбитала $|\mathbf{R}_m, a', o', \sigma'\rangle$ и $|\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle$ имају следећи облик (Goldmann, 2014):

$$M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k}) = \sum_{n, m} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle. \quad (2.2.5)$$

У идеалном случају, када би атомске орбитале $|\mathbf{R}_n, a, o, \sigma\rangle$ које формирају базис биле ортогоналне, матрица (2.2.5) би била јединична матрица. Пошто је једна од основних претпоставки у моделу да су електрони јако везани за своје атоме, може се закључити да су вредности матричних елемената $M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k})$ између удаљених атома веома мале (Slater и Koster, 1954). У случају када је матрица $M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k})$ ермитска, на основу полазног базиса атомских орбитала за које не важи особина ортогоналности, доказано је да се коришћењем Левдинове трансформације (Löwdin, 1950; Löwdin, 1951) може конструисати базис ортогоналних атомских орбитала за који важи (Goldmann, 2014):

$$M_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}(\mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n} \delta_{a, a'} \delta_{o, o'} \delta_{\sigma, \sigma'}. \quad (2.2.6)$$

Уколико је испуњен услов (2.2.6), једначина (2.2.4) добија једноставнији облик:

$$\sum_{a, o, \sigma} H_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}^K(\mathbf{k}) u_{a, o, \sigma}(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) u_{a', o', \sigma'}(\mathbf{k}). \quad (2.2.7)$$

У једначини (2.2.7) фигуришу матрични елементи $H_{a, o, \sigma, a', o', \sigma'}^K(\mathbf{k})$:

$$H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^K(\mathbf{k}) = \sum_{n,m} e^{ik(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)} \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | H^K | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle, \quad (2.2.8)$$

који се могу одредити на основу првих принципа, ако су познати облици атомских потенцијала (Matthew и сар., 1989). $H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^K(\mathbf{k})$ се могу параметризовати, поређењем са експерименталним резултатима за сваки материјал посебно (Jancu и сар., 1998). Уколико су вредности матричних елемената $H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^K(\mathbf{k})$ добијене на основу експеримената, тада се моделовање електронске структуре врши помоћу емпиријског метода јаке везе. У изразу (2.2.8) разликују се два посебна случаја: 1) $\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_n$ и 2) $\mathbf{R}_m \neq \mathbf{R}_n$. Када је $\mathbf{R}_m = \mathbf{R}_n$, матрични елемент $H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^K(\mathbf{k})$ представља тзв. „on-site” енергије атомских орбитала које се према Слејтер-Костеровој нотацији означавају (Slater и Koster, 1954):

$$H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^{K,on-site}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | H^K | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle \delta_{\mathbf{R}_m, \mathbf{R}_n} \delta_{a,a'} \delta_{o,o'} \delta_{\sigma,\sigma'} = E_{a,o}. \quad (2.2.9)$$

Слејтер и Костер су у ознаци за „on-site” енергије $E_{a,o}$ изоставили индекс σ зато што енергије атомских орбитала не зависе од спинског степена слободe. Када је $\mathbf{R}_m \neq \mathbf{R}_n$, матрични елемент $H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^K(\mathbf{k})$ представља интеракције између орбитала различитих атома. Ове интеракције представљају вероватноћу скока (прелаза) електрона са атома a' на позицији \mathbf{R}_m , из орбитале o' са спином σ' , на атом a који се налази на позицији \mathbf{R}_n у орбиталу o са спином σ . Према Слејтер-Костеровој нотацији ови матрични елементи имају следећу ознаку (Slater и Koster, 1954):

$$H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^{K,hopping}(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | H^K | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle \delta_{\sigma,\sigma'} = V(\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n)_{a,a',o,o'}. \quad (2.2.10)$$

За случај када је $\mathbf{R}_m \neq \mathbf{R}_n$, вредности матричних елемената опадају са повећавањем растојања $|\mathbf{t}|$ између атома, где је $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n$. Матрични елементи за које је \mathbf{t} велико се често у оквиру модела не израчунавају (Goldmann, 2014). То се ради да би се убрзала процедура нумеричког решавања модела. За велики број кристала задовољавајућа тачност се може добити уз апроксимацију по којој се $H_{a,o,\sigma,a',o',\sigma'}^{K,hopping}(\mathbf{k})$ одређују само за суседне атоме. Оваква апроксимација се у методу јаке везе назива апроксимацијом скокова на најближег суседа (скр. *NN*, енгл. *Nearest Neighbour*) и она је коришћена у дисертацији за случај HgTe (Allan и Delerue, 2012). У дисертацији је коришћен $sp^3d^5s^*$ базисни скуп атомских орбитала. Овде је s^* вештачки уведена орбитала како би се анализирао и утицај енергетски виших орбитала (Allan и Delerue, 2012).

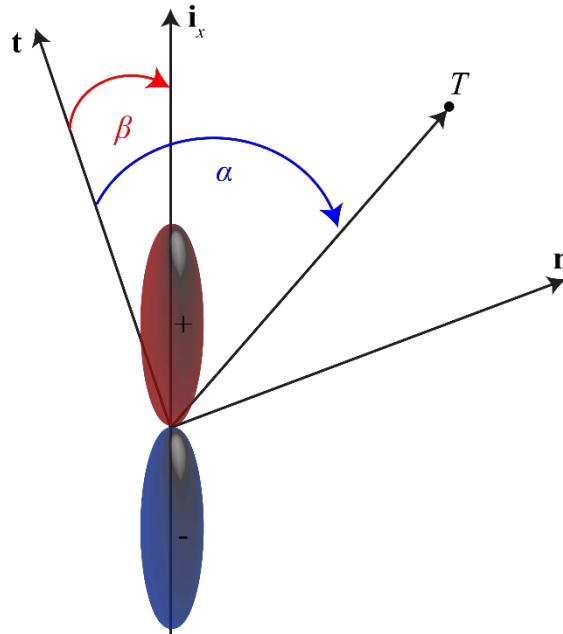
2.2.2 Слејтер-Костерова двоцентарска апроксимација

У емпиријском моделу јаке везе двоцентарском апроксимацијом се занемарује велики број матричних елемената између атомских орбитала (Slater и Koster, 1954). Главни циљ је додатна редукација модела како би се вредности произвољних константи релативно једноставно могле фитовати на експерименталне резултате. У оквиру ове апроксимације модел се поједностављује занемаривањем тзв. *троцентарских интеграла*. Главни разлог за њихово занемаривање је чињеница да су вредности троцентарских интеграла знатно мање у поређењу са вредностима *двоцентарских интеграла* (Slater и Koster, 1954). Да би се увела двоцентарска апроксимација у модел, потребно је детаљно анализирати орбитални део матричног елемента за H^K који има следећу форму (Goldmann, 2014):

$$\sum_{n,m} \sum_{a',o',\sigma'} \sum_{a,o,\sigma} \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | H^K | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle. \quad (2.2.11)$$

Из једначине (2.2.2) се види да се H^K састоји од атомског хамилтонијана H^A и суме помоћу које се моделују Кулонове интеракције атома у кристалу:

$$\sum_{l,a'} V(\mathbf{R}_l, a'). \quad (2.2.12)$$



Слика 2.2. Илустрација декомпозиције p_x орбитале на паралелну и антипаралелну компоненту у односу на вектор везе $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n$.

Када је $\mathbf{R}_m \neq \mathbf{R}_n \neq \mathbf{R}_l$, тада се интеграл у изразу (2.2.11) назива *троцентарски интеграл*. У суштини двоцентарске апроксимације се налази идеја да су скокови електрона са орбитале атома који је на позицији \mathbf{R}_m на орбиталу атома који се налази на месту \mathbf{R}_n само под утицајем потенцијала V та два атома, док се утицај осталих атома на скок може занемарити услед довољно велике просторне раздвојености (Slater и Koster, 1954). У двоцентарској апроксимацији се посматрају само случајеви када је $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_m$ или $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_n$. Тада (2.2.11) постаје *двоцентарски интеграл* који је веома сличан интегралу за двоатомски молекул H_2 описан у Прилогу 9. У двоцентарској апроксимацији потенцијали из H^K су симетрични у односу на правац $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n$ (Goldmann, 2014). Овај правац се посматра као оса у односу на коју је могуће извршити просторну квантизацију било које атомске орбитале (Slater и Koster, 1954) што ће у наставку бити детаљније објашњено. Уколико су атомске орбитале својствене функције оператора $\hat{L}_t = \mathbf{L} \frac{\mathbf{t}}{|\mathbf{t}|}$, и имају различите својствене вредности, тада су према двоцентарској апроксимацији њихови матрични елементи једнаки нули (Goldmann, 2014):

$$\hbar(m_{t'} - m_t) \langle \mathbf{R}_m, a', o', \sigma' | H^K | \mathbf{R}_n, a, o, \sigma \rangle = 0. \quad (2.2.13)$$

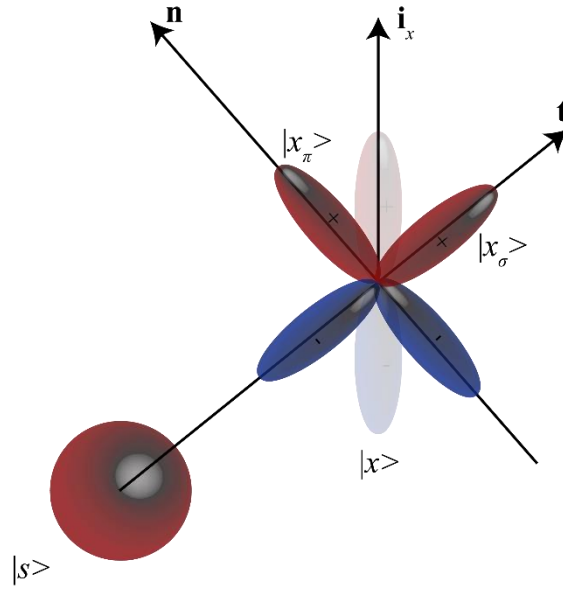
Нека су атомске орбитале у моделу представљене у Декартовом (франц. *Descartes*) координатном систему. Базисни скуп је формиран од једне s орбитале, p_x , p_y , p_z орбитала које се нотирају у скраћеном облику као функције x , y , z и од пет d орбитала које се означавају са xy , yz , zx , $x^2 - y^2$ и $3z^2 - r^2$. Свака орбитала из базиса се прво декомпоује на функцију која зависи од координате дуж осе паралелне вектору \mathbf{t} и од координата у равни нормалној на вектор \mathbf{t} . На пример, ако је потребно одредити вредност орбитале p_x (са

оријентацијом у правцу \mathbf{i}_x у некој тачки T која је позиционирана у простору под углом α у односу на \mathbf{t} (видети сл. 2.2), тада се може написати (Goldmann, 2014):

$$|x\rangle = \cos(\beta - \alpha) = \cos(\alpha) \mathbf{i}_x \mathbf{t} + \sin(\alpha) \mathbf{i}_x \mathbf{n} = |x_\sigma\rangle \mathbf{i}_x \mathbf{t} + |x_\pi\rangle \mathbf{i}_x \mathbf{n}, \quad (2.2.14)$$

где је \mathbf{n} јединични вектор који је нормалан на вектор \mathbf{t} . Компоненте орбитале $|x\rangle$ су својствене функције оператора \hat{L}_t са различитим својственим вредностима:

- $|x_\sigma\rangle: m_t = 0,$
- $|x_\pi\rangle: m_t = \pm 1.$



Слика 2.3. Хибридизација између s и p_x орбитале уз приказ декомпозиције p_x орбитале на $|x_\sigma\rangle$ и $|x_\pi\rangle$ компоненте.

Овде је важно напоменути да се индекс σ у изразу за компоненту $|x_\sigma\rangle$ не односи на спински степен слободe. Уколико је потребно одредити матрични елемент између s и x орбитале тада се може написати следеће (видети сл. 2.3) (Slater и Koster, 1954; Goldmann, 2014):

$$\langle s|H^K|x\rangle = \langle s|H^K|x_\sigma\rangle \mathbf{i}_x \mathbf{t} + \langle s|H^K|x_\pi\rangle \mathbf{i}_x \mathbf{n} = \langle s|H^K|x_\sigma\rangle \mathbf{i}_x \mathbf{t} + 0 = V_{sp\sigma}. \quad (2.2.15)$$

На основу једначине (2.2.13) се лако може закључити да је матрични елемент $\langle s|H^K|x_\pi\rangle = V_{sp\pi}$ једнак 0. Ради једноставнијег записа матричних елемената између различити орбитала, Слејтер и Костер су у свом раду увели дирекционе косинусе (l, m, n) дуж x , y и z осе, респективно:

$$\mathbf{t} = (l, m, n)|\mathbf{t}|. \quad (2.2.16)$$

На основу претходне анализе и једначине (2.2.16) лако се добијају следећи изрази:

$$\langle s|H^K|x\rangle = lV_{sp\sigma}, \quad (2.2.17)$$

$$\langle s|H^K|y\rangle = mV_{sp\sigma}, \quad (2.2.18)$$

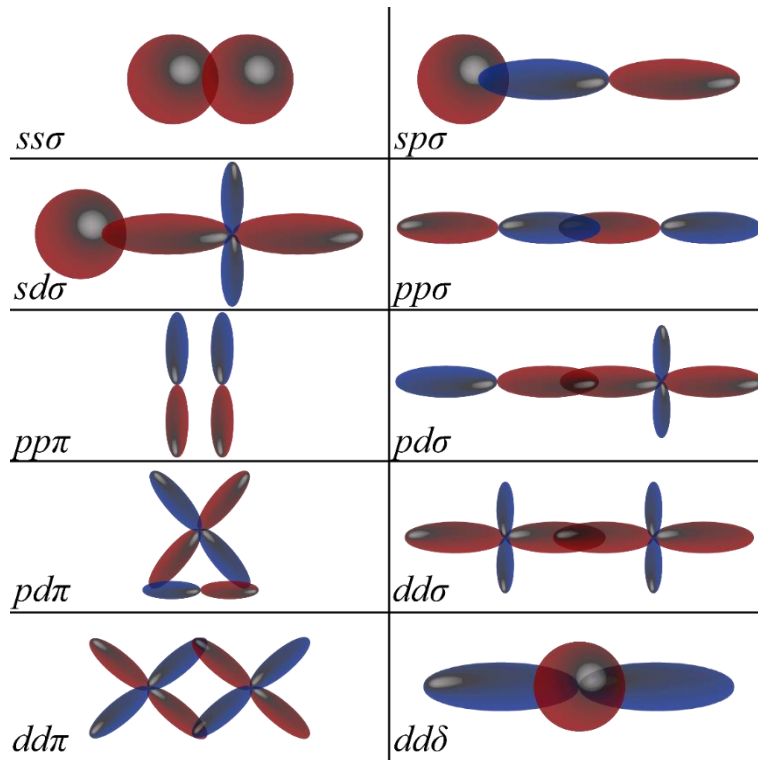
$$\langle s|H^K|z\rangle = nV_{sp\sigma}. \quad (2.2.19)$$

Уколико се спроведе слична анализа за матричне елементе између p орбитала, добија се (Goldmann, 2014):

$$\langle x|H^K|x\rangle = l^2V_{pp\sigma} + (1 - l^2)V_{pp\pi}, \quad (2.2.20)$$

$$\langle x|H^K|y\rangle = lmV_{pp\sigma} - lmV_{pp\pi}, \quad (2.2.21)$$

$$\langle x|H^K|z\rangle = lnV_{pp\sigma} - lnV_{pp\pi}. \quad (2.2.22)$$



Слика 2.4. Пример хибридизације између атомских орбитала представљене помоћу $sp^3d^5s^*$ базиса (адаптирано из референце Goldman, 2014).

Комплетан списак матричних елемената према Слејтер-Костеровој нотацији за $sp^3d^5s^*$ базисни скуп атомских орбитала коришћен за HgTe квантне тачке и прстенове је представљен у Прилогу 3. Важно је напоменути да измена индекса i и i' у $V_{ii'j}$ може да доведе до промене предзнака $V_{ii'j}$ само у случају када је сума две орбитале непарна функција (Slater и Koster, 1954). У супротном промена позиције индекса неће довести до промене предзнака $V_{ii'j}$. Такође, очигледно је да интеграл $V_{ii'j}$ зависе од растојања између атома (Slater и Koster, 1954). Треба имати у виду да ће се њихове вредности разликовати у случају када се скокови електрона апроксимирају само на најближег комшију у односу на случајеве када би се потенцијално разматрали и скокови на другог или трећег најближег суседа по реду.

2.2.3 Моделовање спин-орбитне интеракције

Моделовање спин-орбитне интеракције у оквиру формализма метода јаке везе се спроводи према процедури коју је предложио Чади (енгл. Chadi) 1977. године (Chadi, 1977). Увођење спинског степена слободе доводи до ефективног удвостручавања $sp^3d^5s^*$ базисног скупа. Поред тога, матрични елементи хамилтонијана који урачунавају спин-орбитну интеракцију се параметризују помоћу комплексних бројева што у значајној мери успорава процес дијагонализације приликом нумеричког решавања модела. Једноелектронски

хамилтонијан за полупроводнички кристал у којем су изражени ефекти спин-орбитне интеракције се може представити следећом једначином:

$$H = H^K + H^{SO}, \quad (2.2.23)$$

где је H^K -хамилтонијан чији је облик дефинисан у одељку 2.2.1, док је H^{SO} -хамилтонијан спин-орбитне интеракције (Chadi, 1977; Winkler, 2003).

Чади је у свом раду показао да се ефекти спин-орбитног цепања код већине полупроводника са дијамантском и сфалеритном кристалном решетком успешно могу описати коришћењем само унутаратомских матричних елемената између p орбитала (Chadi, 1977; Allan и Delerue, 2012):

$$\langle x \uparrow | H^{SO} | z \downarrow \rangle = \lambda, \quad (2.2.24)$$

$$\langle x \downarrow | H^{SO} | z \uparrow \rangle = -\lambda, \quad (2.2.25)$$

$$\langle x \uparrow | H^{SO} | y \uparrow \rangle = -i\lambda, \quad (2.2.26)$$

$$\langle x \downarrow | H^{SO} | y \downarrow \rangle = i\lambda, \quad (2.2.27)$$

$$\langle y \uparrow | H^{SO} | z \downarrow \rangle = -i\lambda, \quad (2.2.28)$$

$$\langle y \downarrow | H^{SO} | z \uparrow \rangle = -i\lambda, \quad (2.2.29)$$

где је

$$\lambda = \left\langle x \left| \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V) \cdot \mathbf{p} \right| x \right\rangle. \quad (2.2.30)$$

Из једначина (2.2.24-2.2.30) се види да се сви матрични елементи могу параметризовати помоћу само једног параметра који је означен са λ .

3. Подешавање енергетског процепа у $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ асиметричним квантним јамама

3.1 Увод

Концепт тополошког уређења је недавно привукао велику пажњу научне јавности због примене у откривању и класификацији нових фаза материје (Hasan и Kane, 2010). Тополошко уређење се користи онда када није могуће разликовати квантне фазе коришћењем уобичајене Ландауове (рус. *Landau*) теорије о нарушавању симетрије. На пример, целобројни квантни Холов ефекат у формализму једночестичне квантне механике (Thouless и сар., 1982) и корелисани фракциони Холов ефекат (Tsui и сар., 1982) су објашњени коришћењем тополошког уређења. Помоћу овог концепта пронађена је нова квантна фаза која се назива тополошки изолатор (скр. **ТИ**; енгл. *Topological Insulator*) (Bernevig и сар., 2006; König и сар., 2007В; Zhou и сар., 2008) са могућим применама у спинтроници и квантном рачунарству. Различита спинска хирална стања су детаљно описана у референци (Kalmeyer и Laughlin, 1987). За ова стања је установљено да, иако поседују исту симетрију, њихове тополошке инваријанте се међусобно разликују (Thouless и сар., 1982).

Тополошки изолатор се понаша као обичан изолатор у унутрашњости, док на својој површини може испољити својства метала (Shen, 2012). За разлику од обичног изолатора, у његовом енергетском процепу долази до појаве спински поларисаних ивичних стања која су заштићена симетријом заснованом на инверзији времена. Тополошки изолатор је веома сличан квантном Холовом стању и представља његову генерализацију на три просторне димензије (Shen, 2012). Стање тополошког изолатора може постојати у 2Д и 3Д материјалима. У узорцима који су сачињени од 2Д материјала, стање тополошког изолатора се још назива и квантно спинско Холово стање. Његово постојање је први пут теоријски предложено за графен (Kane и Mele, 2005). Модел за графен је представљао две копије Холдејновог (енгл. *Haldane*) модела (Haldane, 1988) са сопственим спин-орбитним спрезањем и предвиђао је појаву квантоване спинске Холове проводности. Међутим, експериментално је установљено да спин-орбитна интеракција у лаким атомима угљеника није довољно велика за отварање енергетског процепа у којем би могла да се детектују ивична стања (Wang и сар., 2015). Због тога је већа пажња посвећена материјалима који су састављени од тежих атома у којима су релативистички ефекти израженији. На пример, коришћењем једноставног ефективног модела је теоријски предвиђено постојање квантног спинског Холовог ефекта у $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантним јамама (Bernevig и сар., 2006). Када јама достигне критичну вредност дебљине, $d_c = 6,3 \text{ nm}$, долази до инверзије проводне и валентне зоне (Bernevig и сар., 2006). То је представљало индикацију могуће промене квантне фазе из стања нормалног изолатора у стање тополошког изолатора.

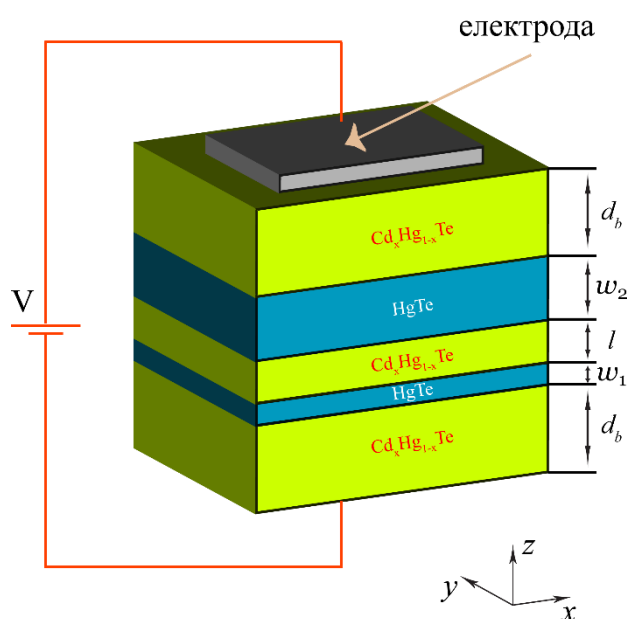
Теоријска предвиђања су експериментално потврђена годину дана касније (König и сар., 2007В). Коришћењем ефективних модела теоријски је аргументовано да и сложеније структуре, као што су симетричне двоструке квантне јаме (скр. **SDQW**; енгл. *Symmetric Double Quantum Well*) базиране на $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ и $\text{InAs}/\text{GaSb}/\text{AlSb}$, могу да поседују тополошки нетривијалне фазе (Michetti и сар., 2012; Liu и сар., 2008). Детаљном теоријском анализом је показано и да се подешавањем напона примењеног у правцу нарастања структуре може ефикасно контролисати тополошка промена квантне фазе. Такође, недавно је утврђено да $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ SDQW испољава $3/2$ псеудоспински степен слободе који омогућава појаву занимљивих ефеката повезаних са спинским спрезањем између HgTe слојева који су одвојени CdTe баријерама (Krishtopenko и сар., 2016В). Структуре овог типа испољавају псеудоспински базирану физику сличну двослојном графену (скр. **BG**; *Bilayer Graphene*) без долиנסке дегенерације (Michetti и сар., 2012).

На основу наведених истраживања, у овој глави су помоћу реалистичног осмозонског Кејновог модела испитана електронска својства $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ асиметричних двоструких квантних јама (скр. **ADQW**; енгл. *Asymmetric Double Quantum Well*). Посматрани су ефекти који се јављају као последица инверзије зоне са Γ_8 симетријом која води порекло од p -орбитала и зоне са Γ_6 симетријом која води порекло од s -орбитале. Детаљно је испитана фаза слична двослојном графену која може постојати и у $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ADQW структурама.

У наредној секцији је представљен коришћени $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел базиран на теорији анвелопних функција и поступак за решавање својственог проблема развојем анвелопних функција у комплетан базисни скуп раванских таласа. Такође, формулисан је поступак за недвосмислену класификацију различитих зона у ADQW. Резултати за електронску структуру су представљени и дискутовани у одељку 3.3, док је у одељку 3.4 изведен концизан закључак.

3.2 Теоријски модел вишеслојних наноструктура

На сл. 3.1 је представљена скица анализираних структуре засноване на двострукој квантној јама. Систем се састоји од две HgTe квантне јама које су одвојене $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријером. Овде је z -оса оријентисана дуж правца нарастања. Ширине QW_1 и QW_2 јама су означене са w_1 и w_2 , респективно. Ширина баријере (B_2) између јама је означена са l , док је са d_b означена ширина $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријера (B_1, B_3) исте ширине које окружују HgTe јама.



Слика 3.1. Тродимензиони шематски приказ $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ADQW структуре нарастане у $[001]$ кристалографском правцу. w_1 и w_2 су ширине HgTe слојева (QW_1 и QW_2 , респективно), l је растојање између њих (B_2), d_b представља ширину $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријера (B_1, B_3), док је x вредност моларног удела.

Претпостављено је да ове баријере имају исти хемијски састав као и баријера која се налази између јама. Размотрена структура има коначну ширину. Када $l \rightarrow 0$, двострука квантна јама постаје једнострука квантна јама ширине $w = w_1 + w_2$. Када $l \rightarrow \infty$ двострука квантна јама постаје систем од две неспрегнуте квантне јама.

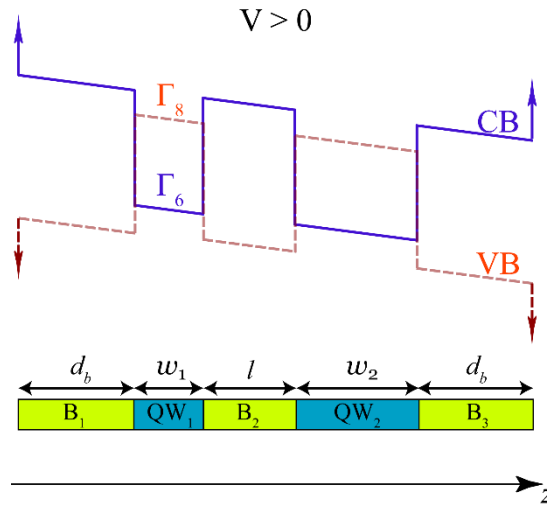
Електронска зонска структура $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ двоструке квантне јама (скр. **DQW**; енгл. *Double Quantum Well*) је одређена помоћу осмозонског $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела (Kane, 1957; Novik и сар., 2005):

$$H\Xi(\mathbf{r}) = E\Xi(\mathbf{r}), \quad (3.2.1)$$

који је представљен скупом од осам спрегнутих диференцијалних једначина. У једначини (3.2.1), H је вишезонски хамилтонијан, док Ξ означава спинор анвелопних функција $\chi_n(\mathbf{r})$, $n \in \{1, 2, \dots, 8\}$, које одговарају Блоховим стањима у центру Брилуенове зоне. Исти базисни скуп Блохових функција је коришћен и за јаме и за баријере. Додатно, услед транслаторне инваријантности у равни слојева, варијабле x и y се могу раздвојити од варијабле z ,

$$\Xi_{\mathbf{k}_{||}}(x, y, z) = \exp[i(k_x x + k_y y)] [\chi_1(z) \chi_2(z) \dots \chi_n(z)]^T, \quad (3.2.2)$$

где су k_x и k_y компоненте таласног вектора у равни јаме. Детаљнији опис хамилтонијана је дат у секцији 2.1.3.



Слика 3.2. Енергетски дијаграм најниже проводне зоне (означене са СВ) и највише валентне зоне (означене са VB) у ADQW структури, када се примени напон V . У HgTe слојевима зонски распоред у Γ тачки је инвертован. Зона Γ_8 симетрије која води порекло од p -орбитала је енергетски изнад зоне са Γ_6 симетријом која води порекло од s -орбитале.

Нумеричко решавање својственог проблема је спроведено развојем анвелопних функција у комплетан базисни скуп раванских таласа:

$$\chi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{L_{sc}}} \sum_{p=-N}^N c_{n,p} \exp\left[\frac{i2p\pi z}{L_{sc}}\right], \quad (3.2.3)$$

где је $L_{sc} = w_1 + w_2 + l + 2d_b$. Базис је ограничен на прву Брилуенову зону, тј. $2\pi|N|/L_{sc} \leq 2\pi/a_0$, где је a_0 параметар кристалне решетке. Матрица хамилтонијана је реда $8 \times (2N + 1)$. Напрезање које се јавља због неусаглашености параметара кристалне решетке HgTe и $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ је укључено коришћењем Бир-Пикусове теорије (видети секцију 2.1.5). Присуство спољашњег електричног поља, \mathbf{F}_{el} , се моделује додавањем матричних елемената $\varphi(z) = e\mathbf{F}_{el} \cdot \mathbf{r} = eF_{el}z = eV(z)$ главној дијагонали матрице. Ефективне ивице зона су модификоване у присуству електричног поља што се може видети на сл. 3.2. Са друге стране, присуство нормалног магнетског поља је урачунато коришћењем Пајерлсове замене и матрице која описује Земанов ефекат (видети секцију 2.1.4).

С обзиром да постоји мешање зона у оквиру развијене $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорије, потребно је извршити класификацију добијених стања. То је урађено рачуном вероватноће који одговара Крамеровом дегенерисаном пару базисних стања (Krishtopenko и сар., 2016В; Toralović и сар. 2020):

$$p_S(k_x, k_y) = \sum_{p=-N}^N \sum_{s \in S} |c_{s,p}(k_x, k_y)|^2, \quad (3.2.4)$$

где је $S = \{1,2\}$ за стања из проводне зоне, $S = \{3,6\}$ за стања тешких шупљина, $S = \{4,5\}$ за стања лаких шупљина и $S = \{7,8\}$ за стања отцепљена услед спин-орбитне интеракције. Овде је израчунато p_{cb} на основу доприноса $|\Gamma_6, \pm 1/2\rangle$ стања, p_{hh} на основу доприноса $|\Gamma_8, \pm 3/2\rangle$ стања, p_{lh} на основу доприноса $|\Gamma_8, \pm 1/2\rangle$ стања и p_{so} на основу доприноса $|\Gamma_7, \pm 1/2\rangle$ стања. Стања су класификована као шупљинска (hh), уколико је $p_{hh} > p_{lh} + p_{cb} + p_{so}$ у $k_{\parallel} = 0$. Са друге стране, ако је $p_{lh} + p_{cb} + p_{so} > p_{hh}$ стање подзоне је класификовано као електронско, лакошупљинско или стање које потиче од зоне која је отцепљена услед спин-орбитне интеракције у зависности од тога која од компоненти p_{cb} , p_{lh} и p_{so} има највећу вредност (Krishtopenko и сар., 2016В).

3.3 Резултати и дискусија

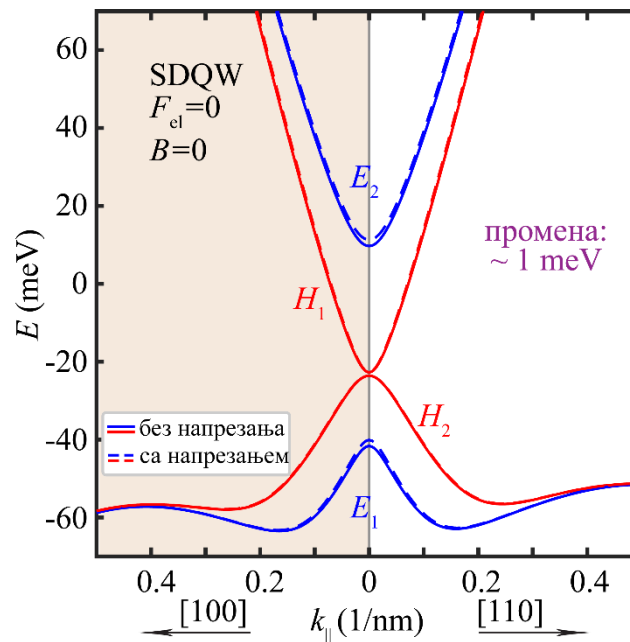
Нумерички рачун је спроведен коришћењем параметара модела чије су вредности подешене тако да добро репродукују експерименталне резултате на температури $T = 0$ К (Sengupta и сар., 2013). Овде је истражен утицај асиметрије конфинирајућег потенцијала на електронске особине $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ двоструке квантне јаме (DQW). Резултати из овог одељка ће бити упоређени са електронском структуром симетричне $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ двоструке квантне јаме која је моделована у референцама (Michetti и сар., 2012; Krishtopenko и сар., 2016В). Вредности ширине спољашњих $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријера d_b , ширине HgTe јама w_1 и w_2 , и растојања l између њих су приказане у табели 3.1. Моларни удео Cd у $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријерама је исти за случај SDQW и ADQW структура и износи $x = 0,7$. Због једноставности нумеричког рачуна ефекти који су последица трансфера наелектрисања између слојева нису узети у разматрање (Xu и сар., 2010).

Табела 3.1. Преглед геометријских параметара (d_b , w_1 , w_2), растојања (l) и типа проучених DQW. Ширине HgTe слојева су означене са w_1 и w_2 , d_b је ширина $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријера, док l представља растојање између HgTe слојева. w_2 има различите вредности, док су d_b , w_1 и l исти за све структуре.

	Тип	d_b (nm)	w_1 (nm)	w_2 (nm)	l (nm)
SDQW	Симетрична	30	6	6	2,5
ADQW	Асиметрична	30	6	7,8	2,5

Јаме у SDQW структури су ширине 6 nm. У циљу повећања ефекта тунеловања између квантних јама, оне су одвојене танком $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ баријером ширине $l = 2,5$ nm. За изабране вредности геометријских параметара у SDQW структури долази до појаве металне фазе која је веома слична двослојном графену (Krishtopenko и сар., 2016В). Главно својство двослојног графена је одсуство енергетског процепа који се може отворити и ефикасно контролисати помоћу напона на гејту (Min и сар., 2007). У $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ SDQW структури, за одабране ширине јама и растојања између њих, долази до специфичног зонског распореда. Зоне су класификоване на основу особина таласне функције (видети једначину

(3.2.4)) у тачки $k_{\parallel} = 0$ (Ху и сар., 2010). Уочене су четири зоне од интереса: две зоне означене са E_1 и E_2 су доминантно електронске зоне, док су зоне означене са H_1 и H_2 шупљинске зоне. Њихове дисперзионе релације у одсуству напрезања (пуне линије) и када је у модел укључен утицај напрезања (испрекидане линије) су приказане на сл. 3.3. Дисперзионе релације су израчунате за два нееквивалентна правца у реципрочном простору, [100] (део графика који је осенчен) и [110] (део графика који није осенчен). Спински тип зоне је одређен на основу особина таласне функције у $k_{\parallel} = 0$ (Vernevig и сар., 2006). Са сл. 3.3 се јасно може видети да су на приказаним дисперзијама са и без укљученог напрезања разлике у енергијама реда 1 meV. То је и очекивано, ако се узме у обзир мала неусаглашеност параметара кристалне решетке HgTe једињења и $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ легуре на температури $T = 0$ K (Capper и Garland, 2011).

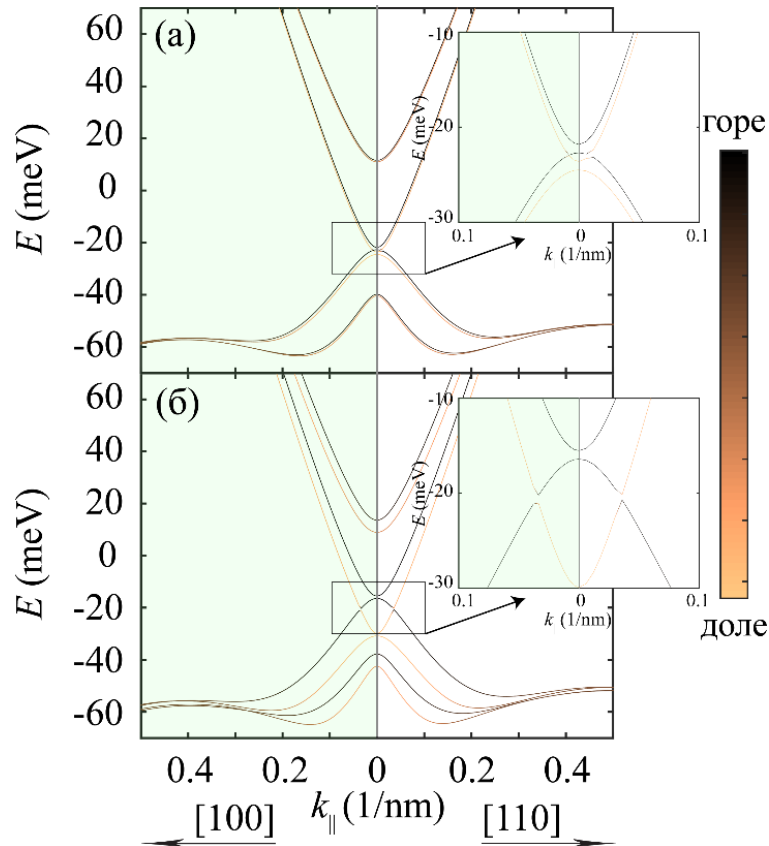


Слика 3.3. Дисперзионе релације у SDQW структури за вредности $w_1 = w_2 = 6$ nm и $l = 2,5$ nm у одсуству напрезања (пуне линије) и када је у модел укључен утицај напрезања (испрекидане линије). Леви панел слике се односи на случај када је $k_{\parallel} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{\parallel} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Услед симетрије конфинирајућег потенцијала, стања су спински дегенерисана.

Укупни угаони момент H_1 и H_2 стања износи $j = 3/2$ и у одсуству спољашњег електричног поља ова стања су дегенерисана у тачки $k_{\parallel} = 0$ (видети сл. 3.3). Примећено је да су дисперзионе релације свих зона готово изотропне у (k_x, k_y) равни и да се могу апроксимирати параболома у околини центра Брилуенове зоне. Прво ексцитовано електронско стање E_2 се налази изнад H_1 стања, али је електронско стање најниже енергије E_1 знатно испод H_1 стања, што је карактеристика структура са разломљеним енергетским процепом. Такође, може се приметити постојање инверзије и између E_1 и H_2 што представља могућу индикацију да је дошло до тополошке промене квантне фазе (Krishtopenko и сар., 2016В). С обзиром да је конфинирајући потенцијал SDQW симетричан у одсуству спољашњег поља, стања су дегенерисана у читавој Брилуеновој зони.

На сл. 3.4 (а) и (б) су приказане дисперзионе релације SDQW структуре за случај када је присутно нормално магнетско поље $B = 5$ T и $B = 40$ T, респективно. Услед присуства нормалног магнетског поља, долази до нарушавања симетрије засноване на инверзији времена. Разлика енергија стања спина горе и спина доле је директно пропорционална са B .

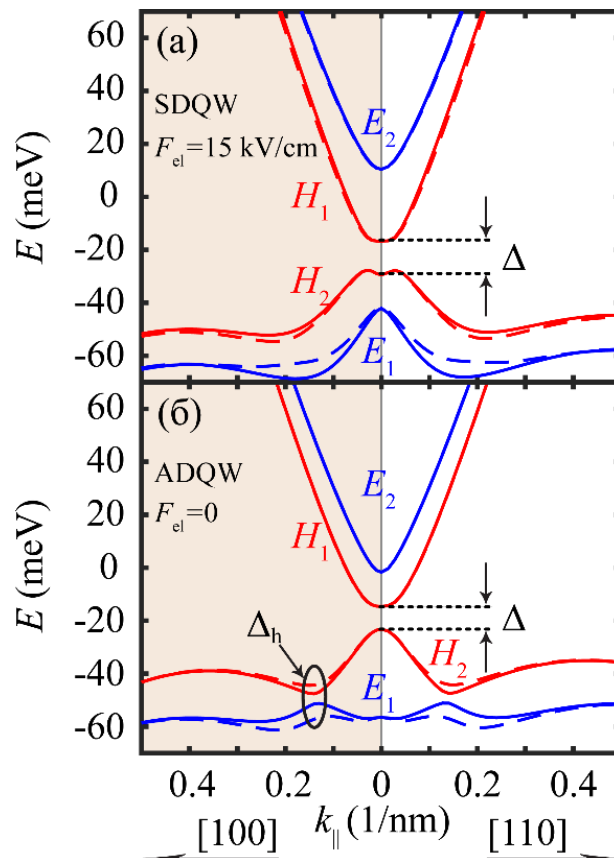
Са сл. 3.4 се уочава померај њихових енергија услед Земановог ефекта који постаје израженији са повећањем вредности B . То се може објаснити чињеницом да је матрица H^Z директно сразмерна са B (видети једначину 2.1.52). На сл. 3.4 је извршена спинска класификација стања у свакој $k_{||}$ тачки, посебно. Удео спин горе и спин доле стања у укупној таласној функцији је представљен на слици различитим нијансама **црне** и **наранџасте** боје, респективно. Уочено је интересно понашање стања чији укупни угаони момент износи $j = 3/2$ у присуству нормалног магнетског поља. Са слике се види да са променом вредности таласног вектора долази до антиукрштања енергије стања супротних спинова. Приликом антиукрштања долази до измене доминантне спинске компоненте при антиукрштању стања, што се може видети на умецима сл. 3.4 (а) и сл. 3.4 (б).



Слика 3.4. Дисперзионе релације у SDQW структури за вредности $w_1 = w_2 = 6$ nm и $l = 2,5$ nm (а) када је $B = 5$ T и (б) када је $B = 40$ T. Услед дејства нормалног магнетског поља долази до нарушавања спинске дегенерације. Стања су енергетски померена због Земановог ефекта. Леви панел слика (а)-(б) се односи на случај када је $k_{||} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{||} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Спин горе (спин доле) стања су представљена **црном** (**наранџастом**) линијом. Умеци на сликама приказују енергије око Фермијевог нивоа између којих долази до антиукрштања и измене доминантне спинске компоненте.

На сл. 3.5 (а) су приказане дисперзионе релације у случају када постоји спољашње електрично поље. Слично као и код двослојног графена (Min и сар., 2007), енергетски процеп између H_1 и H_2 зона се може ефикасно подешавати помоћу спољашњег електричног поља. Примена електричног поља доводи до нарушавања спинске дегенерације у тачкама $k_{||} \neq 0$, што је последица Рашбиног (енгл. *Rashba*) ефекта. Такође, долази до отварања малог индиректног енергетског процера Δ између H_1 и H_2 зона у близини тачке $k_{||} = 0$. Може се приметити да дисперзионе релације H_1 и H_2 зона имају карактеристичан облик „мексичког

шешира“ (He и сар., 2014) (видети сл. 3.5 (а)), што је веома слично ефекту који се јавља у двослојном графену када се изложи дејству нормалног електричног поља (Min и сар., 2007). Овакав облик дисперзионих релација је последица мешања стања H_1 и H_2 зона при коначној вредности $k_{||}$. Ово мешање узрокује антиукрштање њихових дисперзионих релација што доводи до појаве процепа у околини тачке $k_{||} = 0$. Са повећавањем јачине електричног поља, вероватноћа тунеловања из једне јаме у другу јаму се повећава. Сходно томе, антиукрштање се помера ка вишим вредностима $k_{||}$. Такође, услед спин-орбитне интеракције долази до нарушавања спинске дегенерације, па величина и позиција енергетског процепа постаје спински зависна.

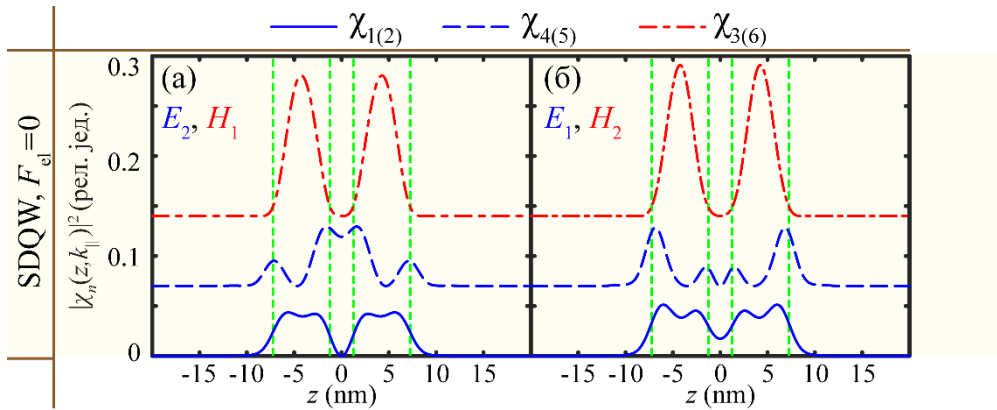


Слика 3.5. Дисперзионе релације у SDQW структури која је слична двослојном графену за вредности $w_1 = w_2 = 6 \text{ nm}$ и $l = 2,5 \text{ nm}$ (а) када је $F_{el} = 15 \text{ kV/cm}$ што доводи до отварања енергетског процепа Δ између H_1 и H_2 зона и појаве спинског цепања услед Рашбиновог ефекта. (б) Дисперзионе релације ADQW структуре када је $w_1 = 6 \text{ nm}$, $w_2 = 7,8 \text{ nm}$ и $l = 2,5 \text{ nm}$ у одсуству електричног поља. Услед структуралне асиметрије енергетски процеп Δ између H_1 и H_2 зона инхерентно постоји, а спинска дегенерација између енергетских нивоа је нарушена. Хибридизациони процеп је означен са Δ_h . Леви панел слика (а)-(б) се односи на случај када је $k_{||} = k_x$ ([100] правац), док је десни панел формиран за $k_x = k_y$ где је $k_{||} = \sqrt{2}k_x$ ([110] правац). Пуне/испрекидане линије означавају стања која су доминантно спин горе/доле.

Пронађено је да Δ има релативно мале вредности (реда неколико meV) када се примени релативно јако електрично поље. На пример, за $F_{el} = 15 \text{ kV/cm}$, енергетски процеп износи $\Delta = 12,8 \text{ meV}$. Δ не представља монотону функцију електричног поља што је последица постојања локалних екстремума H_1 и H_2 зона у тачкама $k_{||} \neq 0$ (Krishtopenko и сар., 2016В). Електрично поље потребно за појаву већег енергетског процепа може да доведе до електричног пробоја. Додатно, са повећавањем електричног поља долази до појаве новог

ефекта који се односи на померање екстремума зона и енергетског процепа ка већим вредностима $k_{||}$.

Уместо електричног поља, сада ће бити показано да и асиметрија потенцијала ивица зона доводи до отварања процепа. Док се процеп између H_1 и H_2 зона у SDQW отвара помоћу електричног поља, овде процеп инхерентно постоји и последица је асиметрије. На пример, када су ширине HgTe квантних јама $w_1 = 6$ nm и $w_2 = 7,8$ nm, величина енергетског процепа износи $\Delta = 8,6$ meV (видети сл. 3.5 (б)). Спрезање доминантно електронских и шупљинских зона не постоји у тачки $k_{||} = 0$. Услед структуралне асиметрије долази до нарушавања спинске дегенерације у тачкама $k_{||} \neq 0$, слично као у SDQW структури када се изложи дејству електричног поља. Међутим, дисперзионе релације H_1 и H_2 зона сада немају облик „мексичког шешира“. Услед различитих ширина јама, постоје разлике у локализацији стања која припадају посматраним зонама. С обзиром на то, долази до цепања зона и отварања енергетског процепа у тачки $k_{||} = 0$. Међу четири представљене зоне, само код E_1 и H_2 се јавља изражено спинско цепање, што се може видети на сл. 3.5 (б). То је због израженог спрезања између ових зона у околини тачке антиукрштања $k_x = 0,14$ nm⁻¹. У овој тачки, стања две зоне су јако хибридувана што доводи до отварања малог хибридуационог процепа Δ_h , чија позиција и величина зависе од спина.

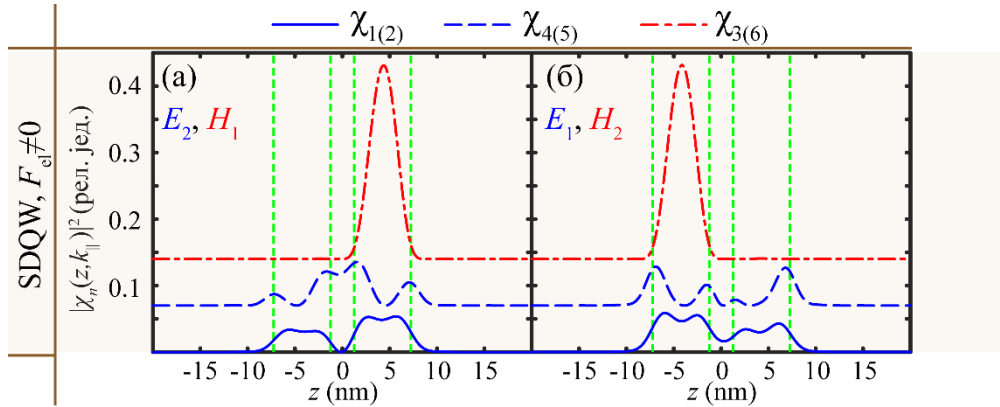


Слика 3.6. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0)$ nm⁻¹ за SDQW структуру када је $w_1 = w_2 = 6$ nm и $F_{el} = 0$. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу (а), док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу (б). Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

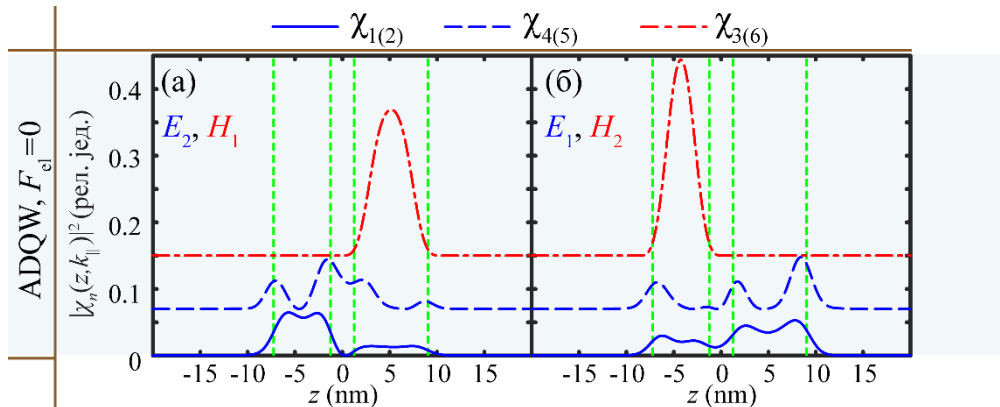
У циљу да се одреди на који начин асиметрија потенцијала структуре утиче на локализацију носилаца наелектрисања, на сл. (3.6-3.8) је приказана зависност густине вероватноћа од координате z , за све четири зоне у тачки $k_{||} = 0$. На сл. 3.6 и сл. 3.7, су дате густине вероватноћа у SDQW структури за случај када је $F_{el} = 0$ и $F_{el} = 15$ kV/cm, респективно. На сл. 3.8 су приказани резултати за ADQW структуру. Стања која припадају E_2 и H_1 зонама су приказана на сл. 3.6 (а), 3.7 (а) и 3.8 (а), док су стања која припадају E_1 и H_2 зонама приказана на сл. 3.6 (б), 3.7 (б) и 3.8 (б). Доминантно електронске зоне, E_1 и E_2 су формиране од $|\Gamma_6, \pm 1/2\rangle$ и $|\Gamma_8, \pm 1/2\rangle$ Блохових стања у центру Брилуенове зоне, док H_1 и H_2 зоне потичу искључиво од $|\Gamma_8, \pm 3/2\rangle$ стања. H_1 и H_2 , као и $|\Gamma_6, \pm 1/2\rangle$ компонента E_1 и E_2 зона су већим делом локализована у централним деловима HgTe квантних јама. Са друге стране, $|\Gamma_8, \pm 1/2\rangle$ компоненте E_1 и E_2 су локализоване на граничној површини јама и баријера.

У одсуству електричног поља, за изабране димензије SDQW структуре се може видети да постоји дегенерација између H_1 и H_2 зона у тачки $k_{||} = 0$. Њихова стања су слично локализована (видети сл. 3.6 (а) и сл. 3.6 (б)) и поседују супротну парност. Електрично поље

повећава вероватноћу тунеловања између јама, што доводи до просторне раздвојености стања H_1 и H_2 зона (видети сл. 3.7 (а) и сл. 3.7 (б)) и отварања енергетског процепа. На сл. 3.8 (а) и сл. 3.8 (б) се може видети да електронска и шупљинска стања ADQW структуре испољавају особину асиметрије.



Слика 3.7. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ за SDQW структуру када је $w_1 = w_2 = 6 \text{ nm}$ и $F_{el} = 15 \text{ kV/cm}$. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу (а), док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу (б). Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

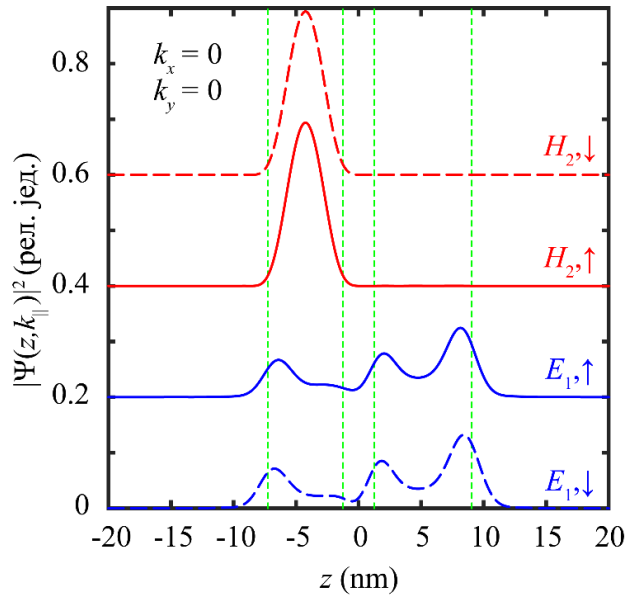


Слика 3.8. Густине вероватноћа у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ за ADQW структуру када је $w_1 = 6 \text{ nm}$, $w_2 = 7,8 \text{ nm}$ и $F_{el} = 0$. Густине вероватноћа спинора анвелопних функција E_2 и H_1 стања су представљене на левом панелу (а), док су E_1 и H_2 стања приказана на десном панелу (б). Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално одвојене за 0,07 (рел. јед.). Услед спинске дегенерације, густине вероватноћа за спин горе и спин доле стања су исте.

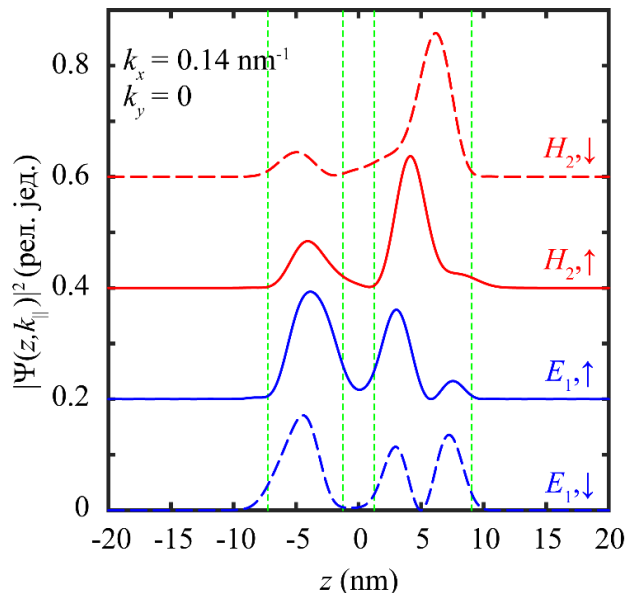
Слично као у SDQW структури када је $F_{el} \neq 0$, може се приметити да су $|\Gamma_6, \pm 1/2\rangle$ и $|\Gamma_8, \pm 1/2\rangle$ компоненте E_1 и E_2 зона већим делом локализоване само у једној од јама. Додатно, $|\Gamma_8, \pm 1/2\rangle$ компонента је померена према ивицама квантних јама. За случај ADQW структуре, основно шупљинско стање H_1 је локализовано у широј јама (сл. 3.8 (а)), док је прво ексцитовано H_2 стање локализовано у ужој јама (сл. 3.8 (б)).

Да би се разјаснио ефекат хибридизације или спрезања између стања, потребно је детаљно анализирати облик густина вероватноћа E_1 и H_2 зона. То ће бити урађено управо за случај ADQW структуре чија је дисперзија приказана на сл. 3.5 (б). Биће анализирани таласне

функције за обе вредности спина у две различите тачке, 1) $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ и 2) $(k_x, k_y) = (0, 14, 0) \text{ nm}^{-1}$. Ради једноставности, уместо појединачних компоненти спинора анвелопних функција, посматраће се укупна густина вероватноће $|\Xi_{k_{\parallel}}|^2 = \sum_{n=1}^8 |\chi_n(k_{\parallel}, z)|^2$ нормализована на јединицу (Хи и сар., 2010). Резултати за случај када је $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ и $(k_x, k_y) = (0, 14, 0) \text{ nm}^{-1}$ су представљени на сл. 3.9 и 3.10, респективно.



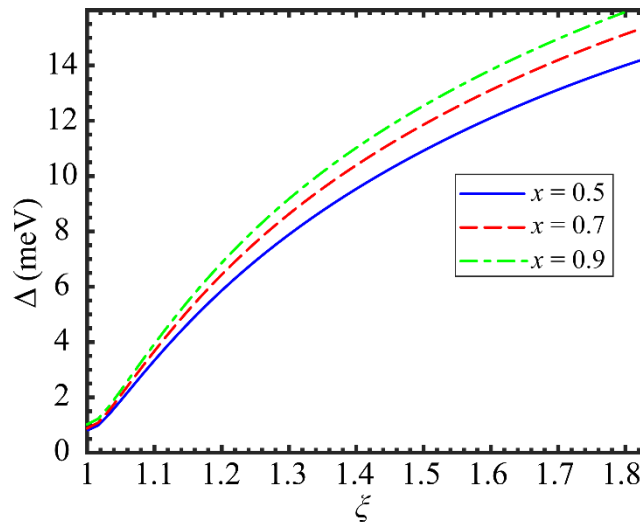
Слика 3.9. Укупна густина вероватноће у тачки $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ за ADQW структуру када је $w_1 = 6 \text{ nm}$, $w_2 = 7,8 \text{ nm}$ и $F_{el} = 0$. Вертикалне (зелене) испрекидане линије представљају границе слојева. Пуне/испрекидане линије означавају спин горе/доле стања. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално раздвојене за 0,2 (рел. јед.).



Слика 3.10. Укупна густина вероватноће у тачки $(k_x, k_y) = (0, 14, 0) \text{ nm}^{-1}$ за ADQW структуру када је $w_1 = 6 \text{ nm}$, $w_2 = 7,8 \text{ nm}$ и $F_{el} = 0$. Вертикалне (зелене) испрекидане линије представљају границе слојева. Пуне/испрекидане линије означавају спин горе/доле стања. Због боље видљивости, густине вероватноћа су вертикално раздвојене за 0,2 (рел. јед.).

Спинска и орбитална класификација приказаних стања је извршена на основу особина одговарајућих таласних функција у $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ (Ху и сар., 2010; Krishtopenko и сар., 2016В). Пуним/испрекиданим линијама су означена стања спина горе/доле. Због боље видљивости, густине вероватноћа за E_1 и H_2 зоне су померене по у оси за 0,2 (рел. јед.). Такође, редослед таласних функција одговара редоследу њихових дисперзионих релација у тачки $(k_x, k_y) = (0, 14, 0) \text{ nm}^{-1}$, што се може видети уколико се упореди сл. 3.5 (б) са сл. 3.9 и сл. 3.10.

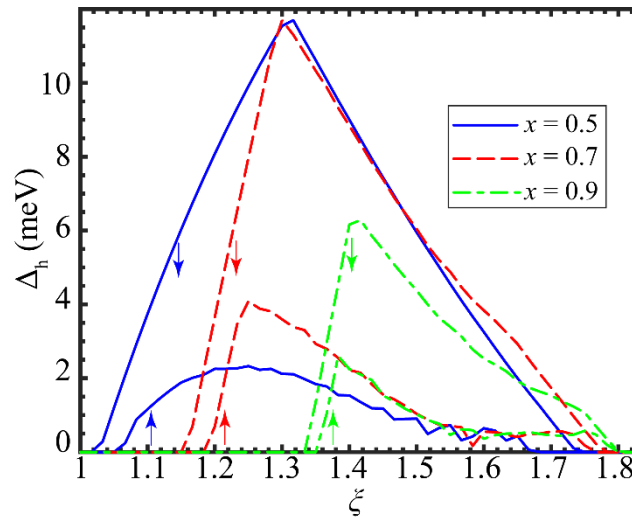
На сл. 3.9 се може видети да за $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ спрезање између E_1 и H_2 зона није изражено. Са исте слике се примећује да за случај када је $(k_x, k_y) = (0, 0) \text{ nm}^{-1}$ постоји дегенерација између спин горе и спин доле стања E_1 и H_2 зона и зависност њихових густина вероватноћа од координате z је идентична. H_2 зона је највећим делом локализована у ужој QW_1 HgTe јами, док је E_1 зона за обе вредности спина локализована већим делом по ивицама шире HgTe QW_2 јаме. Када је $(k_x, k_y) = (0, 14, 0) \text{ nm}^{-1}$, стања E_1 и H_2 зона нису спински дегенерисана (сл 3.5 (б)). На сл. 3.10 се може јасно видети да у том случају расподела вероватноћа стања спин горе/доле више нису иста. Са порастом $k_{||}$ долази до израженог спрезања између E_1 спин горе и H_2 спин горе стања у обе HgTe јаме. Ово спрезање је израженије у поређењу са спрезањем између спин доле стања. Због тога је вредност хибридизационог енергетског процепца Δ_h за спин горе стања нешто мања у поређењу са енергетским процепом за спин доле стања. Енергетски процеп између спин горе стања E_1 и H_2 зона износи $\Delta_h = 3,9 \text{ meV}$.



Слика 3.11. (а) Енергетски процеп Δ између H_1 и H_2 зона као функција релативног односа $\xi = w_2/w_1$ за вредности моларног удела $x \in \{0,5, 0,7, 0,9\}$ на температури $T = 0 \text{ K}$.

Енергетски процеп у SDQW се повећава са електричним пољем. Сличан закључак би могао *a priori* да се изведе за случај изражене асиметрије потенцијала ивица зона у ADQW . Степен асиметрије би утицао на процеп између шупљинских стања, као и на процеп између електронских и шупљинских стања. На пример, асиметрија би се могла контролисати варирањем ширине једне од квантних јама, док би ширина друге јаме била константна. У раду је ширина прве квантне јаме QW_1 фиксирана на вредност $w_1 = 6 \text{ nm}$, док је ширина друге квантне јаме варирана у опсегу од $w_2 \in [6, 11] \text{ nm}$. На сл. 3.11 и сл. 3.12 је приказана зависност енергетских процепца Δ и Δ_h од релативног односа ($\xi = w_2/w_1$) ширина HgTe квантних јама. Претходно је показано да је за $k_{||} = 0$ локализација стања у H_1 зони претежно у широј јами, док је за H_2 зону локализација претежно у ужој јами. Што је већа разлика између ширина јама, то је већа разлика у њиховим енергијама конфинирања. С обзиром на

то, са порастом ξ разлика између енергија два стања се повећава. Другим речима, енергетски процеп Δ између шупљинских стања расте са ξ , што је приказано на сл. 3.11. Додатно, диспозиција зона зависи и од моларног удела x који се користи за фино подешавање електронских особина система који се састоји од квантних јама (Sengupta и сар., 2013). Могуће је приметити да се зонски офсет за шупљине повећава са повећавањем вредности x те конфинирање шупљина постаје израженије чиме се смањује вероватноћа за тунеловање између јама. Ово доводи до повећања енергетског процепа Δ .



Слика 3.12. Хибридни процеп Δ_h између E_1 и H_2 зона као функција релативног односа $\xi = w_2/w_1$ за вредности моларног удела $x \in \{0,5, 0,7, 0,9\}$ на температури $T = 0$ К. Спинска стања су означена стрелицама непосредно уз одговарајућу линију.

Коначно, анализиран је и утицај ефеката асиметрије и молског удела на хибридни процеп у ADQW. У симетричним јамама, E_1 и H_2 зоне су готово дегенерисане за веће вредности $k_{||}$ (видети сл. 3.3). Када једна од две јаме постане шири, зоне сачињене од стања која су већим делом локализована у ужој јами имају уобичајен зонски распоред. Са друге стране, зоне компоноване од стања која су локализована у широј јами су инвертоване. E_1 и H_2 зоне се цепају и за одређену вредност фактора асиметрије ξ , долази до отварања хибридног процепа Δ_h при коначној вредности $k_{||}$. Са даљим повећавањем ξ , енергетски виша лакошупљинска зона се приближава енергетски нижој електронској E_1 зони при чему долази до њиховог мешања. Са повећањем ξ долази до мешања и са зоном E_1 , што доводи до постепеног смањења и ишчезавања процепа. Са повећавањем моларног удела, долази до снажнијег конфинирања електрона и шупљина што доводи до оштрих антиукрштања између зона и сходно томе до опадања вредности хибридног процепа Δ_h .

3.4 Сажетак

У овој глави су теоријски истражена својствена стања у структури асиметричних HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама помоћу осмозонског Кејновог $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела. Пронађена су специфична стања са укупним угаоним моментом $j = 3/2$, између којих долази до отварања енергетског процепа чак и када је електрично поље једнако нули. Величина овог енергетског процепа се може ефикасно подешавати варирањем вредности односа ширина HgTe јама (ξ). За одређени опсег вредности ξ јавља се изражена хибридизација између електронских и шупљинских стања. Због тога, долази до појаве хибридног процепа при коначној

вредности $k_{||}$. Добијени резултати указују на могућности подешавања енергетског процепа у асиметричним $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантним јамама било варирањем ширине једне од квантних јама, било променом вредности моларног удела Cd у $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ легури. Пронађено је да величина хибридизационог процепа може имати вредност од приближно 12 meV када није примењен напон на гејту. То је упоредиво са енергетским процепом симетричног система када се примени електрично поље $F_{el} = 15 \text{ kV/cm}$. Такође, зоне испољавају инвертовани распоред, па с обзиром на то пажљиво дизајниран асиметрични систем би могао испољити тополошке ефекте слично осталим структурама које се базирају на $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантним јамама.

4. Електронска стања у 2Д HgTe наноструктурама у присуству нормалног магнетског поља

4.1 Увод

Квантне тачке (скр. **QD**; енгл. *Quantum Dot*) су системи у којима је кретање електрона и шупљина ограничено у сва три просторна правца. Ови системи поседују дискретан енергетски спектар и подесива оптичка својства. У овом одељку су проучена електронска и оптичка својства HgTe квантних тачака.

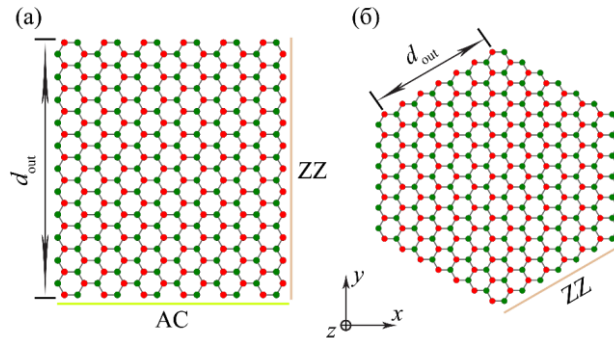
У последњих пар година HgTe једињење је постало популарно због јединствених тополошких особина. Добро је познато да валентна зона HgTe води порекло од *s*-орбитале и поседује Γ_6 симетрију, док је проводна зона настала од *p*-орбитала и има Γ_8 симетрију. Приликом инверзије зона долази до промене квантне фазе из стања нормалног изолатора у стање тополошког изолатора (Sengupta и сар., 2013). Недавним теоријским истраживањима је установљено да чак и монослој HgTe може поседовати нетривијалну тополошку фазу када се изложи дејству тензионог напрезања у равни (Li и сар., 2015). HgTe квантне јаме имају енергетски процеп у којем долази до појаве стања са ивичном локализацијом која су заштићена симетријом заснованом на инверзији времена (Bernevig и сар., 2006; König и сар., 2007B; Topalović и сар., 2019; Topalović и сар., 2020). Поред тога, на основу модела фононске дисперзије је установљено да су 2Д HgTe саћасти монослојеви динамички стабилни и да се могу искористити за реализацију нових 2Д хетероструктурних направа (Zheng и сар., 2015).

Наведена истраживања су послужила као мотивација да се у овом поглављу истраже електронска стања и оптичка својства 2Д HgTe квадратних квантних тачака (скр. **SQD**; енгл. *Square Quantum Dot*), хексагоналних квантних тачака (скр. **HQD**; енгл. *Hexagonal Quantum Dot*), квадратних квантних прстенова (скр. **SQR**; енгл. *Square Quantum Ring*) и хексагоналних квантних прстенова (скр. **HQR**; енгл. *Hexagonal Quantum Ring*) у нормалном магнетском пољу. У односу на квантне тачке квантни прстенови (скр. **QR**; енгл. *Quantum Ring*) су посебно интересантни јер додатно ограничавају кретање носилаца наелектрисања услед присуства унутрашњих ивица. Ово доводи до појаве нових интересантних ефеката у магнетском пољу који су повезани са појавом Ахаронов-Бомових (скр. **AB**; енгл. *Aharonov-Bohm*) осцилација (Aharonov и Bohm, 1959). Важно је напоменути да су до сада произведени HgTe квантни прстенови мезоскопских димензија са средњим радијусом од $1 \mu\text{m}$, код којих долази до појаве малих АВ осцилација у оквиру експеримената (König и сар., 2007B). Наноскопски HgTe прстенови просечног радијуса од неколико нанометара до сада нису произведени. Међутим, са даљим напретком поступака производње очекује се у блиској будућности експериментална реализација и оваквих HgTe наноструктура. Тренутно су експериментално реализоване само HgTe CQD са радијусом мањим од 10 nm , а верује се да ће и квантне тачке и прстенови од монослоја HgTe сличних димензија бити ускоро произведени.

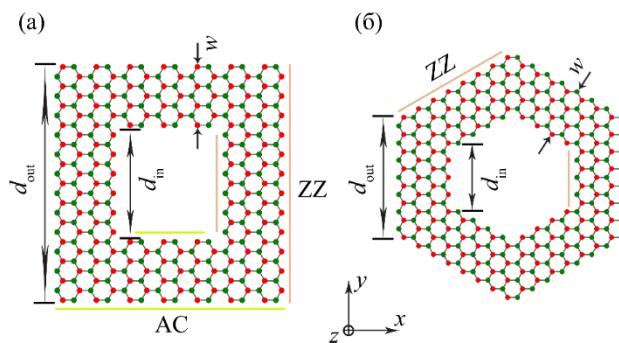
Електронска стања у наноструктурама се могу значајно мењати и променом њихових геометријских параметара (Holtkemper и сар., 2018). У овој глави ће бити истражене различите могућности контроле особина 2Д HgTe QD и QR структура променом њиховог облика и типа граница. Циљ је да се теоријски испита и понашање стања у S(H)QD и S(H)QR структурама у нормалном магнетском пољу. У секцији 4.2 ће прво бити представљен модел који се заснива на емпиријској методи јаке везе. Овде ће бити показано како је спољашње магнетско поље укључено у модел. Резултати за енергетске нивое и оптички спектар ће бити представљени у секцији 4.3. Коначно, у секцији 4.4 ће бити дат сажетак добијених резултата и изведен концизан закључак.

4.2 Теоријски модел јаке везе за квантне тачке и прстенове

На сл. 4.1 и сл. 4.2 је дат шематски приказ нумерички проучених 2Д S(H)QD и S(H)QR које су позициониране у x - y равни. На сл. 4.1 је са d_{out} означена дужина ивице полигоналне QD, док је на сл. 4.2 са d_{out} означена дужина спољашње ивице, d_{in} дужина унутрашње ивице, а w је ширина квантног прстена. У квадратним структурама су присутни „мешане“ фотелјасте (скр. AC; енгл. *ArmChair*) и цик-цак (скр. ZZ; енгл. *Zig-Zag*) ивице, док хексагоналне структуре имају само ZZ ивице. Све наноструктуре имају подједнаку површину $S = 25,30 \text{ nm}^2$. У табели 4.1 су представљени геометријски параметри (d_{out} , d_{in} , w) и број ивичних атома ($N_{\Sigma,ea}$) у размотреним наноструктурама.



Слика 4.1. Шематски приказ у x - y равни нумерички истражених (а) SQD и (б) HQD. d_{out} је дужина ивице полигоналне QD. AC и ZZ означавају фотелјасте и цик-цак тип ивица, респективно. Зелени (црвени) кружићи означавају Te(Hg) атоме.



Слика 4.2. Шематски приказ у x - y равни нумерички истражених (а) SQR и (б) HQR. d_{out} је дужина спољашње ивице за QR, d_{in} је дужина унутрашње ивице, и w је ширина QR. AC и ZZ означавају фотелјасте и цик-цак тип ивица, респективно. Зелени (црвени) кружићи означавају Te(Hg) атоме.

Табела 4.1. Преглед геометријских параметара (d_{out} , d_{in} , w) и броја ивичних атома ($N_{\Sigma,ea}$) за одређени облик и тип наноструктуре. d_{out} означава дужину ивице за QD или дужину спољашње ивице за QR, d_{in} је дужина унутрашње ивице за QR, док је w ширина прстена. AC и ZZ су ознаке за фотелјасте и цик-цак тип ивица, респективно.

Облик	Тип	Граница	$d_{out}(d_{in})$ (nm)	w (nm)	$N_{\Sigma,ea}$
□	Тачка	AC + ZZ	5,03(-)		46
⬡	Тачка	ZZ	3,12(-)		40
□	Прстен	AC + ZZ	5,63(2,53)	1,55	76
⬡	Прстен	ZZ	3,52(1,63)	1,89	68

За моделовање електронских стања у HgTe квантним тачкама и прстеновима уводи се хамилтонијан према моделу јаке везе написан у формализму секундарне квантизације (Slater и Koster, 1954; Shen, 2012):

$$H = \sum_{i,\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_i c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma=\uparrow,\downarrow} t_{i,j} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}. \quad (4.2.1)$$

Са индексом i у једначини (4.2.1) су означена атомска места у кристалној решетки, j се односи на најближе суседне атоме атому i , док су са σ означена електронска стања спина горе (\uparrow) и спина доле (\downarrow), респективно. ϵ_i је матрица “on-site” енергија атома i , док је сопствена спин-орбитна интеракција (скр. SOI; енгл. *Spin Orbit Interaction*) укључена у модел кроз недијагоналне чланове ове матрице (Chadi, 1977). Две овакве матрице су посебно формиране за Те анјон и Hg катјон. $t_{i,j}$ “off-site” матрице описују електронски скок (прелаз) са атома j на атом i (Shen, 2012). $c_{i,\sigma}^\dagger$ и $c_{i,\sigma}$ су оператори креације и аниhilације електрона са спином σ на месту i . У апроксимацији метода јаке везе коришћен је $sp^3d^5s^*$ базисни скуп, а електронски скокови су ограничени на првог најближег суседа. Атоми са мање од две везе су уклоњени из структура. Вредности “on-site” енергија и енергија скокова су представљени у Прилогу 2. У одсуству спољашњег магнетског поља енергије су двоструко дегенерисане, што је последица симетрије засноване на инверзији времена описане у Крамерсовој (хол. *Kramers*) теорему (Klein, 1952).

Утицај магнетског поља је укључен у модел кроз Пајерлсову замену која модификује “off-site” матрицу увођењем фазног помераја који зависи од магнетског вектор потенцијала (Graf и Vogl, 1995; Pertsova и сар., 2015):

$$t_{i,j} \rightarrow t_{i,j} e^{i \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{r}_i^T \mathbf{A} \mathbf{r}_j}, \quad (4.2.2)$$

где је $\Phi_0 = h/e$ квант магнетског флуksа, h је Планкова константа, e је елементарно наелектрисање и \mathbf{A} је магнетски вектор потенцијал. У првој апроксимацији, када су ефекти магнетског поља на стања унутар атома занемарени, ова модификација је инваријантна у односу на калибрацију (Graf и Vogl, 1995; Boukin и сар., 2001). Коришћена је Ландауова калибрација $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ у оквиру које је магнетско поље оријентисано дуж z осе. За електронске скокове са места i на место j , границе интеграла у једначини (4.2.2) се замењују, па је због тога $t_{i,j} = t_{j,i}^\dagger$. Када је спин укључен, својствене енергије стања са спином горе (спином доле) се смањују (повећавају) пропорционално са вредношћу магнетског поља (Graf и Vogl, 1995). С обзиром да нема физичког значаја приликом објашњавања размотрених ефеката, интеракција спољашњег магнетског поља са спинским магнетским диполним моментом електрона није укључена у модел (Pertsova и сар., 2015). Својствене енергије и својствени вектори су пронађени нумерички помоћу PYBINDING софтверског пакета (Moldovan и Peeters, PYBINDING v0.8.0) који врши дијагонализацију једначине (4.2.1).

Густина електронских стања (DOS) QD система је представљена сумом делта функција које су центриране на позицијама својствених енергија система. Квантне тачке се обично производе у ансамблима, где величина тачке не може бити у потпуности контролисана. Ова варијација у величини доводи до појаве нехомогеног ширења спектралних линија оптичке апсорпције или емисије. Да би се описало ово ширење, израз за DOS се модификује

$$\text{DOS}(E) = \sum_n \Gamma(E_n - E), \quad (4.2.3)$$

где је E_n , енергија n -ог стања док је Γ Гаусова (нем. *Gauß*) функција (Yates и сар., 2007; Li и сар., 2017)

$$\Gamma(\Delta E) = \frac{1}{c\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\Delta E)^2}{2c^2}}. \quad (4.2.4)$$

Овако модификован израз за DOS у значајној мери олакшава нумерички рачун оптичке апсорпције. Може се усвојити да је фактор ширења c константан за све зоне (Yates и сар., 2007).

Диполни матрични елемент $\mathbf{P}_{i,j} = \langle j|\mathbf{r}|i\rangle$ између стања i и j је одређен укључивањем само интраорбиталних чланова, што се показало као добра апроксимација у недавним моделима апсорпционог спектра фосфоренских квантних тачака (Li и сар., 2017), као и квантних тачака од силицена и графена (Abdelsalam и сар., 2016). Апсорпција A зависи од матричних елемената, и у складу је са законом о одржању енергије (Abdelsalam и сар., 2016):

$$A(\hbar\omega) = \sum_{i,j} (E_j - E_i) |\boldsymbol{\varepsilon} \mathbf{P}_{i,j}|^2 \Gamma(E_i - E_j + \hbar\omega). \quad (4.2.5)$$

Овде $\hbar\omega$ представља енергију фотона, E_i и E_j су енергије иницијалног и финалног стања, респективно, док је $\boldsymbol{\varepsilon}$ вектор поларизације светлости.

4.3 Резултати и дискусија

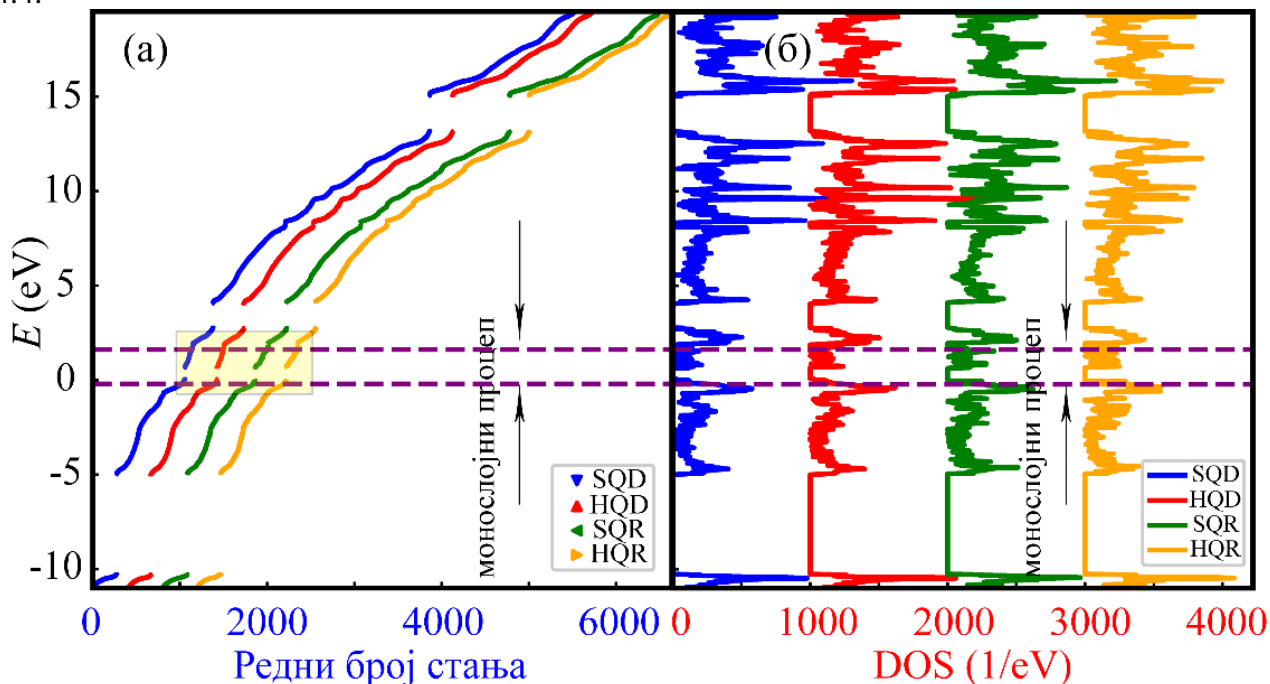
4.3.1 Утицај геометрије, типа наноструктуре и примењених граничних услова

Латералне димензије квантних тачака и прстенова, дате у табели 4.1., су изабране тако да одговарају експериментално реализованим HgTe квантним тачкама које имају пречник у опсегу од 4 nm до 15 nm (Keuleyan и сар., 2011B). Својствене енергије анализираних квантних тачака и прстенова у одсуству магнетског поља су приказане на сл. 4.3 (а). Зависност густине електронских стања од енергије за четири типа структура је израчуната коришћењем исте вредности фактора ширења $c = 10 \text{ meV}$ (Li и сар., 2017) и представљена је на сл. 4.3 (б).

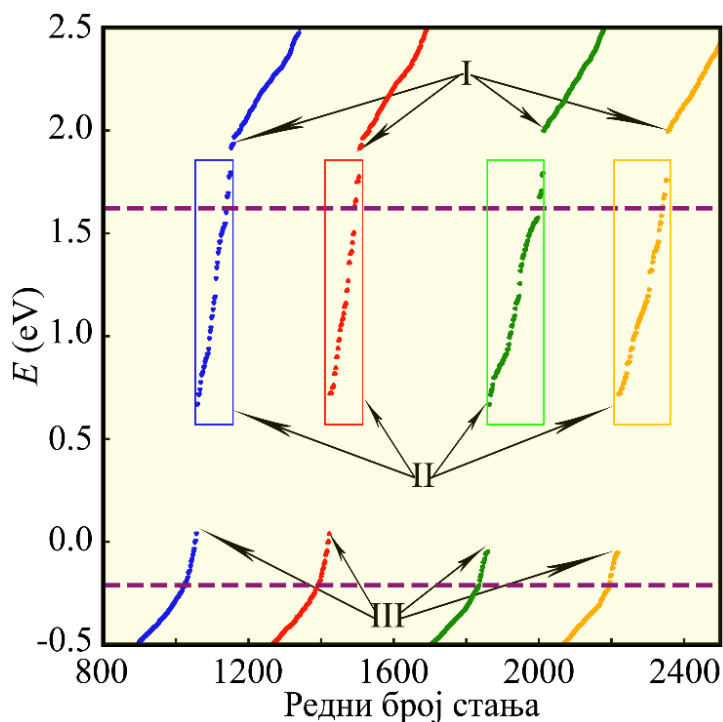
На сл. 4.3 (а) се може видети да енергетски нивои сва четири система варирају слично са променом редног броја стања. Детаљно је размотрен део спектра унутар фундаменталног енергетског процепа за монослој HgTe бесконачних латералних димензија (2Д HgTe). Он се јавља између Γ_4 проводне зоне и $\Gamma_{5,6}$ валентних зона (Li и сар., 2015). Овај процеп има вредност од 1,82 eV и означен је хоризонталним љубичастим испрекиданим линијама на сл. 4.3 (а). У HgTe QD и QR структурама не постоје континуалне зоне, али се са сл. 4.3 (а) може видети да су дискретна стања организована у *квазизоне*. Пронађено је укупно пет квазизона у опсегу од -11 eV до $19,5 \text{ eV}$. Овде је важно напоменути, да је за почетак енергетске скале узет врх валентне зоне 2Д HgTe.

У енергетским процепима између квазизона густина електронских стања исчезава и, услед квантног конфинирања, вредности ових процепа су веће од вредности фундаменталног енергетског процепа (видети табелу 4.2). Такође, са сл. 4.3 (б) се може видети да DOS поседује оштре пикове у околини екстремума квазизона. Пикови густине електронских стања су сличног положаја и интензитета код свих типова наноструктура. Ипак, постоје уочљиве разлике стања унутар енергетског процепа што се може видети са сл. 4.4. Овај део спектра је за све четири структуре популисан ивичним стањима, која су слична ивичним стањима пронађеним у силиценским, германенским и фосфоренским квантним тачкама и прстеновима

(Li и сар., 2017; Jakovljević и сар., 2017). Ова стања су означена са римским бројем II на сл. 4.4.



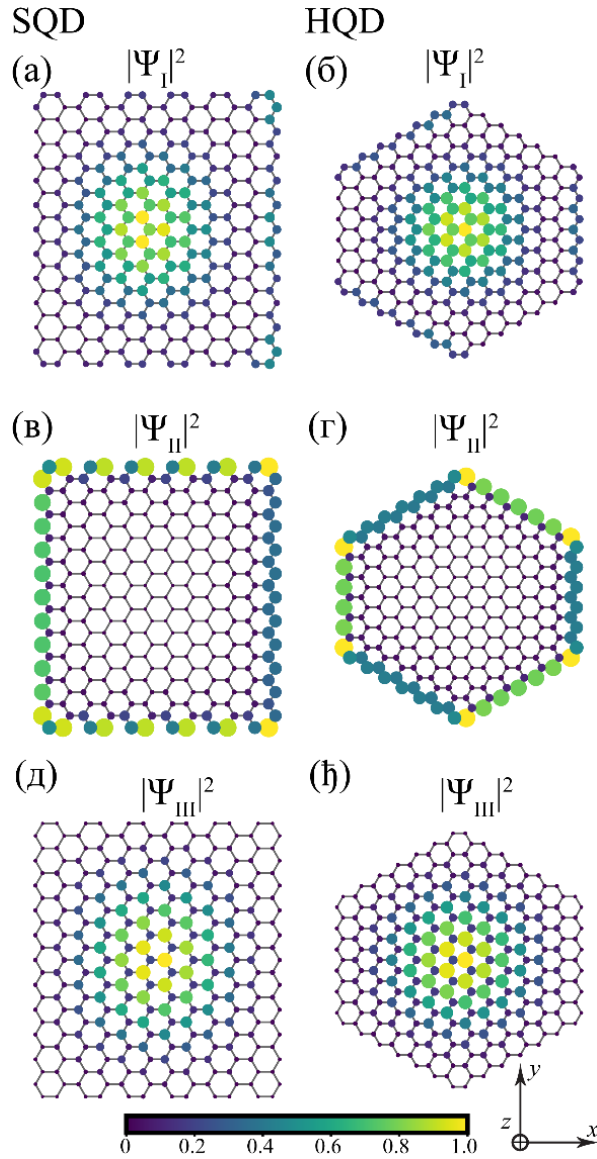
Слика 4.3. (а) Дистрибуција енергетских нивоа у S(H)QD и S(H)QR наноструктурама у зависности од редног броја стања n . Резултати за различите структуре су померени за $\Delta n = 400$. Део енергетског спектра који одговара енергетском процепу 2Д HgTe је означен са хоризонталним испрекиданим линијама љубичасте боје. (б) Варијација густине електронских стања са енергијом у S(H)QD и S(H)QR наноструктурама. Резултати за различите структуре су померени за 1000 eV^{-1} .



Слика 4.4. Детаљан приказ енергетских нивоа који су на сл. 4.3 (а) осенчени жутим правоугаоником. Густина електронских стања за неколико одабраних стања која су означена римским бројевима I, II и III је приказана на сл. 4.5 и сл. 4.6.

Табела 4.2. Вредности енергетског процепа (дате у јединицама eV) у S(H)QD и S(H)QR структурама.

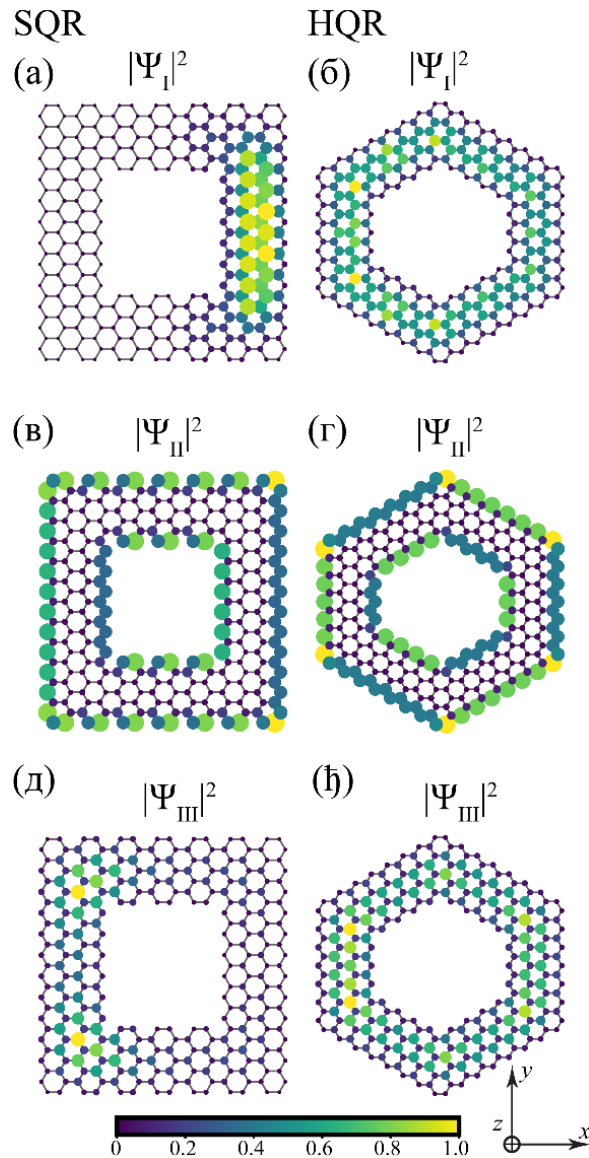
$E_{g,SQD}$	$E_{g,HQD}$	$E_{g,SQR}$	$E_{g,HQR}$
1,875	1,876	2,046	2,048



Слика 4.5. Густина вероватноће налажења за стање са дна проводне зоне, ивичних стања и стања са врха валентне зоне у SQD и HQD која су означена римским бројевима I, II и III на сл. 4.4 када је магнетско поље једнако нули. Горњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски најнижег стања из проводне зоне $|\Psi_I|^2$ у (а) SQD и (б) HQD. Средњи панел: Сума густина вероватноћа налажења $|\Psi_{II}|^2$ ивичних стања у (в) SQD и (г) HQD. Доњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски највишег стања из валентне зоне $|\Psi_{III}|^2$ у (д) SQD и (ђ) HQD.

Иако су ивична стања пронађена у свим структурама, постоје извесне разлике у њиховим особинама које у значајнијој мери одређују оптичка својства анализираних структура. Ове разлике ће у наставку бити детаљно испитане. У циљу илустрације различитих типова електронске локализације, на сл. 4.5 и сл. 4.6 је приказано неколико стања из квазизона S(H)QD и S(H)QR, које се налазе у околини енергетског процепа 2Д HgTe. Ова стања су

означена римским бројевима I и III на сл. 4.4. Изабрана стања имају енергије унутар енергетског процепа 2Д HgTe. На горњем панелу сл. 4.5 и сл. 4.6 је приказана густина вероватноће налажења енергетски најнижег стања из проводне зоне $|\psi_I|^2$ у S(H)QD и S(H)QR наноструктурама, редом. Сума густина вероватноћа налажења $|\Psi_{II}|^2$ ивичних стања је приказана на средњем панелу (сл. 4.5 (в, г) и сл. 4.6 (в, г)), док је на доњем панелу представљена густина вероватноће налажења енергетски највишег стања из валентне зоне $|\psi_{III}|^2$ (сл. 4.5 (д, ђ) и сл. 4.6 (д, ђ)).



Слика 4.6. Густина вероватноће налажења за стање са дна проводне зоне, ивичних стања и стања са врха валентне зоне у SQR и HQR која су означена римским бројевима I, II и III на сл. 4.4 када је магнетско поље једнако нули. Горњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски најнижег стања из проводне зоне $|\psi_I|^2$ у (а) SQR и (б) HQR. Средњи панел: Сума густина вероватноћа налажења $|\Psi_{II}|^2$ ивичних стања у (в) SQR и (г) HQR. Доњи панел: Густина вероватноће налажења енергетски највишег стања из валентне зоне $|\psi_{III}|^2$ у (д) SQR и (ђ) HQR.

Са сл. 4.5 и сл. 4.6 се може видети да су електронска стања из проводне и валентне зоне локализована по већем делу површине тачке (прстена) и због те особине ова стања су означена као *балковска* стања. Са друге стране, стања приказана на сл. 4.5 (в, г) и сл. 4.6 (в, г)

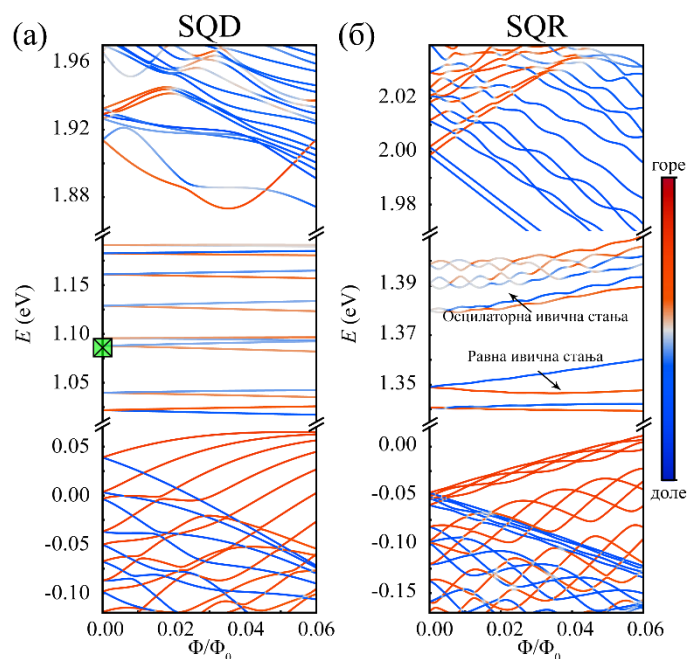
су тзв. *ивична* стања чија је таласна функција локализована по ивицама тачке и прстена. Пошто ивична стања имају енергије унутар енергетског процепа 2Д HgTe зову се још и стања унутар процепа (енгл. *in-gap states*). Лако се може показати да је број ових стања једнак збиру ивичних Hg и Te атома. Како квантни прстенови имају већу дужину спољашњих ивица у односу на квантне тачке исте површине, број ивичних стања у прстеновима је већи. У свим случајевима ивична стања су доминантно локализована на Te атомима (видети средњи панел сл. 4.5 и сл. 4.6). То је последица веће Полингове (енгл. *Pauling*) електронегативности Te у односу на Hg (Zheng и сар., 2015). Са сл. 4.5 и сл. 4.6 се уочава да су ивична стања локализована и на ZZ и на AC ивицама.

4.3.2 Утицај нормалног магнетског поља

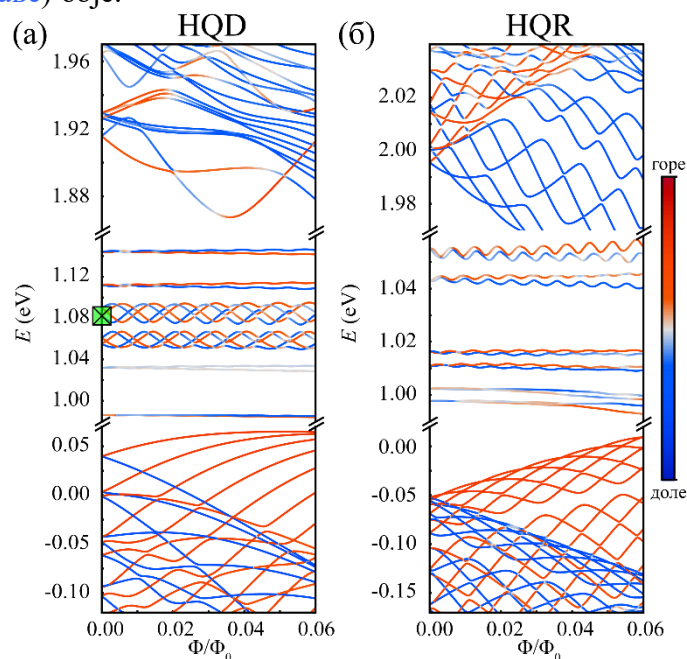
На сл. 4.7 и сл 4.8 је приказано како нормално магнетско поље утиче на енергетски спектар размотрених наноструктура. Варијације енергетских нивоа са магнетским флуksom Φ у SQD и SQR су дате на сл. 4.7 (а) и 4.7 (б), док су на сл. 4.8 (а) и 4.8 (б) приказана стања из HQD и HQR наноструктура, респективно. За дату вредност магнетског поља рачунат је флуks кроз површину примитивне ћелије 2Д HgTe и та вредност је скалирана (подељена) са једним квантом флуksа Φ_0 . Површина примитивне ћелије је иста за све размотрене морфологије и овако дефинисано Φ омогућава конзистентан приступ приликом поређења различитих структура. Овакав приступ се често користи (видети нпр. референцу, Li и сар., 2017), иако Φ_0 одговара великој вредности магнетског поља ($\Phi/\Phi_0 = B/22936$ T).

Када се примени магнетско поље долази до нарушавања симетрије засноване на инверзији времена. Због тога долази до разбијања спинске дегенерације и таласна функција сваког стања представља суперпозицију таласних функција спина горе и спина доле. Удео стања са спином горе (доле) у укупној таласној функцији је означен различитим нијансама од загасито **црвене** (када је стање спина горе), до тамно **плаве** боје (када је стање спина доле). Променом вредности магнетског флуksа, енергије стања супротних спинова се антиукрштају (Jakovljević и сар., 2017), приликом чега долази до измене доминантне спинске компоненте између стања. У квантној тачки већих димензија, утицај конфинирајућег потенцијала на електроне је мањи у поређењу са магнетским пољем. У овом случају енергетски нивои конвергирају ка Ландауовим нивоима 2Д система (Li и сар., 2017) што се може видети на сл. 4.7 и сл 4.8. Додатно, са сл. 4.7 (а) се може видети да се балковска и ивична стања различито понашају у присуству нормалног магнетског поља. То је због тога што је електронска таласна функција локализована на површини чија је димензија много мања у поређењу са магнетском дужином $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$ и магнетско поље не може у значајној мери да помери енергетске нивое. На пример, магнетском пољу јачине $B = 10$ T, одговара магнетска дужина $l_B = 5,73$ nm, док је ивично стање локализовано на растојању чија је димензија упоредива са параметром кристалне решетке HgTe. Управо из овог разлога енергије ивичних стања се веома слабо мењају са променом магнетског поља, и дијаграм зависности њихових енергија од магнетског поља је представљен равним линијама. Такође, Земаново спинско цепање је скоро незнатно за опсег вредности магнетског поља који је представљен на сл. 4.7 и сл 4.8.

Поређењем сл. 4.7 (а) и 4.7 (б) установљено је неколико битних разлика у понашању енергетских стања SQR структуре у односу на SQD структуру када је присутно магнетско поље. Прво, за балковска стања из SQR се примећују АВ осцилације, што није својство SQD система. Период ових осцилација приближно одговара једном кванту флуksа који пенетрира кроз површину једнодимензионог кружног прстена површине $A_{eff} = (d_{in}^2 + d_{out}^2)/2$. Друго, одређена ивична стања из SQR у значајној мери осећају утицај магнетског поља, и њихове енергије осцилују са променом вредности магнетског поља слично као и енергије балковских стања. Период ових осцилација зависи од ширине и величине прстена.

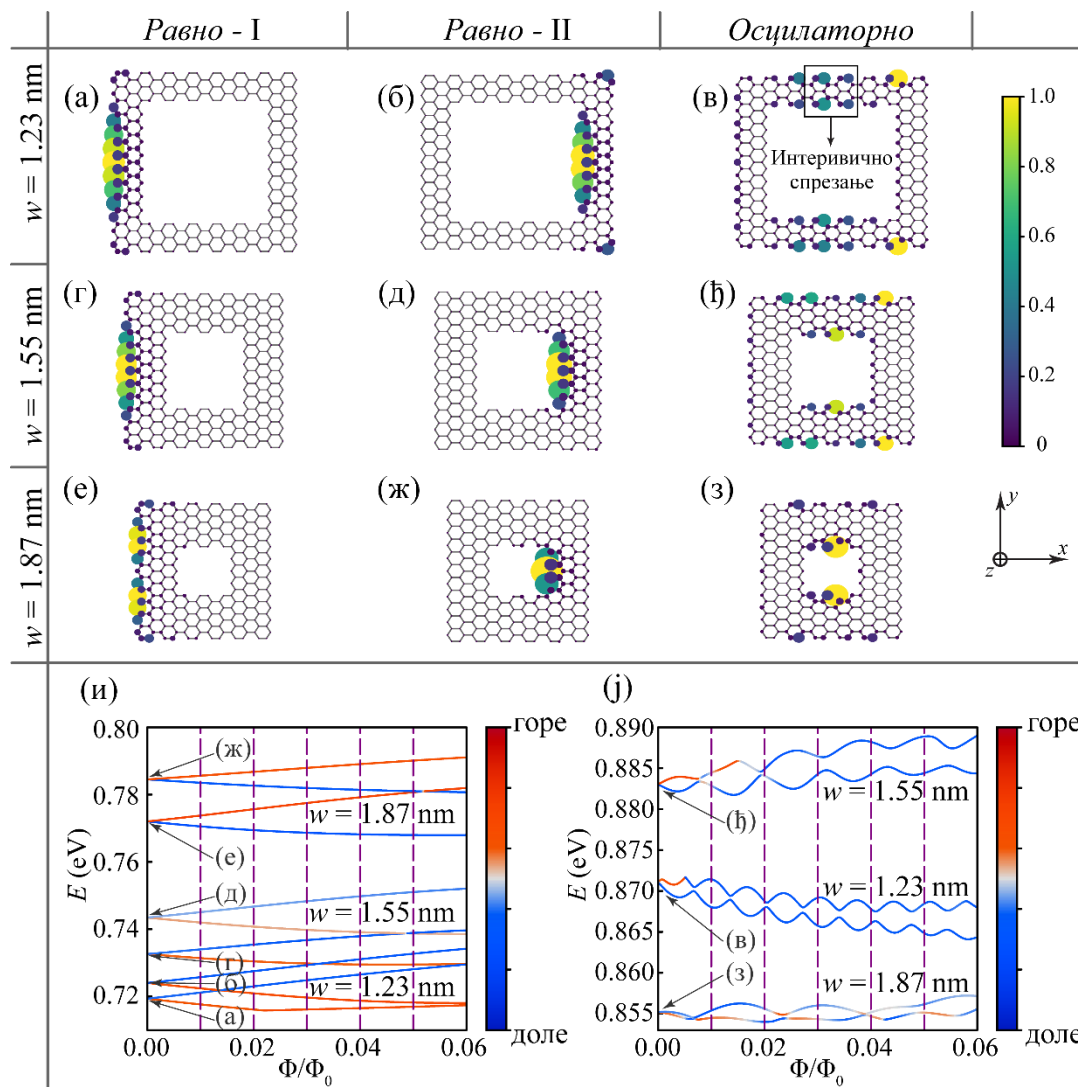


Слика 4.7. Зависност енергетских нивоа од нормалног магнетског поља у **(а)** SQD и **(б)** SQR. Горњи панел приказује електронска стања са дна проводне зоне, средишњи панел приказује ивична стања, док су на доњем панелу представљена стања са врха валентне зоне. Стање спина горе је **загасито црвене** боје, док је стање спина доле **тамно плаве** боје. Спински мешана стања са доминантним уделом стања спина горе (доле) су приказана различитим нијансама **црвене** (**плаве**) боје.



Слика 4.8. Зависност енергетских нивоа од нормалног магнетског поља у **(а)** HQD и **(б)** HQR. Горњи панел приказује електронска стања са дна проводне зоне, средишњи панел приказује ивична стања, док су на доњем панелу представљена стања са врха валентне зоне. Стање спина горе је **загасито црвене** боје, док је стање спина доле **тамно плаве** боје. Спински мешана стања са доминантним уделом стања спина горе (доле) су приказана различитим нијансама **црвене** (**плаве**) боје.

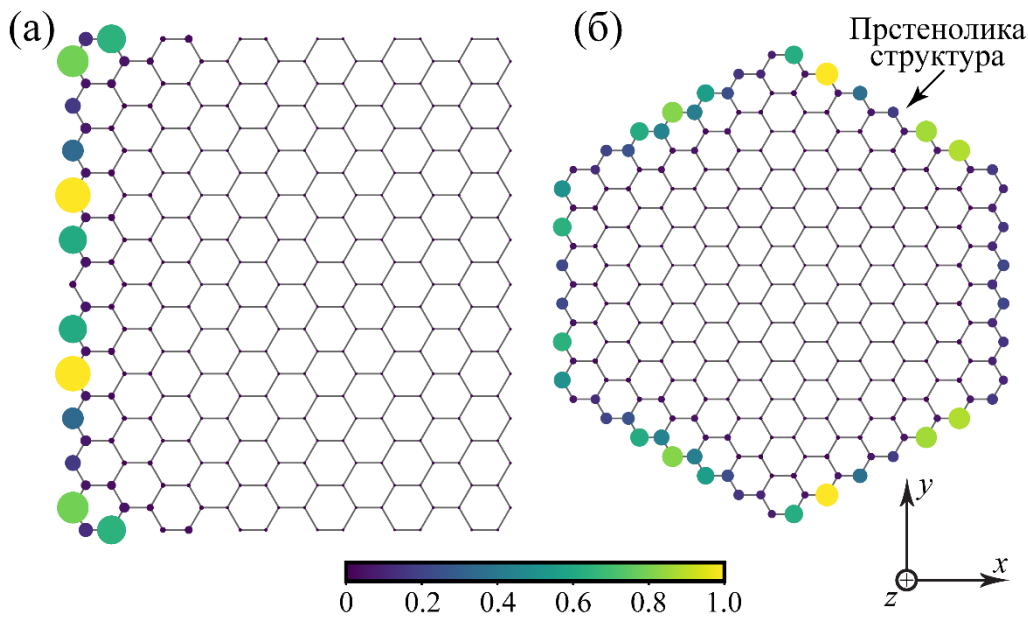
Анализирани су прстенови који имају апроксимативно исту површину S , али су различите ширине. На сл. 4.9 (а)-4.9 (з) је приказана густина вероватноће налажења репрезентативних спинских дублета у (а-в) 1,23-, (г-ђ) 1,55- и (е-з) 1,87 nm широким квадратним прстеновима. Могуће је приметити да дијаграми са слике нису симетрични у односу на операцију ротације за $\pi/2$ или π рад око осе која пролази кроз центар прстена и ортогонална је на његову раван.



Слика 4.9. Густина вероватноће за случај када је магнетско поље једнако нули за два равна ивична стања (означена са *Равно-I* и *Равно-II*) и једног осцилаторног ивичног стања (означено са *Осцилаторно*) у (а-в) 1,23-, (г-ђ) 1,55- и (е-з) 1,87-nm широком SQR. (и) Енергетски нивои за *Равно-I* и *Равно-II* ивична стања у функцији нормалног магнетског поља за SQR ширине 1,23-, 1,55- и 1,87-nm. Спин горе (спин доле) стања су представљена **црвеном** (**плавом**) линијом. (ј) Зависност енергетских нивоа осцилаторног ивичног стања од нормалног магнетског поља у 1,23-, 1,55- и 1,87 nm широким прстеновима. Спин горе (спин доле) стања су представљена **црвеном** (**плавом**) линијом.

Таласна функција стања која су приказана на левом панелу је локализована на спољашњој (левој) цик-цак ивици за све три вредности ширине прстена (видети сл. 4.9 (а), 4.9 (г) и 4.9 (е)). Стања која су по енергији најближа овим стањима су локализована по десној унутрашњој ивици (видети сл. 4.9 (б), 4.9 (д) и 4.9 (ж)). За ова стања је очигледно да не постоји циркулација таласних функција дуж ивица прстенова без обзира на њихову ширину.

Када се примени нормално магнетско поље, дијаграми својствених енергија ових стања са променом вредности флукса су готово равне линије, што се може и видети на сл. 4.9 (и). Због тога су стања која су приказана на овој слици означена као *равна ивична стања*. Са друге стране, дијаграми густине вероватноће налажења који су приказани на десном панелу (сл. 4.9 (в), 4.9 (ђ) и 4.9 (з)) указују на делимично делокализовану таласну функцију, при чему је локализација присутна на више од једне ивице. У овом случају, својствене енергије осцилују са магнетским пољем што се може видети на сл. 4.9 (ј). С обзиром да је електрон у овом стању локализован и на спољашњим и на унутрашњим ивицама, сматра се да су наспрамне ивице дуж прстена спрегнуте. Са сл. 4.9 се примећује да је спрезање јаче уколико је прстен ужи, приликом чега ивично стање постаје више делокализовано. Период осцилација се повећава са повећањем ширине прстена и апроксимативно износи $0,007\Phi_0$, $0,011\Phi_0$ и $0,013\Phi_0$ у 1,23-, 1,55- и 1,87 nm широким прстеновима, респективно. С обзиром да сви прстенови имају приближно исти број атома, може се закључити да што је прстен ужи, већа је површина коју затвара, па самим тим долази и до повећања магнетског флукса кроз прстен. Због тога период осцилација ивичних стања опада. Период осцилација балковских стања се мења на сличан начин као и период осцилација ивичних стања са променом ширине прстена. Додатно, осцилације енергија у ужим прстеновима имају правилнији облик што се јасно види на сл. 4.9 (и). Површина коју затвара таласна функција ивичног стања је нешто већа у односу на балковска стања. Због тога је период АВ осцилација ивичних стања нешто мањи у поређењу са периодом балковских стања.



Слика 4.10. Густина вероватноће налажења за (а) равно ивично стање из SQD и (б) за осцилаторно ивично стање из HQD. Енергије приказаних стања су означене зеленим квадратима на сл. 4.7 (а) и 4.8 (а).

Зависност својствених енергија HQD и HQR наноструктура од магнетског поља је представљена на сл. 4.8 (а) и 4.8 (б), респективно. Поређењем сл. 4.7 (а) и 4.8 (а) се може видети да енергије балковских стања из SQD и HQD структура имају квалитативно сличну зависност од B . То је последица једноструке повезаности и готово истог броја атома у оба система. Такође, стања у HQD имају тенденцију конвергирања ка Ландауовим нивоима за веће вредности магнетског поља. Ипак, ивична стања у HQD испољавају одређена специфична својства јер нека ивична стања осцилују са магнетским пољем слично као и у SQR структури. Ово може бити објашњено поређењем стања у одсуству магнетског поља, која су означена зеленим квадратима на сл. 4.7 (а) и 4.8 (а) и чије таласне функције су

представљене на сл. 4.10 (а) и 4.10 (б). Са сл. 4.10 (а) се види да је стање у SQD локализовано само дуж једне ZZ ивице квадрата, док је таласна функција стања HQD приказана на сл. 4.10 (б) дистрибуирана дуж свих ивица хексагона. Оваква таласна функција која је делокализована дуж ивица хексагона је одговорна за појаву АВ осцилација у HQD, док осцилације ивичних стања у SQD структури нису присутне.

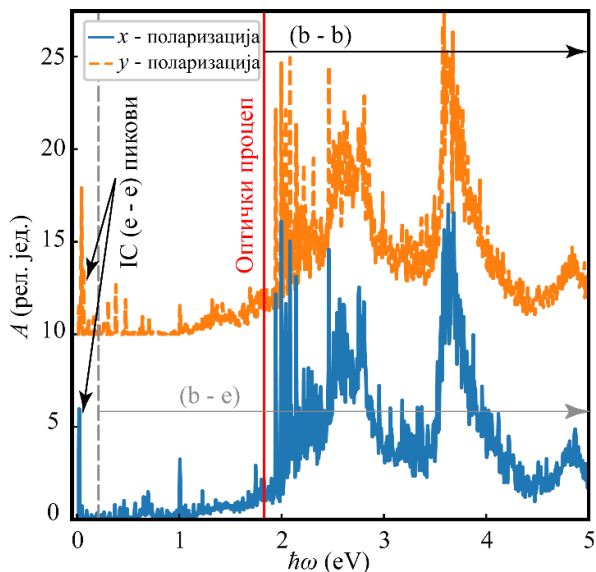
Случај HQR структуре који је приказан на сл. 4.8 (б) је сличан SQR случају са сл. 4.7 (б), чиме се показује да је понашање и балковских и ивичних стања у магнетском пољу повезано са топологијом. У HQR структури је пронађено да су таласне функције свих стања локализоване у близини ивица и да балковска стања испољавају АВ осцилације. Такође, ивична стања у HQR поседују таласне функције које су локализоване на одређеним местима дуж ивице или су делокализоване дуж свих ивица структуре. Енергије ивичних стања која су делокализована дуж свих ивица осцилују у присуству магнетског поља. Осцилације и балковских и ивичних стања из HQR су правилније у поређењу са SQR структуром (видети сл. 4.7 (б) и 4.8 (б)). То је због тога што се облик HQR не разликује много од кружног прстена у којем се осцилације дешавају са фиксним периодом.

4.3.3 Оптичка апсорпција у присуству магнетског поља

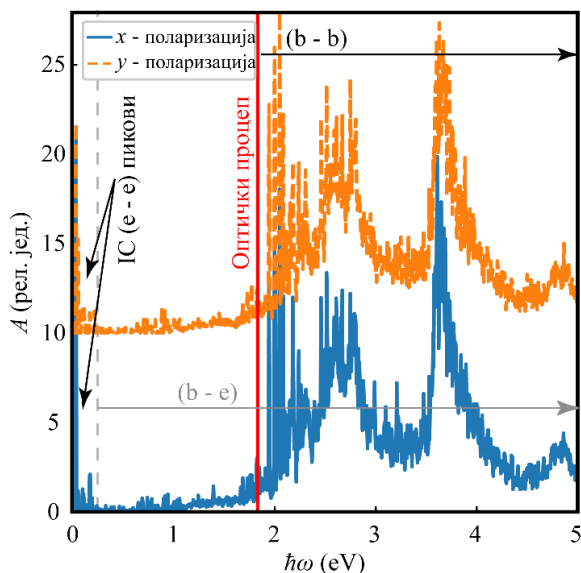
Показано је да електронска стања 2Д HgTe квантних тачака и прстенова имају одређене специфичности које су повезане са особинама материјала, обликом структуре и топологијом. Ова електронска стања утичу на оптичку апсорпцију. С обзиром да све четири структуре имају и балковска и ивична стања, оптичка апсорпција може настати услед (i) прелаза између балковских стања, означених са b-b; (ii) прелаза између балковских и ивичних стања, скраћено означених са b-e и (iii) e-e прелаза који се одвијају само између ивичних стања. Претпостављено је да је Фермијев (итал. *Fermi*) ниво апроксимативно позициониран на средини енергетског процепа између проводне и валентне зоне и његова вредност је $E_F \cong 0,9 \text{ eV}$ за SQD структуру и $E_F \cong 1,07 \text{ eV}$ за HQD структуру, тако да Фермијев ниво пролази кроз квазизону ивичних стања. Са сл. 4.11 и сл. 4.12 се може видети да највећи апсорпциони пик за SQD и HQD настаје услед прелаза између стања у околини Фермијевог нивоа. Овде је претпостављено да су апсорпционе линије проширене за 2 meV, као у референци (Abdelsalam и сар., 2016), док је узето да је температура $T = 0 \text{ K}$.

Оптичка апсорпција је израчуната у одсуству спољашњег поља за случај светлости која је поларизирана дуж x и y оса. За оба поларизациона правца апсорпција је израчуната за енергије фотона у опсегу од 0 до 5 eV. Када је магнетско поље једнако нули, спектар оптичке апсорпције има сличан облик за све четири наноструктуре (упоредити на пример сл. 4.11 и сл. 4.12). Квалитативне сличности су последица (1) високе раванске симетрије структура, (2) позиције Фермијевог нивоа на средини између проводне и валентне квазизоне, (3) приближно истог броја атома и ивичних стања у свим структурама и (4) локализације ивичних стања и на AC и на ZZ ивицама. Због тога све четири структуре имају сличну e-e оптичку апсорпцију за обе поларизације. Оптичка апсорпција SQD структуре у одсуству магнетског поља (видети сл. 4.11) има одређене сличности и разлике са апсорпционим спектром фосфоренских квадратних квантних тачака који је израчунат у референци (Li и сар., 2017). Разлике су последица различитих енергетских процепа два материјала. Фосфорен поседује велики енергетски процеп и ивична стања су енергетски удаљена од проводне и валентне зоне. С обзиром на то, b-b, b-e и e-e прелази су добро раздвојени. У анализираним HgTe квантним тачкама и прстеновима, ивична стања су енергетски знатно ближа проводној и валентној зони. Због тога се апсорпционе линије које потичу од различитих типова прелаза преклапају између себе. И поред тога, чак и за случај HgTe могуће је одредити позицију оптичког апсорпционог процепа. Оптички процеп, грубо гледано, раздваја опсеге где настају b-b прелази са једне стране и где настају b-e и e-e прелази са друге стране (видети сл. 4.11). Услед сличне локализације балковских стања, која доводи до израженог преклапања између

таласних функција, b-b пикови имају знатно веће амплитуде у поређењу са b-e и e-e пиковима. Такође, уочени су високи e-e пикови на приближно 25 meV за x поларизацију и на 50 meV за y поларизацију упадне светлости. За разлику од SQD, услед симетрије HQD структуре у оба правца x-y равни, позиције e-e пикова су приближно исте (29 meV) за обе поларизације (видети сл. 4.12).

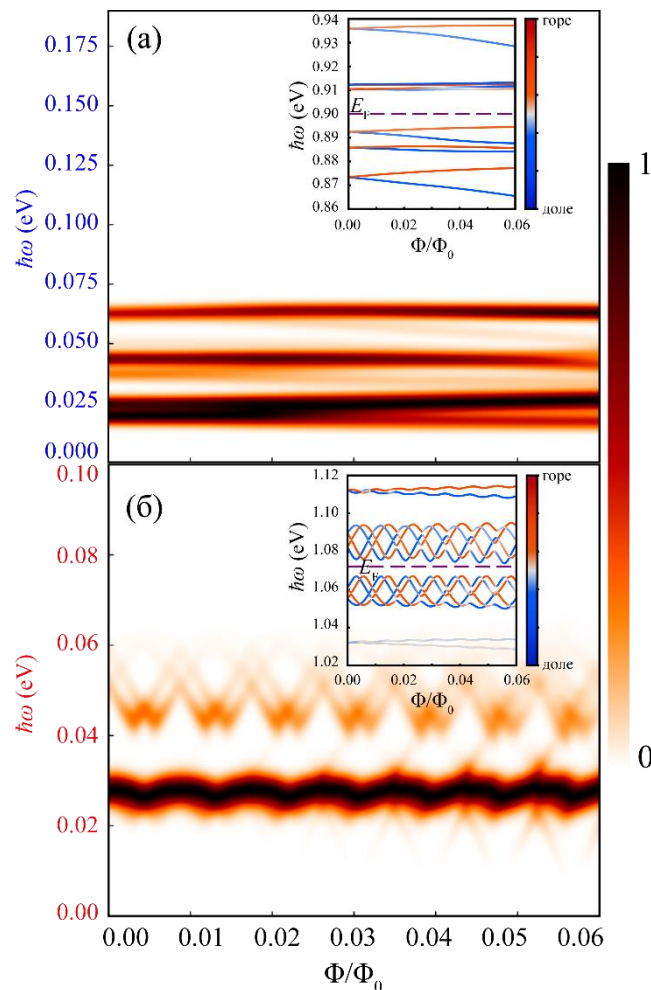


Слика 4.11. Спектар оптичке апсорпције за SQD наноструктуру у одсуству спољашњих поља за x и y поларизације. Резултати за y поларизацију су на слици померени за 10 релативних јединица. **Црвена** вертикална линија означава фундаментални процеп, док **сива** вертикална испрекидана линија означава минимум енергије која је потребна за (b-e) транзицију. На слици су назначени енергетски опсежи за (b-b) и (b-e) транзиције као и доминантни (e-e) пикови за обе поларизације светлости. Фермијев ниво износи $E_F = 0,9$ eV.



Слика 4.12. Спектар оптичке апсорпције за HQD наноструктуру у одсуству спољашњих поља за x и y поларизације. Резултати за y поларизацију су на слици померени за 10 релативних јединица. **Црвена** вертикална линија означава фундаментални процеп, док **сива** вертикална испрекидана линија означава минимум енергије која је потребна за (b-e) транзицију. На слици су назначени енергетски опсежи за (b-b) и (b-e) транзиције као и доминантни (e-e) пикови за обе поларизације светлости. Фермијев ниво износи $E_F = 1,07$ eV.

Анализирани оптички спектар показује изражене разлике у поређењу са експерименталним резултатима који су претходно публиковани за 3Д колоидне квантне тачке, иако су њихове димензије упоредиве са димензијама размотрених наноструктура (Keuleyan и сар., 2011А). Колоидне квантне тачке се ефективно састоје од већег броја слојева 2Д HgTe (Keuleyan и сар., 2011В) па је њихов енергетски процеп мањи у поређењу са тачкама које су формиране од монослоја HgTe. С обзиром да је таласна функција у 3Д случају проширена на више HgTe слојева, апсорпциона ивица на нижим енергијама за колоидну квантну тачку је постављена ниже у односу на енергетски најнижи b-b прелаз у анализираној квадратној квантној тачки. Чак шта више, прелази који се одвијају између ивичних стања и осталих стања у анализираном 2Д систему проширују апсорпциони спектар до таласне дужине од 50 μm . Ова вредност је у значајној мери већа од експериментално добијене границе за апсорпцију колоидних квантних тачака, која износи 5 μm за тачку чији је просечни дијаметар 10,5 nm (Keuleyan и сар., 2011В).



Слика 4.13. Контурни цртеж зависности амплитуде оптичке апсорпције која настаје услед прелаза између (а) равних ивичних стања у SQD и (б) осцилаторних ивичних стања у HQD од магнетског поља и енергије апсорпције. Овде је апсорпција израчуната као средња вредност апсорпција за x и y поларизације и скалирана тако да њен максимум одговара јединици. Умечи на сликама приказују енергетска стања око Фермијевог нивоа која значајно доприносе оптичком спектру.

Коначно, сада ће бити размотрен утицај спољашњег магнетског поља на е-е прелази у SQD и HQD структурама. Са сл. 4.13 (а) и 4.13 (б) се може видети да се апсорпциони спектри у овим структурама у значајној мери разликују. Овде је апсорпција израчуната као средња

вредност обе поларизације и скалирана је тако да њен максимум одговара јединици. Евидентно је да енергије прелаза варирају са магнетским пољем на сличан начин као и енергије ивичних стања. У SQD структури прелази се дешавају између равних ивичних стања, па се на сл. 4.13 (а) апсорпциони пикови готово не мењају са променом вредности магнетског поља. Са друге стране, прелази између осцилаторних ивичних стања су представљени на сл. 4.13 (б). Енергије прелаза које одговарају апсорпционим пиковима осцилују у присуству магнетског поља. Такође, пронађено је да је интензитет апсорпције веома осетљив на магнетско поље, и да се е-е апсорпција може у значајној мери контролисати варирањем вредности магнетског поља.

4.4 Сажетак

У овој глави су израчунате својствене енергије и таласне функције квадратних и хексагоналних квантних тачака и квантних прстенова сачињених од монослоја HgTe, коришћењем $sp^3d^5s^*$ базисног скупа у моделу јаке везе. Дискретна стања у анализираним системима су у одређеним опсезима груписана у квазизоне те их називамо балковска стања. Између појединих квазизона се могу уочити јасно издвојена стања у процепу. Локализација ових стања је дуж ивица структуре, због чега су названа ивична стања. Балковска стања супротних спинова се антиукрштају у присуству магнетског поља, док су ивична стања доминантно локализована на ивичним Те атомима. Енергија ивичних стања у квадратним квантним тачкама готово не зависи од магнетског поља. Са друге стране, одређена ивична стања у квантним прстеновима су делокализована по ивицама прстена и њихови енергетски нивои осцилују са променом магнетског флукса. Овај ефекат је сличан Ахаронов-Бомовим осцилацијама балковских стања у квантним прстеновима, али је пронађено да је период осциловања ивичних стања нешто мањи. Ово се може објаснити мањом ефективном површином коју затвара таласна функција балковског стања у поређењу са површином коју заклапа таласна функција ивичног стања. Сличне осцилације ивичних стања су пронађене и у хексагоналним квантним тачкама. Прелази између балковских стања из проводне и валентне квазизоне доминирају апсорпционим спектром анализираних наноструктура. Међутим, у инфрацрвеној области је пронађен висок апсорпциони пик који потиче од прелаза између ивичних стања. Додатно, осцилаторна ивична стања испољавају осцилаторну варијацију позиције и амплитуде апсорпционих пикова са променом вредности нормалног магнетског поља.

5. Закључак

У овој докторској дисертацији су испитана електронска и оптичка својства живателурида (хемијска ознака: HgTe) наноструктура у присуству електричног и магнетског поља. Анализирани су особине асиметричних двоструких HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама у којима долази до акумулације електрона у форми „дводимензионог“ електронског гаса. Истраживање је проширено и на квази-нултодимензионе наноструктуре типа HgTe квантне тачке и квантног прстена у којима је кретање електрона ограничено у сва три просторна правца. По први пут у литератури формиран је модел електронске структуре дводимензионих (2Д) HgTe квантних тачака и прстенова. Израчунавање електронских особина за асиметричне двоструке HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантне јаме је спроведено помоћу вишезонске **k · p** теорије (Luttinger и Kohn, 1955), док је електронска структура 2Д HgTe квантних тачака и прстенова различите геометрије моделована коришћењем емпиријског метода јаке везе (Slater и Koster, 1954).

Електронске и оптичке особине наноструктура које се базирају на HgTe у многоме зависе од коришћених технолошких процедура за њихову производњу. Због тога је у првом делу дисертације извршен детаљан преглед и систематизација релевантне литературе која се односи на:

- методе нарастања масивних Cd_xHg_{1-x}Te узорака (с обзиром да се ови узорци често користе као супстрати за реализацију HgTe наноструктура),
- епитаксијалне технике раста слојевитих наноструктура (помоћу којих је могућа експериментална реализација асиметричних двоструких HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te квантних јама) и
- процедуре за синтезу квантних тачака у колоидним растворима (за синтезу HgTe квази-нулто димензионих наноструктура).

Пошто особине размотрених наноструктура зависе и од конститутивних једињења, у првом делу су представљене електронске особине HgTe и CdTe, као и општа својства тернарне Cd_xHg_{1-x}Te легуре.

У другом делу дисертације прво је објашњено како се формира модел једночестичних стања за наноструктуру типа квантне јаме, који је заснован на вишезонској **k · p** теорији. Посматрано је кретање електрона у периодичном потенцијалу кристала. Анализирани су **k · p** модел за случај масивног полупроводника у оквиру којег је укупна таласна функција приказана као линеарна комбинација Блохових таласних функција у центру Брилуенове зоне. Размотрен је коначан број Блохових функција док је утицај осталих зона урачунат помоћу Левдинове пертурбационе теорије. Онда је представљен осмозонски Кејнов **k · p** модел и објашњено је како се у оквиру овог модела укључују ефекти напрезања, спољашњег електричног и спољашњег магнетског поља. Коришћењем теорије анвелопних функција у оквиру формализма **k · p** теорије моделована је HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te хетероструктура нанометарских димензија у којој су електронска стања измењена појавом зонског офсета на границама хетероспојева и спољашњим електромагнетским пољем. Проблеми на стрмим границама хетероспојева су решени применом Бартових симетризационих правила. Такође, објашњено је како се у оквиру вишезонске **k · p** теорије моделује утицај спин-орбитне интеракције коришћењем теорије пертурбација независних од времена. Ово је поготово важно приликом разматрања структура базираних на HgTe једињењу које се састоји од тешких Hg и Te атома у којима доминирају релативистички ефекти.

Поред анализе поступка формирања вишезонског **k · p** модела, у другом делу дисертације представљен је метод јаке везе за моделовање електронске структуре 2Д HgTe квантних тачака и прстенова. Помоћу емпиријског метода јаке везе описана је зонска структура 2Д HgTe квантних тачака и прстенова у целој Брилуеновој зони. У овом методу таласна функција електрона у полупроводнику је представљена као линеарна комбинација атомских орбитала изолованих атома. Представљен је метод јаке везе за полупроводничке

кристале. Објашњено је како се формира једночестични хамилтонијан у наноструктурама са сфалеритном кристалном решетком, на основу којег се одређују својствене таласне функције и својствене енергије. Уведена је двоцентарска апроксимација (Slater и Koster, 1954) и објашњен је поступак укључивања спин-орбитне интеракције у оквиру формализма метода јаке везе коришћењем Чадијеве процедуре (Chadi, 1977).

У трећем делу је анализирана асиметрична двострука $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантна јама са $[001]$ оријентацијом. За моделовање електронске структуре је коришћен осмозонски Кејнов $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел у којем је описано спрезање проводне зоне, зоне тешких и лаких шупљина и зоне отцепљене услед спин-орбитне интеракције. Електронске особине су испитане у случају када је присутно спољашње електрично поље које је нормално оријентисано у односу на квантну јаму. Пронађена су специфична стања која се карактеришу укупним угаоним моментом $j=3/2$. При одређеним димензијама квантних јама примећено је формирање посебне металне фазе у асиметричној двострукој $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантој јами која поседује својства слична двослојном графену. Показано је да се енергетски процеп између стања са угаоним моментом $j=3/2$ може отворити променом односа ширина јама чак и у одсуству електричног поља. Величина процепа у асиметричној двострукој $\text{HgTe}/\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ квантној јами је подешавана променом димензија једне од квантних јама и контролом моларног удела Cd у $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ легури. Установљена је просторна раздвојеност електронских и шупљинских стања. Ефекат трансфера наелектрисања у анализираној структури и израчунавање тачне вредности уграђеног електричног поља у оквиру самосагласног поступка решавањем система који се састоји од Шредингерове и Поасонове једначине ће бити предмет будућег истраживања.

У четвртм делу су истражена електронска и оптичка својства квадратних и хексагоналних квантних тачака и прстенова. Електронска структура је моделована помоћу емпиријског метода јаке везе. Параметри у емпиријској методи јаке везе су добијени „фитовањем“ на две референтне зонске структуре: 1) у Γ тачки, на зонску структуру добијену $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ методом, 2) у остатку Брилуенове зоне, на зонску структуру добијену у GW апроксимацији. За овај метод је коришћен базис $sp^3d^5s^*$ орбитала. Метод је заснован на Слејгер-Костеровој теорији у оквиру које су скокови ограничени на најближе суседне атоме (Slater и Koster, 1954). Оптичка апсорпција је одређена на основу диполних матричних елемената. Они су израчунати укључивањем интраорбиталних чланова. Детаљно је истражен део енергетског спектра у околини фундаменталног енергетског процепа 2Д HgTe . Овај процеп се јавља између Γ_4 проводне зоне и $\Gamma_{5,6}$ валентних зона. Његова величина износи 1,82 eV. У овом делу спектра су детектована стања у енергетском процепу која су независно од типа и облика структуре доминантно била локализована на ивичним Te атомима. То је због веће Полингове електронегативности Te атома у односу на атоме Hg . Такође, установљено је да број ових стања умањен за пола одговара збиру ивичних Hg и Te атома. У раду је показано да се енергије ивичних и балковских стања квадратних квантних тачака различито понашају у нормалном магнетском пољу. За балковске нивое су уочена карактеристична антиукрштања стања различитог спина са спинском изменом. За довољно високе вредности магнетског поља балковска стања су конвергирала ка Ландауовим нивоима. Услед специфичне локализације, магнетско поље готово да није имало утицаја на ивична стања у квадратним квантним тачкама. Са друге стране, у квадратним квантним прстеновима балковска стања су испољавала карактеристичне Ахаронов-Бомове осцилације у променљивом магнетском пољу. Због додатног ограничавања кретања електрона у квадратним квантним прстеновима, долази до појаве спрезања стања између суседних ивица прстена и делокализације појединих ивичних стања која попримају балковски карактер. У хексагоналним квантним тачкама пронађена су специфична ивична стања која контраинтуитивно осцилују са променом магнетског флуksа. Ова стања формирају прстенолику структуру те долази до појаве Ахаронов-Бомових осцилација. Оптичка апсорпција је израчуната за x и y поларизацију упадне светлости. Детектована су три типа оптичких прелаза: 1) између балковских стања, 2) између балковских и ивичних стања и 3) између ивичних стања. У инфрацрвеном делу спектра је уочен карактеристичан пик у

оптичкој апсорпцији за размотрене наноструктуре, који води порекло од оптичких прелаза између ивичних стања. У дисертацији је показано да позиција Фермијевог нивоа и вредност нормалног магнетског поља представљају параметре помоћу којих се може ефикасно контролисати оптичка апсорпција анализираних наноструктура.

Литература

- Abdelazim N. M., Zhu Q., Xiong Y., Zhu Y., Chen M., Zhao N., Kershaw S. V., Rogach A. L., *Room Temperature Synthesis of HgTe Quantum Dots in an Aprotic Solvent Realizing High Photoluminescence Quantum Yields in the Infrared*, Chemistry of Materials **29**, 7859 (2017).
- Abdelsalam H., Talaat M. H., Lukyanchuk I., Portnoi M. E., Saroka V. A., *Electro-absorption of silicene and bilayer graphene quantum dots*, Journal of Applied Physics **120**, 014304 (2016).
- Ackerman M. M., Tang X., Guyot-Sionnest P., *Fast and Sensitive Colloidal Quantum Dot Mid-Wave Infrared Photodetectors*, ACS Nano **12**, 7264 (2018).
- Adamiec K., Rutkowski J., Rogalski A., Gawron W., Wenus J., Larkowski W., *LPE growth of Hg_{1-x}Cd_xTe heterostructures using a novel tipping boat*, Proceedings Volume 3948, Photodetectors: Materials and Devices V, Symposium on Integrated Optoelectronics, San Jose, United States (2000).
- Aharonov Y. и Bohm D., *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*, Physical Review **115**, 485 (1959).
- Allan G. и Delerue C., *Tight-binding calculations of the optical properties of HgTe nanocrystals*, Physical Review B **86**, 165437 (2012).
- Arsoski V. V., *Elektronska struktura i optička svojstva poluprovodničkih nanotačaka i nanoprstenova*, Doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu, Beograd (2013).
- Aversa C. и Sipe J. E., *General k-p theory of lattice-matched semiconductor heterostructures*, Physical Review B **49**, 14542 (1994).
- Bahder T. B., *Eight-band k-p model of strained zinc-blende crystals*, Physical Review B **41**, 11992 (1990).
- Baukus J. P., Hunter A. T., Marsh O. J., Jones C. E., Wu G. Y., Hetzler S. R., McGill T. C., Faurie J. P., *Infrared absorption measurement and analysis of HgTe-CdTe superlattices*, Journal of Vacuum Science and Technology A **4**, 2110 (1986).
- Becker C. R., Hatch S. D., Goschenhofer F., Latussek V., Dell J. M., Faraone L., *Photoluminescence of HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe superlattices and a study of minibands*, Physical Review B **75**, 115115 (2007).
- Becker C. R., Latussek V., Pfeuffer-Jeschke A., Landwehr G., Molenkamp L. W., *Band structure and its temperature dependence for type-III HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe superlattices and their semimetal constituent*, Physical Review B **62**, 10353 (2000).
- Bendias K., Shamim S., Herrmann O., Budewitz A., Shekhar P., Leubner P., Kleinlein J., Bocquillon E., Buhmann H., Molenkamp L. W., *High Mobility HgTe Microstructures for Quantum Spin Hall Studies*, Nano Letters **18**, 4831 (2018).
- Benz K. W. и Müller G., *GaSb and InSb crystals grown by vertical and horizontal travelling heater method*, Journal of Crystal Growth **46**, 35 (1979).
- Berg T. W., Bischoff S., Magnusdottir I., Mork J., *Ultrafast gain recovery and modulation limitations in self-assembled quantum-dot devices*, IEEE Photonics Technology Letters **13**, 541 (2001).
- Bernevig B. A., Hughes T. L., Zhang S. C., *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, Science **314**, 1757 (2006).
- Bhargava R. N., *II-VI Semiconductor Materials and Devices-Recent Progress*, Proceedings of the 17th International Conference on the Physics of Semiconductors, Springer, New York (1985).
- Bhat I. B., Ehsani H., Wang W. S., Ghandhi S. K., Karam N. H., *Low temperature epitaxy of HgTe, CdTe, and HgCdTe using flow modulation techniques*, Journal of Vacuum Science and Technology B **10**, 1376 (1992).
- Bir G. L. и Pikus G. E., *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, Wiley, New York (1974).

- Bloch F., *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Zeitschrift für Physik **52**, 555 (1929).
- Blue M. D., *Optical Absorption in HgTe and HgCdTe*, Physical Review **134**, A226 (1964).
- Bocquillon E., Deacon R. S., Wiedenmann J., Leubner P., Klapwijk T. M., Brüne C., Ishibashi K., Buhmann H., Molenkamp L. W., *Gapless Andreev bound states in the quantum spin Hall insulator HgTe*, Nature Nanotechnology **12**, 137 (2017).
- Boese D., Lischka M., Reichl L. E., *Scaling behavior in a quantum wire with scatterers*, Physical Review B **62**, 16933 (2000).
- Botha A. E., *General R-matrix approach for integrating the multiband k-p equation in layered semiconductor structures*, Computer Physics Communications **183**, 197 (2012).
- Bowers J. E., Schmit J. L., Speerschneider C. J., Maciolek R. B., *Comparison of Hg_{0.6}Cd_{0.4}Te LPE Layer Growth from Te-, Hg-, and HgTe-Rich Solutions*, IEEE Transactions On Electron Devices **27**, 24 (1980).
- Boykin T. B., Bowen R. C., Klimeck G., *Electromagnetic coupling and gauge invariance in the empirical tight-binding method*, Physical Review B **63**, 245314 (2001).
- Bransden, B. H. и Joachain, C. J., *Physics of Atoms and Molecules*, Longman, London (1983).
- Braun W., *Applied RHEED: Reflection High-Energy Electron Diffraction During Crystal Growth*, Springer, Berlin (1999).
- Bridgman P. W., *Certain Physical Properties of Single Crystals of Tungsten, Antimony, Bismuth, Tellurium, Cadmium, Zinc, and Tin*, Proceedings of the American Academy of Arts and Sciences **60**, 305 (1925).
- Brüne C., Liu C. X., Novik E. G., Hankiewicz E. M., Buhmann H., Chen Y. L., Qi X. L., Shen Z. X., Zhang S. C., Molenkamp L. W., *Quantum Hall Effect from the Topological Surface States of Strained Bulk HgTe*, Physical Review Letters **106**, 126803 (2011).
- Brüne C., Roth A., Novik E. G., König M., Buhmann H., Hankiewicz E. M., Hanke W., Sinova J., Molenkamp L. W., *Evidence for the ballistic intrinsic spin Hall effect in HgTe nanostructures*, Nature Physics **6**, 448 (2010).
- Burt M. G., *Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures*, Journal of Physics: Condensed Matter **11**, 53 (1999).
- Capper P. и Garland J., *Mercury Cadmium Telluride Growth, Properties and Applications*, Wiley, Chichester (2011).
- Capper P., *Bulk Crystal Growth: Methods and Materials*. In: Kasap S., Capper P. (eds) *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, 12. *Bulk Crystal Growth: Methods and Materials*, Springer, Cham (2017).
- Capper P., Irvine S., Joyce T., *Bulk Crystal Growth: Methods and Materials*. In: Kasap S., Capper P. (eds) *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, 14. *Epitaxial Crystal Growth: Methods and Materials*, Springer, Cham (2017).
- Capper P., Maxey C., Butler C., Grist M., Price J., *Bulk growth of near-IR cadmium mercury telluride (CMT)*, Journal of Material Science: Materials in Electronics **15**, 721 (2004).
- Chadi D. J., *Spin-orbit splitting in crystalline and compositionally disordered semiconductors*, Physical Review B **16**, 790 (1977).
- Chakir K., Bilel C., Habchi M. M., Rebey A., El Jani B., *Theoretical study of the carrier effective mass in diluted III-N-V semiconductor alloys by using 10-band k.p model*, Thin Solid Films **630**, 25 (2017).
- Chen J. C., Wang J., Sun Q. F., *Effect of magnetic field on electron transport in HgTe/CdTe quantum wells: Numerical analysis*, Physical Review B **85**, 125401 (2012).
- Chichibu S., *Exciton localization in InGaN quantum well devices*, Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena **16**, 2204 (1998).
- Chow P. P. и Johnson D., *Growth and characterization of MBE grown HgTe-CdTe superlattices*, Journal of Vacuum Science and Technology A **3**, 67 (1985).

- Chu J. и Sher A., *Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors*, Springer, New York (2008).
- Cinader G., Raizman A., Oron M., *Effect of Substrate Orientation on Crystalline Microstructure of HgTe, CdTe and HgCdTe*, Journal of Crystal Growth **101**, 167 (1990).
- Clemens H., Weilguni P. C., Stromberger U., Bauer G., *Growth of PbTe/Pb_{1-x}Mn_xTe quantum well structures by molecular-beam epitaxy*, Journal of Vacuum Science and Technology A **7**, 3197 (1989).
- Colombo L., Chang R. R., Chang C. J., Baird B. A., *Growth of Hg-based alloys by the traveling heater method*, Journal of Vacuum Science and Technology A: Vacuum, Surfaces and Films **6**, 2795 (1988).
- Colombo L., Syllaios A. J., Periaky R. W., Brau M. J., *Growth of large diameter (Hg, Cd)Te crystals by incremental quenching*, Journal of Vacuum Science and Technology A: Vacuum, Surfaces and Films **3**, 100 (1985).
- Čukarić N. A., *Modelling the electron and hole states in semiconductor nanostructures by the multiband k-p theory*, Doctoral dissertation, University of Belgrade, University of Antwerp, Belgrade (2015).
- Čukarić N. A., Tadić M. Ž., Partoens B., Peeters F. M., *30-band k-p model of electron and hole states in silicon quantum wells*, Physical Review B **88**, 205306 (2013).
- Czochralski J., *Ein neues Verfahren zur Messung der Kristallisationsgeschwindigkeit der Metalle*, Zeitschrift für Physikalische Chemie **92**, 219 (1918).
- Daumer V., Golombek I., Gbordzoe M., Novik E. G., Hock V., Becker C. R., Buhmann H., Molenkamp L. W., *Quasiballistic transport in HgTe quantum-well nanostructures*, Applied Physics Letters **83**, 1376 (2003).
- Davies J. H., *Elastic and piezoelectric fields around a buried quantum dot: A simple picture*, Journal of Applied Physics **84**, 1358 (1998).
- Davies J. H., *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction*, Cambridge University Press, Cambridge (1997).
- De Franceschi S., Kouwenhoven L., Schönberger C., Wernsdorfer W., *Hybrid superconductor-quantum dot devices*, Nature Nanotechnology **5**, 703 (2010).
- Delerue C. и Lannoo M., *Nanostructures: Theory and Modelling*, Springer, Berlin (2004).
- Dirac P. A. M., *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, Oxford, (1958).
- Dresselhaus G., Kip A. F., Kittel C., *Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals*, Physical Review **98**, 368 (1955).
- Eisberg R. и Resnick R., *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles (2nd ed.)*, John Wiley and Sons., Canada (1985).
- Ekins-Daukes N. J., Barnes J. M., Barnham K. W. J., Connoll J. P., Mazzer M., Clark J. C., Grey R., Hill G., Pate M. A., Roberts J. S., *Strained and strain-balanced quantum well devices for high-efficiency tandem solar cells*, Solar Energy Materials and Solar Cells **68**, 71 (2001).
- Farjam M. и Rafii-Tabar H., *Energy gap opening in submonolayer lithium on graphene: Local density functional and tight-binding calculations*, Physical Review B **79**, 045417 (2009).
- Faurie J. P. и Million A., *Molecular beam epitaxy of II-VI compound: Cd_xHg_{1-x}Te*, Journal of Crystal Growth **54**, 582 (1981).
- Faurie J. P., Million A., Piagnet J., *CdTe-HgTe multilayers grown by molecular beam epitaxy*, Applied Physics Letters **41**, 713 (1982).
- Ferrers N. M., *An Elementary Treatise on Spherical Harmonics and Subjects Connected with Them*, Macmillan, London (1877).
- Finnis M., *Interatomic Forces in Condensed Matter*, Oxford University Press, New York (2003).
- Foreman B. A., *Effective-mass hamiltonian and boundary conditions for the valence bands of semiconductor microstructures*, Physical Review B **48**, 4964 (1993).
- Franchi S., Trevisi G., Seravalli L., Frigeri P., *Quantum dot nanostructures and molecular beam epitaxy*, Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials **47**, 166 (2003).

- Galeriu C., *k-p Theory of Semiconductor Nanostructures*, Doctoral dissertation, Worcester Polytechnic Institute, Worcester (2005).
- Gille P., Presia M., Bloedner R. U., Puhlmann N., *Horizontal travelling heater method growth of $Hg_{1-x}Cd_xTe$ with crucible rotation*, Journal of Crystal Growth **130**, 188 (1993).
- Goldmann E., *From Structure to Spectra: Tight-Binding Theory of InGaAs Quantum Dots*, Doctoral dissertation, University of Bremen, Bremen (2014).
- Goschenhofer F., Gerschütz J., Pfeuffer-Jeschke A., Hellmig R., Becker C. R., Landwehr G., *Investigation of iodine as a donor in MBE grown $Hg_{1-x}Cd_xTe$* , Journal of Electronic Materials **27**, 532 (1998).
- Graf M. и Vogl P., *Electromagnetic fields and dielectric response in empirical tight-binding theory*, Physical Review B **51**, 4940 (1995).
- Gui Y. S., Becker C. R., Dai N., Liu J., Qiu Z. J., Novik E. G., Schäfer M., Shu X. Z., Chu J. H., Buhmann H., Molenkamp L. W., *Giant spin-orbit splitting in a $HgTe$ quantum well*, Physical Review B **70**, 115328 (2004).
- Guigou M., Recher P., Cayssol J., Trauzettel B., *Spin Hall effect at interfaces between $HgTe/CdTe$ quantum wells and metals*, Physical Review B **84**, 094534 (2011).
- Guldner Y., Bastard G., Vieren J. P., Voos M., Faurie J. P., Million A., *Magneto-Optical Investigations of a Novel Superlattice: $HgTe-CdTe$* , Physical Review Letters **51**, 907 (1983).
- Guyot-Sionnest P., Shim M., Matranga C., Hines M., *Intraband relaxation in $CdSe$ quantum dots*, Physical Review B **60**, R2181(R) (1999).
- Haldane F. D. M., *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the “Parity Anomaly”*, Physical Review Letters **61**, 2015 (1988).
- Hancock Y., Uppstu A., Saloriotta K., Harju A., Puska M. J., *Generalized tight-binding transport model for graphene nanoribbon-based systems*, Physical Review B **81**, 245402 (2010).
- Haque A. и Khondker A. N., *Quantum transport in mesoscopic devices: Current conduction in quantum wire structures*, Journal of Applied Physics **87**, 2553 (2000).
- Haraguchi K., Katsuyama T., Hiruma K., Ogawa K., *GaAs p-n junction formed in quantum wire crystals*, Applied Physics Letters **60**, 745 (1992).
- Harrison M. T., Kershaw S. V., Burt M. G., Rogach A., Eychmüller A., Weller H., *Investigation of factors affecting the photoluminescence of colloiddally-prepared $HgTe$ nanocrystals*, Journal of Materials Chemistry **9**, 2721 (1999).
- Harrison P., *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, Wiley, Chichester (2005).
- Harrison W. A., *Electronic Structure and Properties of Solids*, Dover Publications, New York (1989).
- Hart S., Ren H., Wagner T., Leubner P., Mühlbauer M., Brüne C., Buhmann H., Molenkamp L. W., Yacoby A., *Induced superconductivity in the quantum spin Hall edge*, Nature Physics **10**, 638 (2014).
- Hasan, M. Z., и Kane, C. L., *Colloquium: topological insulators*, Review Modern Physics **82**, 3045 (2010).
- Hatch S. D., *Investigation of $HgTe-CdTe$ superlattices grown by molecular beam epitaxy*, PhD thesis, School of Electrical, Electronic and Computer Engineering, The University of Western Australia (2010).
- Hatch S. D., Sewell R. H., Dell J. M., Faraone L., Becker C. R., Usher B., *Investigation of $HgTe-HgCdTe$ Superlattices by High-Resolution X-ray Diffraction*, Journal of Electronic Materials **35**, 1481 (2006).
- He X., Xi X., Ku W., *Generic Symmetry Breaking Instability of Topological Insulators due to a Novel van Hove Singularity*, arXiv:1410.2885v1 (2014).
- Hoke W. E. и Lemonias P. J., *Low temperature metalorganic growth of $CdTe$ and $HgTe$ films using ditertiarybutyltelluride*, Applied Physics Letters **48**, 1669 (1986).
- Holtkemper M., Reiter D. E., Kuhn T., *Influence of the quantum dot geometry on p-shell transitions in differently charged quantum dots*, Physical Review B **97**, 075308 (2018).

- Hybertsen M. S. и Louie S. G., *Electron correlation in semiconductors and insulators: Band gaps and quasiparticle energies*, Physical Review B **34**, 5390 (1986).
- Ihn T., *Semiconductor Nanostructures: Quantum States and Electronic Transport*, Oxford University Press, Oxford (2010).
- Jagtap A., Goubet N., Livache C., Chu A., Martinez B., Gréboval C., Qu J., Dandeu E., Becerra L., Witkowski N., Ithurria S., Mathevet F., Silly M. G., Dubertret B., Lhuillier E., *Short Wave Infrared Devices Based on HgTe Nanocrystals with Air Stable Performances*, The Journal of Physical Chemistry C **122**, 14979 (2018).
- Jakovljević D., Grujić M., Tadić M., Peeters F., *Helical edge states in silicene and germanene nanorings in perpendicular magnetic field*, Journal of Physics: Condensed Matter **30**, 035301 (2017).
- Jancu J., Scholz R., Beltram F., Bassani F., *Empirical sp^3s^* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters*, Physical Review B **57**, 6493 (1998).
- Johnston S., Blazejewski E. R., Bajaj J., Chen J. S., Bubulac L., Williams G., *Low temperature growth of midwavelength infrared liquid phase epitaxy HgCdTe on sapphire*, Journal of Vacuum Science and Technology B **9**, 1661 (1991).
- Jones C. E., Casselman T. N., Faurie J. P., Perkowitz S., Schulman J. N., *Infrared properties and band gaps of HgTe/CdTe superlattices*, Applied Physics Letters **47**, 140 (1985).
- Jung H. S., Boieriu P., Grein C. H., *p-type HgTe/CdTe superlattices for very-long wavelength infrared detectors*, Journal of Electronic Materials **35**, 1341 (2006).
- Kadykov A. M., Krishtopenko S. S., Jouault B., Desrat W., Knap W., Ruffenach S., Consejo C., Torres J., Morozov S. V., Mikhailov N. N., Dvoretiskii S. A., Teppe F., *Temperature-Induced Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, Physical Review Letters **120**, 086401 (2018).
- Kalmeyer V. и Laughlin R. B., *Equivalence of the resonating-valence-bond and fractional quantum Hall states*, Physical Review Letters **59**, 2095 (1987).
- Kane C. L. и Mele E. J., *Quantum Spin Hall Effect in Graphene*, Physical Review Letters **95**, 226801 (2005).
- Kane E. O., *Band structure of indium antimonide*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **1**, 249 (1957).
- Kane E. O., *Energy band structure in p-type germanium and silicium*, Journal of Physics and Chemistry of Solids **1**, 82 (1956).
- Keating P. N., *Effect of invariance Requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure*, Physical Review **145**, 637 (1966).
- Kershaw S. V., Burt M., Harrison M., Rogach A., Weller H., Eychmüller A., *Colloidal CdTe/HgTe quantum dots with high photoluminescence quantum efficiency at room temperature*, Applied Physics Letters **75**, 1694 (1999).
- Keuleyan S., Kohler J., Guyot-Sionnest P., *Photoluminescence of Mid-Infrared HgTe Colloidal Quantum Dots*, The Journal of Physical Chemistry C **118**, 2749 (2014).
- Keuleyan S., Lhuillier E., Brajuskovic V., Guyot-Sionnest P., *Mid-infrared HgTe colloidal quantum dot photodetectors*, Nature Photonics **5**, 489 (2011B).
- Keuleyan S., Lhuillier E., Guyot-Sionnest P., *Synthesis of Colloidal HgTe Quantum Dots for Narrow Mid-IR Emission and Detection*, Journal of the American Chemical Society **133**, 16422 (2011A).
- Kittel C., *Quantum Theory of Solids*, Wiley, New York (1987).
- Klein M., *On a Degeneracy Theorem of Kramers*, American Journal of Physics **20**, 65 (1952).
- Klein R., *Abstract voronoi diagrams and their applications. In: Noltemeier H. (eds) Computational Geometry and its Applications*, Springer, Berlin, Heidelberg (1988).
- Klimeck G., Bowen R. C., Boykin T. B., Cwik T. A., *sp^3s^* Tight-binding parameters for transport simulations in compound semiconductors*, Superlattices and Microstructures **27**, 519 (2000).

- Koguchi N., Takahashi S., Chikyow T., *New MBE growth method for InSb quantum well boxes*, Journal of Crystal Growth **111**, 688 (1991).
- König M., Buhmann H., Becker C. R., Molenkamp L. W., *Phase effects in HgTe quantum structures*, Physica Status Solidi C **4**, 3374 (2007A).
- König M., Wiedmann S., Brüne C., Roth A., Buhmann H., Molenkamp L. W., Qi X. L., Zhang S. C., *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, Science **318**, 766 (2007B).
- Korkusinski M. и Hawrylak P., *Quantum strain sensor with a topological insulator HgTe quantum dot*, Scientific Reports **4**, 4903 (2014).
- Kovalenko M. V., Kaufmann E., Pachinger D., Roither J., Huber M., Stangl J., Hesser G., Schäffler F., Heiss W., *Colloidal HgTe Nanocrystals with Widely Tunable Narrow Band Gap Energies: From Telecommunications to Molecular Vibrations*, Journal of the American Chemical Society **128**, 3516 (2006).
- Krishnamurthy S., Chen A., Sher A., Van Schilfgaarde M., *Temperature dependence of band gaps in HgCdTe and other semiconductors*, Journal of Electronic Materials **24**, 1121 (1995).
- Krishtopenko S. S., Knap W., Teppe F., *Phase transitions in two tunnel coupled HgTe quantum wells: Bilayer graphene analogy and beyond*, Scientific Reports **6**, 30755 (2016B).
- Krishtopenko S. S., Yahniuk I., But D. B., Gavrilenko V. I., Knap W., Teppe F., *Pressure- and temperature-driven phase transitions in HgTe quantum wells*, Physical Review B **94**, 245402 (2016A).
- Kvon Z. D., Olshanetsky E. B., Mikhailov N. N., Kozlov D. A., *Two-dimensional electron systems in HgTe quantum wells*, Low Temperature Physics **35**, 6 (2009).
- Lansari Y., Han J. W., Hwang S., Kim L. S., Cook Jr. J. W., Schetzina J. F., Schulman J. N., Otsuka N., *Properties of HgTe-Hg_{0.15}Cd_{0.85}Te superlattices grown by molecularbeam epitaxy*, Journal of Vacuum Science and Technology B **7**, 241 (1989).
- Lawaetz P., *Valence-band parameters in cubic semiconductors*, Physical Review B **4**, 3460 (1971).
- Ledentsov N. N., *Growth Processes and Surface Phase Equilibria in Molecular Beam Epitaxy*, Springer, Berlin (1999).
- Lewis J. P., Glaesemann K. R., Voth G. A., Fritsch J., Demkov A. A., Ortega J., Sankey O. F., *Further developments in the local-orbital density-functional-theory tight-binding method*, Physical Review B **64**, 195103 (2001).
- Lhuillier E., Keuleyan S., Guyot-Sionnest P., *Optical properties of HgTe colloidal quantum dots*, Nanotechnology **23**, 175705 (2012).
- Lhuillier E., Keuleyan S., Liu H., Guyot-Sionnest P., *Mid-IR Colloidal Nanocrystals*, Chemistry of Materials **25**, 1272 (2013).
- Li J., He C., Meng L., Xiao H., Tang C., Wei X., Kim J., Kioussis N., Stocks G. M., Zhong J., *Two-dimensional topological insulators with tunable band gaps: Single-layer HgTe and HgSe*, Scientific Reports **5**, 14115 (2015).
- Li L. L., Moldovan D., Xu W., Peeters F. M., *Electric- and magnetic-field dependence of the electronic and optical properties of phosphorene quantum dots*, Nanotechnology **28**, 085702 (2017).
- Liu C., Hughes T. L., Qi X., Wang K., Zhang S., *Quantum Spin Hall Effect in Inverted Type-II Semiconductors*, Physical Review Letters **100**, 236601 (2008).
- Löwdin P. O., *A Note on the Quantum Mechanical Perturbation Theory*, The Journal of Chemical Physics **19**, 1396 (1951).
- Löwdin P. O., *On the non-orthogonality problem connected with the use of atomic wave functions in the theory of molecules and crystals*, The Journal of Chemical Physics, **18**, 365 (1950).
- Luryi S., *Quantum capacitance devices*, Applied Physics Letters **52**, 501 (1988).
- Luttinger J. M. и Kohn W., *Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields*, Physical Review **97**, 869 (1955).
- Magorrian S. J., Zólyomi V., Fal'ko V. I., *Electronic and optical properties of two-dimensional InSe from a DFT-parametrized tight-binding model*, Physical Review B **94**, 245431 (2016).

- Maier L., Muehlbauer M. J., Krefft B., Yang J., Buhmann H., Molenkamp L. W., *Lithography optimization on HgTe*, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, (Dresde2011issue), 1 (2011).
- Malinowski A., Britton R. S., Grevatt T., Harley R. T., Ritchie D. A., Simmons M. Y., *Spin relaxation in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells*, Physical Review B **62**, 13034 (2000).
- Man P. и Pan D. S., *Infrared absorption in HgTe*, Physical Review B **44**, 8745 (1991).
- Mashford B. S., Stevenson M., Popovic Z., Hamilton C., Zhou Z., Breen C., Steckel J., Bulovic V., Bawendi M., Coe-Sullivan S., Kazlas P. T., *High-efficiency quantum-dot light-emitting devices with enhanced charge injection*, Nature Photonics **7**, 407 (2013).
- Matthew W., Foulkes C., Haydock R., *Tight-binding models and density-functional theory*, Physical Review B **39**, 12520 (1989).
- Mattox D. M., *Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing (Second Edition): Chapter 10 - Atomistic Film Growth and Some Growth-Related Film Properties*, William Andrew Publishing, Boston (2010).
- Michetti P. и Trauzettel B., *Devices with electrically tunable topological insulating phases*, Applied Physics Letters **102**, 063503 (2013).
- Michetti P., Budich J. C., Novik E. G., Recher P., *Tunable quantum spin Hall effect in double quantum wells*, Physical Review B **85**, 125309 (1-8) (2012).
- Mikhailov N. N., Smirnov R. N., Dvoretzky S. A., Sidorov Y. G., Shvets V. A., Spesivtsev E. V., Rykhliiski S. V., *Growth of Hg_{1-x}Cd_xTe nanostructures by molecular beam epitaxy with ellipsometric control*, International Journal of Nanotechnology **3**, 120 (2006).
- Min H., Sahu B., Banerjee S. K., MacDonald A. H., *Ab initio theory of gate induced gaps in graphene bilayers*, Physical Review B **75**, 155115 (2007).
- Minkov G. M., Aleshkin V. Y., Rut O. E., Sherstobitov A. A., Germanenko A. V., Dvoretzki S. A., Mikhailov N. N., *Spin-orbit splitting of the conduction band in HgTe quantum wells: Role of different mechanisms*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **110**, 95 (2019).
- Misra P. K., *Physics of Condensed Matter*, Elsevier, Academic Press, (2011).
- Moldovan D. и Peeters F. M., PYBINDING v0.8.0: a PYTHON package for tight-binding calculations.
- Monterrat E., Ulmer L., Mallard R., Magnea N., Pautrat J. L., Mariette H., *Molecular beam epitaxy growth and characterization of Cd_xHg_{1-x}Te (0.4<x<1) based quantum wells*, Journal of Applied Physics **71**, 1774 (1992).
- Morrow R. A., *Establishment of an effective-mass hamiltonian for abrupt heterojunctions*, Physical Review B **35**, 8074 (1987).
- Moyses Cohen A. и Eugenio Marques G., *Electronic structure of zinc-blende-structure semiconductor heterostructures*, Physical Review B **41**, 10608 (1990).
- Norton P., *HgCdTe infrared detectors*, Opto-electronics Review **10**, 159 (2002).
- Novik E. G., Pfeuffer-Jeschke A., Jungwirth T., Latussek V., Becker C. R., Landwehr G., Buhmann H., Molenkamp L. W., *Band structure of semimagnetic Hg_{1-y}Mn_yTe quantum wells*, Physical Review B **72**, 035321 (2005).
- O'Reilly E. P., *Quantum Theory of Solids*, Taylor and Francis, London (2003).
- Oehling S., Ehinger M., Spahn W., Waag A., Becker C. R., Landwehr G., *Mechanisms of molecular beam epitaxial growth of (001) HgTe*, Journal of Applied Physics **79**, 748 (1996).
- Ortner K., Zhang X. C., Oehling S., Gerschütz J., Pfeuffer-Jeschke A., Hock V., Becker C. R., Landwehr G., Molenkamp L. W., *Growth and characterization of p-type HgTe/Hg_{1-x}Cd_xTe single quantum wells using nitrogen and arsenic*, Applied Physics Letters **79**, 3980 (2001).
- Pertsova A., Canali C. M., MacDonald A. H., *Thin films of a three-dimensional topological insulator in a strong magnetic field: Microscopic study*, Physical Review B **91**, 075430 (2015).
- Pohl U. W., *Methods of Epitaxy. In: Epitaxy of Semiconductors. Graduate Texts in Physics*, Springer, Berlin, Heidelberg (2013).

- Popov V. N. и Henrard L., *Comparative study of the optical properties of single-walled carbon nanotubes within orthogonal and nonorthogonal tight-binding models*, Physical Review B **70**, 115407 (2004).
- Pötz W. и Ferry D. K., *On the boundary conditions for envelope-function approaches for heterostructures*, Superlattices and Microstructures **3**, 57 (1987).
- Prodan E., *Three-dimensional phase diagram of disordered HgTe/CdTe quantum spin-Hall wells*, Physical Review B **83**, 195119 (2011).
- Qi X. L. и Zhang S. C., *Topological insulators and superconductors*, Review Modern Physics **83**, 1057 (2011).
- Rao Y., Zhang H., Yang Q., Zhang D., Jin L., Ma B., Wu Y., *Liquid phase epitaxy magnetic garnet films and their applications*, Chinese Physics B **27** 086701 (2018).
- Ray B. и Spencer P. M., *Phase Diagram of the Alloy System HgTe-CdTe*, Physica Status Solidi **22**, 371 (1967).
- Rayleigh J. W. S. B., *The Theory of Sound*, Macmillan, London (1877).
- Rogach A. L., Harrison M. T., Kershaw S. V., Kornowski A., Burt M. G., Eychmüller A., Weller H., *Colloidally Prepared CdHgTe and HgTe Quantum Dots with Strong Near-Infrared Luminescence*, Basic Solid State Physics **224**, 153 (2001).
- Rogach A., Kershaw S. V., Burt M., Harrison M. T., Kornowski A., Eychmüller A., Weller H., *Colloidally Prepared HgTe Nanocrystals with Strong Room-Temperature Infrared Luminescence*, Advanced Materials **11**, 552 (1999).
- Rossi F., *The Envelope-Function Approximation. In: Theory of Semiconductor Quantum Devices. NanoScience and Technology*, Springer, Berlin, Heidelberg (2011).
- Roth A., Brüne C., Buhmann H., Molenkamp L. W., Maciejko J., Qi X. L., Zhang S. C., *Nonlocal Transport in the Quantum Spin Hall State*, Science **325**, 294 (2009).
- Rothe D. G., Reinthaler R. W., Liu C. X., Molenkamp L. W., Zhang S. C., Hankiewicz E. M., *Fingerprint of different spin-orbit terms for spin transport in HgTe quantum wells*, New Journal of Physics **12**, 065012 (2010).
- Saïdi I., Ben Radhia S., Boujdaria K., *Band parameters of GaAs, InAs, InP, and InSb in the 40-band k - p model*, Journal of Applied Physics **107**, 043701 (2010).
- Sakamoto Y., Hirahara T., Miyazaki H., Kimura S., Hasegawa S., *Spectroscopic evidence of a topological quantum phase transition in ultrathin Bi_2Se_3 films*, Physical Review B **81**, 165432 (2010).
- Sakurai J. J., *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, (1994).
- Sapra S., Shanthi N., Sarma D. D., *Realistic tight-binding model for the electronic structure of II-VI semiconductors*, Physical Review B **66**, 205202 (2002).
- Schaake H. F., Tregilgas J. H., Beck J. D., Kinch M. A., Gnade B. E., *The effect of low temperature annealing on defects, impurities, and electrical properties of (Hg,Cd)Te*, Journal of Vacuum Science and Technology A **3**, 143 (1985).
- Schlom D. G., Chen L. Q., Pan X., Schmehl A., Zurbuchen M. A., *A thin film approach to engineering functionality into oxides*, Journal of American Ceramic Society **91**, 2429 (2008).
- Schlom D. G., Haeni J. H., Lettieri J., Theis C. D., Tian W., Jiang J. C., Pan X. Q., *Oxide nano-engineering using MBE*, Materials Science and Engineering B **87**, 282 (2001).
- Schmit J. L., *Growth, properties and applications of HgCdTe*, Journal of Crystal Growth **65**, 249 (1983).
- Schrödinger E., *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik **385**, 437 (1926).
- Scott M. W., *Energy Gap in $Hg_{1-x}Cd_xTe$ by Optical Absorption*, Journal of Applied Physics **40**, 4077 (1969).
- Senchenkov A. S., Barmin V., Tomson A. S., Krapukhin V. V., *Seedless THM growth of $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x \approx 0.2$) single crystals within rotating magnetic field*, Journal of Crystal Growth **197**, 552 (1999).

- Sengupta P., Kubis T., Tan Y., Povolotskyi M., Klimeck G., *Design principles for HgTe based topological insulator devices*, Journal of Applied Physics **114**, 043702 (2013).
- Sharma R. K., Mehta S. K., Singh V. K., Prasad G., Sharma B. B., *Stoichiometric annealing and electrical properties of Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te grown by solid state recrystallization*, Physica Status Solidi (a) **115**, 135 (1989).
- Sharma R. K., Singh V. K., Nayyar N. K., Gupta S. R., Sharma B. B., *Horizontal casting for the growth of Hg_{1-x}Cd_xTe by solid state recrystallization*, Journal of Crystal Growth **131**, 565 (1993).
- Shen G., Chen M., Guyot-Sionnest P., *Synthesis of Nonaggregating HgTe Colloidal Quantum Dots and the Emergence of Air-Stable n-Doping*, The Journal of Physical Chemistry Letters **8**, 2224 (2017).
- Shen S. Q., *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*, Springer, Berlin (2012).
- Shirasaki Y., Supran G. J., Bawendi M. G., Bulović V., *Emergence of colloidal quantum-dot light-emitting technologies*, Nature Photonics **7**, 13 (2013).
- Slater J. C. и Koster G. F., *Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem*, Physical Review **94**, 1498 (1954).
- Slater J. C., *Electrons in Perturbed Periodic Lattices*, Physical Review **76**, 1592 (1949).
- So F. F., Forrest S. R., Shi Y. Q., Steier W. H., *Quasi-epitaxial growth of organic multiple quantum well structures by organic molecular beam deposition*, Applied Physics Letters **56**, 674 (1990).
- Stockbarger D. C., *The Production of Large Single Crystals of Lithium Fluoride*, Review of Scientific Instruments **7**, 133 (1936).
- Sugawara M. и Usami M., *Handling the heat*, Nature Photonics **3**, 30 (2009).
- Suh S. H., Moon S. W., Kim J. S., Lim S. W., Kwak N. J., Kim H. K., Kim J. M., *Slider liquid phase epitaxial growth of Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te, Hg_{0.7}Cd_{0.3}Te and Hg_{0.3}Cd_{0.7}Te with precise control of alloy compositions*, Journal of Crystal Growth **121**, 417 (1992).
- Svane A., Christensen N. E., Cardona M., Chantis A. N., van Schilfgaarde M., Kotani T., *Quasiparticle band structures of β -HgS, HgSe, and HgTe*, Physical Review B **84**, 205205 (2011).
- Tang X. и Lai K. W. C., *Detection of mid-infrared by HgTe colloidal quantum dots at room temperature*, 2016 IEEE 16th International Conference on Nanotechnology (IEEE-NANO), IEEE, Sendai, Japan, ISBN: 978-1-5090-1493-4 (2016).
- Tang X., Ackerman M. M., Guyot-Sionnest P., *Thermal Imaging with Plasmon Resonance Enhanced HgTe Colloidal Quantum Dot Photovoltaic Devices*, ACS Nano **12**, 7362 (2018).
- Thouless D. J., Kohmoto M., Nightingale M. P., den Nijs M., *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, Physical Review Letters **49**, 405 (1982).
- Topalović D. B., Arsoški V. V., Tadić M. Ž., Peeters F. M., *Asymmetric versus symmetric HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te double quantum wells: Bandgap tuning without electric field*, Journal of Applied Physics **128**, 064301 (2020).
- Topalović D. B., Arsoški V. V., Tadić M. Ž., Peeters F. M., *Confined electron states in two-dimensional HgTe in magnetic field: Quantum dot versus quantum ring behavior*, Physical Review B **100**, 125304 (2019A).
- Topalović D. B., Arsoški V. V., Tadić M. Ž., Peeters F. M., *Tunable quantum phase transitions in asymmetric HgTe/Cd_xHg_{1-x}Te double quantum wells*, Abstracts of tutorial, keynote, invited lectures, progress reports and contributed papers of The Seventh International School and Conference on Photonics, Photonica 2019, Belgrade, Serbia, August 26-30, 2019, OM11, pp. 109, ISBN: 978- 86- 7306- 153-5.
- Tregilgas J. H., *Developments in recrystallized bulk HgCdTe*, Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials **28**, 57 (1994).
- Tregilgas J., Beck J., Gnade B., *Type conversion of (Hg, Cd)Te induced by the redistribution of residual acceptor impurities*, Journal of Vacuum Science and Technology A: Vacuum, Surfaces and Films **3**, 150 (1985).

- Triboulet R. и Marfaing Y., *CdTe growth by “multipass thm” and “sublimation thm”*, Journal of Crystal Growth **51**, 89 (1981).
- Triboulet R., *Handbook of Crystal Growth (Second Edition): 12 - Crystal Growth by Traveling Heater Method*, Elsevier, Boston (2015).
- Triboulet R., *Solid state recrystallization: a promising technique for the growth of semiconductor materials*, Crystal Research and Technology **38**, 215 (2003).
- Tsen G. K. O., Musca C. A., Dell J. M., Antoszewski J., Faraone L., Becker C. R., *Arsenic δ -doped HgTe/HgCdTe superlattices grown by molecular beam epitaxy*, Applied Physics Letters **92**, 082107 (2008).
- Tsui D. C., Stormer H. L., Gossard A. C., *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*, Physical Review Letters **48**, 1559 (1982).
- Vere A. W., Straughan B. W., Williams D. J., Shaw N., Royle A., Gough J. S., Mullin J. B., *Growth of $Cd_xHg_{1-x}Te$ by a pressurised cast-recrystallise-anneal teschnique*, Journal of Crystal Growth **59**, 121 (1982).
- Wang Z., Ki D., Chen H., Berger H., MacDonald A. H., Morpurgo A. F., *Strong interface-induced spin-orbit interaction in graphene on WS_2* , Nature Communications **6**, 8339 (2015).
- Wannier G. H., *The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals*, Physical Review **52**, 191 (1937).
- Wigner E. и Seitz F., *On the Constitution of Metallic Sodium*, Physical Review **43**, 804 (1933).
- Williams D. J. и Vere A. W., *Sub-grain boundaries in $Cd_xHg_{1-x}Te$ and $CdTe$* , Journal of Crystal Growth **83**, 341 (1987).
- Winkler R., *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, Berlin (2003).
- Woggon U., *Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots*, Springer, Berlin (1997).
- Xu W., Li L. L., Dong H. M., Gumbs G., Folkes P. A., *Band hybridization and spin-splitting in $InAs/AlSb/GaSb$ type II and broken-gap quantum wells*, Journal of Applied Physics **108**, 053709 (2010).
- Xu Y., Yan B., Zhang H. J., Wang J., Xu G., Tang P., Duan W., Zhang S. C., *Large-Gap Quantum Spin Hall Insulators in Tin Films*, Physical Review Letters **111**, 136804 (2013).
- Yan B. и De Visser A., *Half-Heusler topological insulators*, MRS Bulletin **39**, 859 (2014).
- Yan B. и Zhang S. C., *Topological materials*, Reports on Progress in Physics **75**, 096501 (2012).
- Yang W., Chang K., Zhang S. C., *Intrinsic Spin Hall Effect Induced by Quantum Phase Transition in $HgCdTe$ Quantum Wells*, Physical Review Letters **100**, 056602 (2008).
- Yang X., Jurkovic M. J., Heroux J. B., Wang W. I., *Molecular beam epitaxial growth of $InGaAsN:Sb/GaAs$ quantum wells for long-wavelength semiconductor lasers*, Applied Physics Letters **75**, 178 (1999).
- Yates J. R., Wang X., Vanderbilt D., Souza I., *Spectral and Fermi surface properties from Wannier interpolation*, Physical Review B **75**, 195121 (2007).
- Yu P. и Cardona M., *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*, Springer, Berlin, Heidelberg (2010).
- Zawadzki W., Chaubet C., Dur D., Knap W. Raymond A., *Cyclotron emission study of electron masses in $GaAs-GaAlAs$ heterostructures*, Semiconductor Science and Technology **9**, 320 (1994).
- Zeeman, P., *On the influence of magnetism on the nature of the light emitted by a substance*, Philosophical Magazine **43**, 226 (1897).
- Zhang X. C., Pfeuffer-Jeschke A., Ortner K., Hock V., Buhmann H., Becker C. R., Landwehr G., *Rashba splitting in n-type modulation-doped $HgTe$ quantum wells with an inverted band structure*, Physical Review B **63**, 245305 (2001).
- Zhang X. W. и Xia J. B., *Electronic structure and electron g factors of $HgTe$ quantum dots*, Journal of Physics D: Applied Physics **39**, 1815 (2006).
- Zhang X., Wu D., Geng H., *Heterojunctions Based on II-VI Compound Semiconductor One-Dimensional Nanostructures and Their Optoelectronic Applications*, Crystals **7**, 307 (2017).

- Zhao H. и Rosei F., *Colloidal Quantum Dots for Solar Technologies*, Chem **3**, 229 (2017).
- Zheng H., Li X. B., Chen N. K., Xie S. Y., Tian W. Q., Chen Y., Xia H., Zhang S. B., Sun H. B., *Monolayer II-VI semiconductors: A first-principles prediction*, Physical Review B **92**, 115307 (2015).
- Zhou B., Lu H. Z., Chu R. L., Shen S. Q., Niu Q., *Finite Size Effects on Helical Edge States in a Quantum Spin-Hall System*, Physical Review Letters **101**, 246807 (2008).
- Zhou Y. D., Becker C. R., Selamet Y., Chang Y., Ashokan R., Boreiko R. T., Aoki T., Smith D. J., Betz A. L., Sivananthan S., *Far-infrared detector based on HgTe/HgCdTe superlattices*, Journal of Electronic Materials **32**, 608 (2003).
- Zitouni K., Kadri A., Lefebvre P., Gil B., *k,P energy-band structure of ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO quantum well heterostructures*, Superlattices and Microstructures **39**, 91 (2006).

Прилог 1 Нумеричке вредности параметара зонске структуре у осмозонском $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ моделу

Табела П.1. Параметри зонске структуре HgTe на температури $T = 0$ К. Вредности за Δ , E_g и $2m_0P^2/\hbar^2$ су дате у (eV) док су остали параметри без димензије (Novik и сар., 2005).

Параметар	Вредност
γ_1	4,1
γ_2	0,5
γ_3	1,3
κ	-0,4
F	0
Δ (eV)	1,08
E_g (eV)	-0,303
$2m_0P^2/\hbar^2$ (eV)	18,8

Табела П.2. Параметри зонске структуре CdTe на температури $T = 0$ К. Вредности за Δ , E_g и $2m_0P^2/\hbar^2$ су дате у (eV) док су остали параметри без димензије (Novik и сар., 2005).

Параметар	Вредност
γ_1	1,47
γ_2	-0,28
γ_3	0,03
κ	-1,31
F	-0,09
Δ (eV)	0,91
E_g (eV)	1,606
$2m_0P^2/\hbar^2$ (eV)	18,8

Прилог 2 Нумеричке вредности параметара у емпиријском моделу јаке везе

Табела П.3. Параметри метода јаке везе за HgTe у базису $sp^3d^5s^*$ орбитала по Слејтер-Костеровој нотацији. Вредности параметара су представљене у (eV) за случај када је температура $T = 0$ К. Ознаке (a) и (c) се односе на ознаку за ањон (Te) и катјон (Hg), док се ознаке (ac) и (ca) односе на скокове са ањона (катјона) на катјон (ањон) (Allan и Deleue, 2012).

Параметри за HgTe (eV)			
E_s (a)	-10,040161	E_s (c)	-1,502103
E_p (a)	1,580003	E_p (c)	5,929255
$E_{d_{xy}}$ (a)	10,139959	$E_{d_{xy}}$ (c)	15,108978
$E_{d_{x^2-y^2}}$ (a)	13,145395	$E_{d_{x^2-y^2}}$ (c)	15,431086
E_{s^*} (a)	12,611213	E_{s^*} (c)	14,801158
Δ (a)	0,375000	Δ (c)	0,465000
$V_{ss\sigma}$ (ac)	-0,904384	$V_{s^*s^*\sigma}$ (ac)	-1,570513
$V_{ss^*\sigma}$ (ac)	0,357261	$V_{ss^*\sigma}$ (ca)	-0,242580
$V_{sp\sigma}$ (ac)	1,085069	$V_{sp\sigma}$ (ca)	2,014492
$V_{s^*p\sigma}$ (ac)	1,175059	$V_{s^*p\sigma}$ (ca)	1,405375
$V_{sd\sigma}$ (ac)	-0,525896	$V_{sd\sigma}$ (ca)	-1,067102
$V_{s^*d\sigma}$ (ac)	0,485896	$V_{s^*d\sigma}$ (ca)	0,696627
$V_{pp\sigma}$ (ac)	3,166827	$V_{pp\pi}$ (ac)	-0,945694
$V_{pd\sigma}$ (ac)	-1,789915	$V_{pd\sigma}$ (ca)	-0,653612
$V_{pd\pi}$ (ac)	1,406422	$V_{pd\pi}$ (ca)	1,657517
$V_{dd\sigma}$ (ac)	-0,529629	$V_{dd\pi}$ (ac)	2,424709
$V_{dd\delta}$	-1,064207	/	/

Прилог 3 Преглед двоцентарских интеграла у моделу јаке везе

Табела П.4. Двоцентарски интеграли између различитих орбитала из $sp^3d^5s^*$ базисног скупа написани преко дирекционих косинуса (Slater и Koster, 1954).

Интеграли енергије за сфалеритни кристал	
$E_{s,s}$	$V_{ss\sigma}$
$E_{s,x}$	$lV_{sp\sigma}$
$E_{x,x}$	$l^2V_{pp\sigma} + (1 - l^2)V_{pp\pi}$
$E_{x,y}$	$lmV_{pp\sigma} - lmV_{pp\pi}$
$E_{x,z}$	$lnV_{pp\sigma} - lnV_{pp\pi}$
$E_{s,xy}$	$\sqrt{3}lmV_{sd\sigma}$
E_{s,x^2-y^2}	$\sqrt{3}/2(l^2 - m^2)V_{sd\sigma}$
$E_{s,3z^2-r^2}$	$[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{sd\sigma}$
$E_{x,xy}$	$\sqrt{3}l^2mV_{pd\sigma} + m(1 - 2l^2)V_{pd\pi}$
$E_{x,yz}$	$\sqrt{3}lmnV_{pd\sigma} - 2lmnV_{pd\pi}$
$E_{x,zx}$	$\sqrt{3}l^2nV_{pd\sigma} + n(1 - 2l^2)V_{pd\pi}$
E_{x,x^2-y^2}	$\sqrt{3}/2l(l^2 - m^2)V_{pd\sigma} + l(1 - l^2 + m^2)V_{pd\pi}$
E_{y,x^2-y^2}	$\sqrt{3}/2m(l^2 - m^2)V_{pd\sigma} - m(1 + l^2 - m^2)V_{pd\pi}$
E_{z,x^2-y^2}	$\sqrt{3}/2n(l^2 - m^2)V_{pd\sigma} - n(l^2 - m^2)V_{pd\pi}$
$E_{x,3z^2-r^2}$	$l[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{pd\sigma} - \sqrt{3}ln^2V_{pd\pi}$
$E_{y,3z^2-r^2}$	$m[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{pd\sigma} - \sqrt{3}mn^2V_{pd\pi}$
$E_{z,3z^2-r^2}$	$n[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{pd\sigma} - \sqrt{3}n(l^2 + m^2)V_{pd\pi}$
$E_{xy,xy}$	$3l^2m^2V_{dd\sigma} + (l^2 + m^2 - 4l^2m^2)V_{dd\pi} + (n^2 + l^2m^2)V_{dd\delta}$
$E_{xy,yz}$	$3lm^2nV_{dd\sigma} + ln(1 - 4m^2)V_{dd\pi} + ln(m^2 - 1)V_{dd\delta}$
$E_{xy,zx}$	$3l^2mnV_{dd\sigma} + mn(1 - 4l^2)V_{dd\pi} + mn(l^2 - 1)V_{dd\delta}$
E_{xy,x^2-y^2}	$3/2lm(l^2 - m^2)V_{dd\sigma} + 2lm(m^2 - l^2)V_{dd\pi} + lm/2(l^2 - m^2)V_{dd\delta}$
E_{yz,x^2-y^2}	$3/2mn(l^2 - m^2)V_{dd\sigma} - mn[1 + 2(l^2 - m^2)]V_{dd\pi}$ $+ mn[1 + 1/2(l^2 - m^2)]V_{dd\delta}$
E_{zx,x^2-y^2}	$3/2nl(l^2 - m^2)V_{dd\sigma} + nl[1 - 2(l^2 - m^2)]V_{dd\pi}$ $- nl[1 - 1/2(l^2 - m^2)]V_{dd\delta}$
$E_{xy,3z^2-r^2}$	$\sqrt{3}lm[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{dd\sigma} - 2\sqrt{3}lmn^2V_{dd\pi}$ $+ \sqrt{3}/2lm(1 + n^2)V_{dd\delta}$
$E_{yz,3z^2-r^2}$	$\sqrt{3}mn[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{dd\sigma} - \sqrt{3}mn(l^2 + m^2 - n^2)V_{dd\pi}$ $+ \sqrt{3}/2mn(l^2 + m^2)V_{dd\delta}$
$E_{zx,3z^2-r^2}$	$\sqrt{3}ln[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{dd\sigma} + \sqrt{3}ln(l^2 + m^2 - n^2)V_{dd\pi}$ $- \sqrt{3}/2ln(l^2 + m^2)V_{dd\delta}$
$E_{x^2-y^2,x^2-y^2}$	$3/4(l^2 - m^2)V_{dd\sigma} + (l^2 + m^2 - (l^2 - m^2)^2)V_{dd\pi}$ $+ (n^2 + 1/4(l^2 - m^2)^2)V_{dd\delta}$
$E_{x^2-y^2,3z^2-r^2}$	$\sqrt{3}/2(l^2 - m^2)[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]V_{dd\sigma} + \sqrt{3}n^2(m^2 - l^2)V_{dd\pi}$ $+ \sqrt{3}/4(1 + n^2)(l^2 - m^2)V_{dd\delta}$
$E_{3z^2-r^2,3z^2-r^2}$	$[n^2 - 1/2(l^2 + m^2)]^2V_{dd\sigma} + 3n^2(l^2 + m^2)V_{dd\pi}$ $+ 3/4(l^2 + m^2)^2V_{dd\delta}$

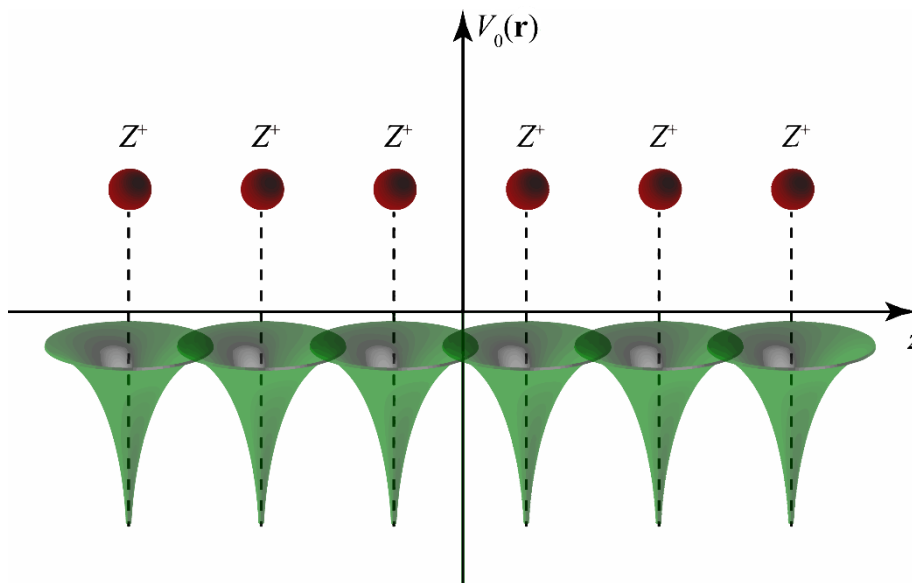
Прилог 4 Периодичност кристалне структуре: Блохова теорема

Кристал је чврстотелни материјал код којег постоји уређеност основних структурних јединица (атома, јона, молекула) (Misra, 2011). Због постојања просторне симетрије, у кристалима је могуће дефинисати основни градивни елемент чијом се translацијом може репродуковати целокупна кристална структура (Harrison, 1989). Код масивних (тродимензионих) кристала овај градивни елемент има облик паралелопипеда и назива се *јединична ћелија* кристала (Bir и Pikus, 1974). Варанојевом (рус. *Воронóй*) декомпозицијом кристалне решетке дефинише се посебна форма јединичне ћелије која садржи минималан број атома и заузима минималну запремину у простору, а назива се Вигнер-Зајцова (мађ. *Wigner*, енгл. *Seitz*) *примитивна ћелија* (Klein, 1988). Произвољни вектор translације изабраног елемента у простору са три димензије је дат следећом једначином (Wigner и Seitz, 1933):

$$\mathbf{T}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i = n_1 \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \cdot \mathbf{a}_3, \quad (\text{П. 4.1})$$

где су \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 *примитивни вектори*, а n_1 , n_2 и n_3 цели бројеви. Претходном једначином је могуће генерисати бесконачан низ дискретних тачака у простору које формирају Бравеову решетку (франц. *Bravais*) (Wigner и Seitz, 1933). Особина translаторне симетрије омогућава да се потенцијал који потиче од атома (јона) кристалне решетке представи као периодична функција координате, тако да за произвољан вектор translације \mathbf{T}_n важи (Bir и Pikus, 1974; Harrison, 1989):

$$V_0(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n). \quad (\text{П. 4.2})$$



Слика П.1. Шематски приказ потенцијала једнодимензионе периодичне кристалне структуре.

Шематски приказ фиктивног потенцијала $V_0(\mathbf{r})$ у праволинијском ланцу атома је дат на сл. П.1. Очигледено је да периодичност $V_0(\mathbf{r})$ одговара примитивним векторима јединичне ћелије у кристалу. С обзиром да је периодична функција координате, потенцијал у кристалу се може представити преко Фуријеовог (франц. *Fourier*) реда:

$$V_0(\mathbf{r}) = \sum_m c_m e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{r}}, \quad (\text{П. 4.3})$$

где су c_m Фуријеови коефицијенти, а \mathbf{Q}_m вектори translације у реципрочном (инверзном) простору. Пошто је потенцијал периодична функција за било који вектор translације \mathbf{T}_n и \mathbf{T}_p мора важити следећа релација (Harrison, 1989):

$$V_0(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n) = V_0(\mathbf{r} + \mathbf{T}_p) = V_0(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 4.4})$$

На основу једначина (П.4.3) и (П.4.4) за посебан случај када је $\mathbf{T}_p = 0$, важи

$$\sum_m c_m e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{T}_n} = \sum_m c_m e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{r}} e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{0}} = \sum_m c_m e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{r}} \cdot 1. \quad (\text{П. 4.5})$$

Из једначине (П.4.5) следи да је $e^{i\mathbf{Q}_m \mathbf{T}_n} = 1$, тј. $\mathbf{Q}_m \mathbf{T}_n = 2\pi N$, где је $N \in \mathbb{Z}$. На основу задњег израза може се закључити да постоји веза између вектора translације у реципрочном простору, \mathbf{Q}_m и вектора translације јединичне ћелије из директног (реалног) простора, \mathbf{T}_n . Слично као за векторе \mathbf{T}_n , могуће је дефинисати скуп вектора \mathbf{Q}_m који одређују реципрочну кристалну решетку (Wigner и Seitz, 1933; Bir и Pikus, 1974):

$$\mathbf{Q}_m = \sum_{i=1}^3 m_i \mathbf{b}_i = m_1 \cdot \mathbf{b}_1 + m_2 \cdot \mathbf{b}_2 + m_3 \cdot \mathbf{b}_3, \quad (\text{П. 4.6})$$

где су m_1 , m_2 и m_3 цели бројеви који представљају број translација, док су примитивни вектори у реципрочном простору \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 повезани са примитивним векторима из реалног простора \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 и \mathbf{a}_3 , следећим релацијама:

$$\mathbf{a}_i \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad (\text{П. 4.7})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_2(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_3(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}. \end{aligned} \quad (\text{П. 4.8})$$

Из претходне анализе може се закључити да је, слично реалном простору, реципрочан простор периодичан са периодом одређеним примитивним векторима у реципрочном простору. Вигнер-Зајцова примитивна ћелија у реципрочном простору, која је одређена векторима \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 и \mathbf{b}_3 , представља *прву Брилуенову зону* (Wigner и Seitz, 1933, Kittel, 1987).

Да би се одредиле енергије и таласне функције носилаца наелектрисања у периодичном кристалу неопходно је решити Шредингерову једначину у којој таласна функција за Бравеову кристалну решетку мора задовољити периодичне Борн-вон Карманове (нем. *Born*, мађ. *von Kármán*) граничне услове. Применом периодичних граничних услова може се показати да је таласна функција периодична функција координате, тако да је за произвољан примитиван вектор \mathbf{a}_i (Bir и Pikus, 1974)

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = \lambda_{m_i} \psi(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 4.9})$$

Као што се може видети из једначине (П.4.9), разлика постоји само на нивоу мултипликативне константе λ_{m_i} . Први корак приликом решавања Шредингерове једначине у

којој фигурише периодични потенцијал јесте да се непозната таласна функција претпостави у форми Блоховог таласа (Bloch, 1929):

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u(\mathbf{r}), \quad (\text{П. 4.10})$$

где је \mathbf{k} таласни вектор носиоца наелектрисања у кристалу, а $u(\mathbf{r})$ брзопроменљива периодична функција са периодом који одговара параметру кристалне решетке. Претпостављени облик таласне функције произилази из познате Блохове теореме која је од изузетног значаја приликом формирања вишезонске $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорије и метода јаке везе.

Блохова теорема има следећу форму (Bloch, 1929, Bir и Pikus, 1974): У идеалној Бравеовој кристалној решетки, могуће је пронаћи базис таласних функција са следећим особинама:

- функције из изабраног базиса су својствена стања једноелектронског хамилтонијана $H(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r})$, без обзира на јачину кристалног потенцијала $V_0(\mathbf{r})$,
- функције из изабраног базиса имају форму Блохових таласа.

Нека је вектору трансляције $\mathbf{T}_n = n_1 \cdot \mathbf{a}_1 + n_2 \cdot \mathbf{a}_2 + n_3 \cdot \mathbf{a}_3$, придружен оператор трансляције $\hat{\mathbf{T}}_n$ који врши просторно померање таласне функције (Bir и Pikus, 1974; Kittel, 1987):

$$\hat{\mathbf{T}}_n \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n). \quad (\text{П. 4.11})$$

Може се лако показати да трансляциони оператор $\hat{\mathbf{T}}_n$ има следеће особине:

$$\hat{\mathbf{T}}_n \hat{\mathbf{T}}_m \psi(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{T}}_m \hat{\mathbf{T}}_n \psi(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{T}}_{n+m} \psi(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 4.12})$$

Пошто кристал поседује трансляциону симетрију, хамилтонијан је периодична функција координате $H(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{T}_n)$, а оператори \hat{H} и $\hat{\mathbf{T}}_n$ комутирају (Bloch, 1929; Kittel, 1987):

$$[\hat{\mathbf{T}}_n, \hat{H}] = \hat{\mathbf{T}}_n \hat{H} - \hat{H} \hat{\mathbf{T}}_n = 0. \quad (\text{П. 4.13})$$

Из једначине (П.4.13) се може закључити да су својствена стања оператора \hat{H} истовремено и својствена стања било ког $\hat{\mathbf{T}}_n$:

$$\hat{H} \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (\text{П. 4.14})$$

$$\hat{\mathbf{T}}_n \psi(\mathbf{r}) = \lambda(\mathbf{T}_n) \psi(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 4.15})$$

Дакле, својствене функције оператора трансляције формирају базис решења једноелектронског хамилтонијана. Такође, може се показати да својствене функције оператора $\hat{\mathbf{T}}_n$ имају форму Блоховог таласа. Константа λ_{n_i} из једначине (П.4.9) се може заменити на следећи начин: $\lambda_{n_i} \rightarrow \exp(2\pi j m_i)$ где бројеви $m_i, i = 1, 2, 3$ не зависе од координате. За вектор у реципрочном простору дефинисан са $\mathbf{k} = m_1 \cdot \mathbf{b}_1 + m_2 \cdot \mathbf{b}_2 + m_3 \cdot \mathbf{b}_3$ и на основу једначине (П.4.10) може се написати

$$u(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}), \quad (\text{П. 4.16})$$

одакле је функција $u(\mathbf{r})$ трансляцијом померена за вредност \mathbf{a}_i :

$$\begin{aligned} u(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) &= e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_i)} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = e^{-j\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-j\mathbf{k}\mathbf{a}_i} e^{2\pi j m_i} \psi(\mathbf{r}) = e^{-j\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-2\pi j m_i} e^{2\pi j m_i} \psi(\mathbf{r}) \\ &= e^{-j\mathbf{k}\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (\text{П. 4.17})$$

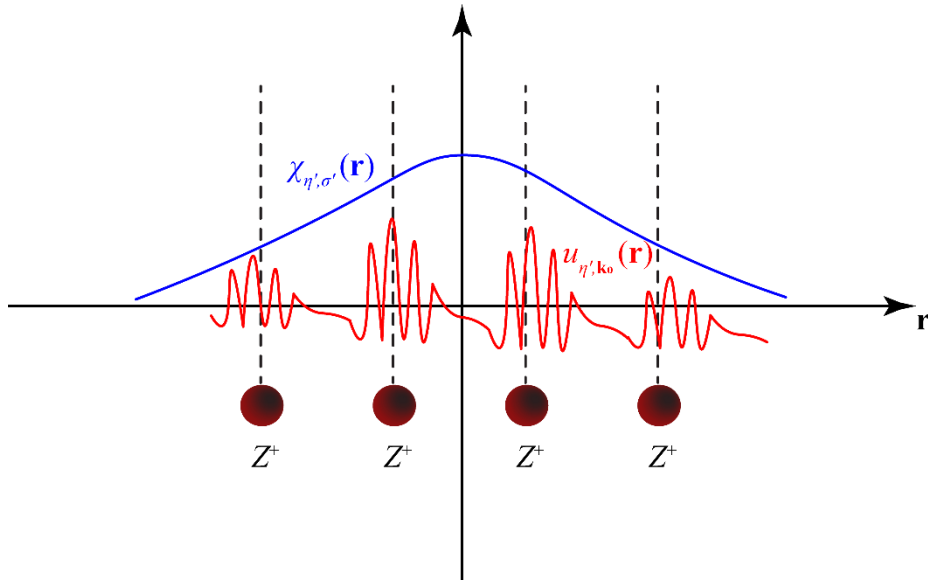
Из једначина (П.4.16) и (П.4.17) у општем случају се може закључити да својствене функције оператора \hat{T}_n имају форму Блоховог таласа (Bloch, 1929) са периодичним брзопроменљивим делом на домену параметра кристалне решетке.

Прилог 5 Теорија анвелопних функција

Теорија анвелопних функција се користи за приближан опис електронских и шупљинских стања у полупроводничком материјалу која су измењена услед присуства спољашњег електромагнетског поља, механичког напрезања или услед присуства дефеката у кристалу попут ваканција или интерстиција (Foreman, 1993; Burt, 1999; Ćukarić, 2015). Значај овој теорији даје и чињеница, да се она може применити и приликом развоја $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела за случај полупроводничких хетероструктура нанометарских димензија у којима су стања носилаца наелектрисања модификована дејством различитих спољашњих, али и унутрашњих фактора као што је зонски офсет на границама хетероспојева (Winkler, 2003). Утицај ових фактора се укључује у модел увођењем пертурбационог потенцијала $V(\mathbf{r})$, који због валидности теорије мора представљати споропроменљиву функцију координате на домену јединичне ћелије кристала. У оквиру ове теорије се полази од једноелектронске Шредингерове једначине у следећем облику (Winkler, 2003; Ćukarić, 2015):

$$\left(\frac{(-i\hbar\nabla)^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \cdot (-i\hbar\nabla) + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (\text{П. 5.1})$$

где је $\psi(\mathbf{r})$ -таласна функција електрона, E -енергија, $V_0(\mathbf{r})$ -детаљни потенцијал који представља периодичну функцију координате са периодом који је једнак параметру кристалне решетке и $V(\mathbf{r})$ -потенцијал којим се моделује пертурбација.



Слика П.2. Промена анвелопне таласне функције и брзопроменљиве Блохове функције у оквиру теорије анвелопних функција.

Пертурбациони потенцијал не фигурише у члану који се односи на спин-орбитну интеракцију, с обзиром да овај члан доминантно зависи од Кулонових интеракција које су везане за област атомског језгра (Winkler, 2003). Овде се непозната таласна функција представља сумом Блохових функција (Bloch, 1929) у центру Брилуенове зоне, $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (Kane, 1956; Kane, 1957):

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\eta',\sigma'} \chi_{\eta',\sigma'}(\mathbf{r}) u_{\eta',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) |\sigma'\rangle, \quad (\text{П. 5.2})$$

где су експанзиони коефицијенти $\chi_{\eta',\sigma'}(\mathbf{r})$ функције координате и модулишу брзопроменљиве Блохове функције $u_{\eta',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$. Коефицијенти $\chi_{\eta',\sigma'}(\mathbf{r})$ се споро мењају на домену јединичне ћелије и називају се *анвелоппне функције*. На сл. П.2 је илустрована разлика у промени анвелоппне функције $\chi_{\eta',\sigma'}(\mathbf{r})$ и брзопроменљиве Блохове функције $u_{\eta',\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ у кристалу. Наредни корак у решавању Шредингерове једначине (П.5.1) је замена $\psi(\mathbf{r})$ са изразом (П.5.2), множење са леве стране функцијом $\langle \sigma u_{\eta,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) |$ и интеграција на домену јединичне ћелије након чега се добија систем једначина у матричном облику (Winkler, 2003):

$$\sum_{\eta',\sigma'=\uparrow,\downarrow} \left\{ \left[E_{\eta'}(\mathbf{0}) + V(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar\nabla}{2m_0} \right] \delta_{\eta,\eta'} \delta_{\sigma,\sigma'} - \frac{1}{m_0} (i\hbar\nabla) \cdot \mathbf{\Pi}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} + \mathbf{\Delta}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'} \right\} \chi_{\eta',\sigma'}(\mathbf{r}) = E \chi_{\eta,\sigma}(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 5.3})$$

Једначина (П.5.3) представља вишезонски $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модел заснован на теорији анвелоппних функција. С обзиром да у полупроводничким хетероструктурама коначних димензија долази до нарушавања транслаторне симетрије, у моделу који је представљен једначином (П.5.3) таласни вектор се представља у форми оператора $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ (Џукарић, 2015). Због тога се, уместо система алгебарских једначина (за случај масивног полупроводника), овде решава систем спрегнутих диференцијалних једначина помоћу нумеричких метода. Из једначине (П.5.3) се види да се пертурбациони потенцијал $V(\mathbf{r})$ укључује модификацијом дијагоналних чланова непертурбованог Хамитонијана. У моделу фигуришу чланови $E_{\eta'}(\mathbf{0})$, $\mathbf{\Pi}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'}$ и $\mathbf{\Delta}_{\eta,\eta',\sigma,\sigma'}$ који се добијају експерименталним путем за сваки полупроводнички материјал посебно. Ови параметри зависе од координате/материјала у хетероструктурама и не комутирају са оператором транслације $\hat{\mathbf{T}}_n$. Да би се обезбедила ермитивност хамилтонијана, којим се моделује структура састављена од више полупроводничких материјала са стрмим међуповршинама, уведе се симетризациона правила у следећем облику (Morrow, 1987; Pötz и Ferry, 1987):

$$P(\mathbf{r})k_i \rightarrow \frac{1}{2} (P(\mathbf{r})\hat{k}_i + \hat{k}_i P(\mathbf{r})), \quad (\text{П. 5.4})$$

$$P(\mathbf{r})k_i k_j \rightarrow \frac{1}{2} (\hat{k}_i P(\mathbf{r})\hat{k}_j + \hat{k}_j P(\mathbf{r})\hat{k}_i), \quad (\text{П. 5.5})$$

за произвољан балковски параметар $P(\mathbf{r})$, где је $i, j \in \{x, y, z\}$. Помоћу вишезонског $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ модела заснованог на теорији анвелоппних функција могуће је израчунати електронску структуру слојевитих наноструктура типа квантне јаме при чему треба водити рачуна да дебљине слојева нису упоредиве са величином јединичне ћелије полупроводничког кристала.

Прилог 6 Теорија пертурбација независних од времена

У оквиру вишезонске $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ теорије за масивне полупроводнике члан сразмеран са $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ и спин-орбитна интеракција се третирају као пертурбације. С обзиром на то, овде ће укратко бити представљена теорија пертурбација независних од времена, пошто се у дисертацији посматрају само хамилтонијани у којима не фигурише време. Ова теорија се још назива и Рејли-Шредингеровом (енгл. *Rayleigh*) пертурбационом теоријом у оквиру које се непознати хамилтонијан H пише у облику (Rayleigh, 1877; Schrödinger, 1926):

$$H(\theta) = H_0 + \theta H^p, \quad (\text{П. 6.1})$$

где је θ -параметар који одређује величину пертурбације, H^p -хамилтонијан пертурбације, а H_0 -непертурбовани хамилтонијан чије су својствене енергије и својствене функције познате (Sakurai, 1994):

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}. \quad (\text{П. 6.2})$$

Непозната својствена функција ψ_n и енергија E_n , хамилтонијана H , се могу представити на следећи начин (Kane, 1956):

$$E_n = E_n^{(0)} + \theta E_n^{(1)} + \theta^2 E_n^{(2)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \theta^i E_n^{(i)}, \quad (\text{П. 6.3})$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \theta \psi_n^{(1)} + \theta^2 \psi_n^{(2)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \theta^i \psi_n^{(i)}. \quad (\text{П. 6.4})$$

Заменом израза (П.6.3) и (П.6.4) у Шредингерову једначину добија се:

$$(H_0 + \theta H^p)(\psi_n^{(0)} + \theta \psi_n^{(1)} + \theta^2 \psi_n^{(2)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \theta E_n^{(1)} + \theta^2 E_n^{(2)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \theta \psi_n^{(1)} + \theta^2 \psi_n^{(2)} + \dots). \quad (\text{П. 6.5})$$

Изједначавањем чланова који стоје уз исти степен параметра θ , формирају се следећи изрази (Galeriu, 2005):

$$H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}, \quad (\text{П. 6.6})$$

$$H_0 \psi_n^{(1)} + H^p \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}, \quad (\text{П. 6.7})$$

$$H_0 \psi_n^{(2)} + H^p \psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)}. \quad (\text{П. 6.8})$$

⋮
⋮
⋮

На основу наведених израза могуће је пронаћи поправке *првог и другог реда* за енергију E_n и својствену функцију ψ_n . Множењем једначине (П.6.7) са $\langle \psi_n^{(0)} |$ и интеграцијом по просторном домену добија се:

$$\langle \psi_n^{(0)} | H_0 - E_n^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle + \langle \psi_n^{(0)} | H^p - E_n^{(1)} | \psi_n^{(0)} \rangle = 0. \quad (\text{П. 6.9})$$

Коришћењем особине ермитивности хамилтонијана H_0 и особине ортонормираности својствених функција $\psi_n^{(0)}$, лако се проналази корекција првог реда за енергију (Sakurai, 1994):

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | H^p | \psi_n^{(0)} \rangle = H_{n,n}^p. \quad (\text{П. 6.10})$$

Корекција првог реда за таласну функцију $\psi_n^{(1)}$ се претпостави као линеарна комбинација својствених таласних функција непертурбованог хамилтонијана:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_m a_{n,m}^{(1)} \psi_m^{(0)}, \quad (\text{П. 6.11})$$

где су $a_{n,m}^{(1)}$ коефицијенти у експанзији у изабраном комплетном скупу ортонормираних функција $\psi_m^{(0)}$. Заменом израза (П.6.11) у једначину (П.6.7) коефицијенти из развоја имају следећи облик (Sakurai, 1994):

$$a_{n,m}^{(1)} = \frac{H_{m,n}^p}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (\text{П. 6.12})$$

при чему

$$H_{m,n}^p = \langle \psi_m^{(0)} | H^p | \psi_n^{(0)} \rangle, \quad (\text{П. 6.13})$$

представља *матрични елемент пертурбације*, где је $m \neq n$. Према теорији пертурбација првог реда својствене енергије и таласне функције имају следећу форму (Кане, 1956):

$$E_n = E_n^{(0)} + H_{n,n}^p, \quad (\text{П. 6.14})$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{m,n}^p}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}. \quad (\text{П. 6.15})$$

Приказана теорија важи само у случају *недегенерисаних стања*. Уколико су стања дегенерисана, $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \rightarrow 0 \Rightarrow a_{n,m}^{(1)} \rightarrow \infty$, тј. израз који дефинише експанзионе коефицијенте поправке таласне функције постаје недефинисан. Користећи исту процедуру као и приликом проналажења израза за корекције првог реда, из једначине (П.6.8) могу се написати својствене енергије и таласне функције користећи се теоријом пертурбација другог реда (Dresselhaus и сар., 1955):

$$E_n = E_n^{(0)} + H_{n,n}^p + \sum_{q \neq n} \frac{|H_{q,n}^p|^2}{E_n^{(0)} - E_q^{(0)}}, \quad (\text{П. 6.16})$$

$$\begin{aligned} \psi_n = & \psi_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{m,n}^p}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} \\ & + \sum_{m \neq n} \left[-\frac{H_{m,n}^p H_{n,n}^p}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2} + \sum_{q \neq n} \frac{H_{m,q}^p H_{q,n}^p}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_q^{(0)})} \right] \psi_m^{(0)}. \end{aligned} \quad (\text{П. 6.17})$$

Прилог 7 Левдинова теорија пертурбација

Левдинова теорија пертурбација се користи за формирање имплицитног и нелинеарног матричног својственог проблема коначних димензија (Löwdin, 1951; Winkler, 2003; Galeriu, 2005). У овој теорији се посматра коначан број зона из скупа A , док се утицај осталих зона из скупа B урачунава у пертурбативном смислу. Помоћу ове теорије се подједнако добро могу описати недегенерисана стања из проводне зоне као и дегенерисана стања од интереса из валентне зоне. Полази се од Шредингерове једначине која ефективно представља скуп алгебарских једначина које се могу написати у матричној форми (Winkler, 2003):

$$\sum_{n=1}^N H_{m,n} a_n = \sum_{n=1}^N E_n \delta_{m,n} a_n, \quad (\text{П. 7.1})$$

где је

$$H_{m,n} = \langle u_{m,0}(\mathbf{r}) | H | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (\text{П. 7.2})$$

$$\delta_{m,n} = \langle u_{m,0}(\mathbf{r}) | u_{n,0}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (\text{П. 7.3})$$

Уколико скуп индекса зона од интереса поделимо на два комплементарна подскупа која одговарају стањима из класе A и класе B , тада се једначина (П.7.1) може написати на следећи начин (Löwdin, 1951):

$$\sum_{n=1}^N (H_{m,n} - E_n \delta_{m,n}) a_n = \sum_{n \neq m}^A H_{m,n} a_n + \sum_{n \neq m}^B H_{m,n} a_n + (H_{m,m} - E_m) a_m = 0. \quad (\text{П. 7.4})$$

Увођењем смене $H_{m,n}/(E_m - H_{m,m}) = X_{m,n}$ (Löwdin, 1951), из једначине (П.7.4) се долази до израза за коефицијенте a_m :

$$a_m = \sum_{\alpha \neq m}^A X_{m,\alpha} a_\alpha + \sum_{\beta \neq m}^B X_{m,\beta} a_\beta. \quad (\text{П. 7.5})$$

Једноставном заменом индекса из једначине (П.7.5) може се доћи до израза за a_β :

$$a_\beta = \sum_{\alpha \neq \beta}^A X_{\beta,\alpha} a_\alpha + \sum_{\gamma \neq \beta}^B X_{\beta,\gamma} a_\gamma. \quad (\text{П. 7.6})$$

Заменом израза (П.7.6) у једначину (П.7.5) и итеративним понављањем овог поступка потребно је елиминисати коефицијенте експанзије за које важи $a_i, i \in B$ (Löwdin, 1951; Galeriu, 2005):

$$a_m = \sum_{\alpha \neq m}^A X_{m,\alpha} a_\alpha + \sum_{\beta \neq m}^B X_{m,\beta} \sum_{\alpha \neq \beta}^A X_{\beta,\alpha} a_\alpha + \dots \quad (\text{П. 7.7})$$

Уколико се посматрају зоне из класе A , $m \in A$, могуће је дефинисати једначину која је еквивалентна једначини (П.7.1):

$$\sum_{\alpha}^A (U_{m,\alpha} - E_{\alpha} \delta_{m,\alpha}) a_{\alpha} = 0, \quad (\alpha \in A), \quad (\text{П. 7.8})$$

где је ренормализовани хамилтонијан $U_{m,\alpha}$ дефинисан на следећи начин (Galeriu, 2005):

$$U_{m,\alpha} = X_{m,\alpha} + \sum_{\beta \neq m}^B X_{m,\beta} X_{\beta,\alpha} + \dots \quad (\text{П. 7.9})$$

Очигледно је да, уколико су матрични елементи $H_{m,n}$ замењени матричним елементима $U_{m,n}$ својствени проблем (П.7.4) на комплетном $A + B$ простору се своди на својствени проблем (П.7.8), који је редукован на класу A . Уколико је $m \in B$, тада се експанзиони коефицијенти могу добити из (П.7.7) (Löwdin, 1951; Galeriu, 2005):

$$a_m = \sum_{\alpha}^A \frac{U_{m,\alpha}}{E - H_{m,m}} a_{\alpha}, \quad (m \in B). \quad (\text{П. 7.10})$$

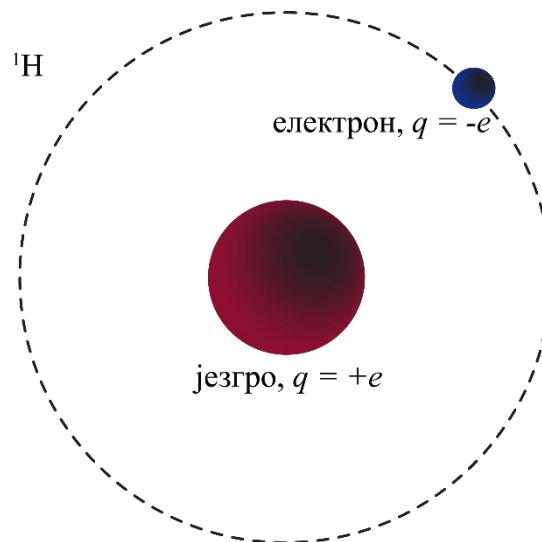
Када се одреде непознати коефицијенти a_{α} , где $\alpha \in A$ решавањем својственог проблема (П.7.8) и применом формуле (П.7.10) је могуће одредити и a_{α} , где $\alpha \in B$.

Прилог 8 Електронска структура атома

Метод јаке везе је заснован на идеји по којој се непозната таласна функција електрона у периодичном кристалу представља као линеарна комбинација атомских орбитала изолованих атома (Bloch, 1929; Slater и Koster, 1954). Због тога ће у овој секцији бити одређен математички облик атомских орбитала као сложених функција просторних координата. Такође, значајно је објаснити и на који начин су атомске орбитале повезане са оператором момента количине кретања $\hat{\mathbf{L}}$, који у изолованом атому има дискретне својствене вредности (Harrison, 1989). Ове вредности су дефинисане орбиталним l и магнетским квантним бројем m , који ближе одређују форму атомских орбитала које се користе у експанзији непознате електронске таласне функције (Dirac, 1958). Најједноставнији приступ је поћи од Шредингерове једначине за атоме сличне водонику. У атому водоника се налази само један електрон који се креће око позитивно наелектрисаног језгра са једним протоном (сл. П.3), па је Шредингерова једначина дата са (Dirac, 1958; Harrison, 1989):

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\eta} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}). \quad (\text{П. 8.1})$$

где је $Z = 1$ -редни број атома водоника, e -елементарно наелектрисување, ϵ_0 -диелектрична пермитивност вакуума, а r -растојање између електрона и језгра.



Слика П.3. Илустрација водениковог атома.

У једначини (П.8.1) је дефинисана редукована маса атома који се састоји од језгра масе M и електрона масе m_0 на следећи начин (Eisberg и Resnick, 1985):

$$\eta = \frac{m_0 M}{m_0 + M}. \quad (\text{П. 8.2})$$

Пошто се електрон креће у пољу са сферном симетријом, једноставније је приликом решавања Шредингерове једначине извршити трансформацију Декартовог координатног система (x, y, z) у сферни координатни систем са координатама (видети сл. П.4):

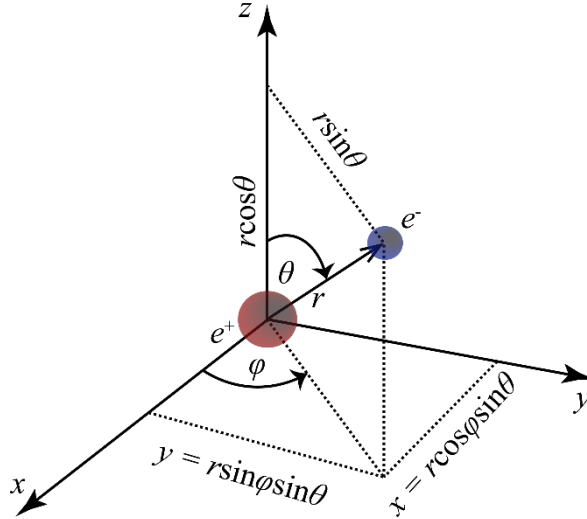
$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, r \in [0, \infty), \quad (\text{П. 8.3})$$

$$\theta = \arccos\left(\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right) = \arctg\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}\right), \theta \in [0, \pi), \quad (\text{П. 8.4})$$

$$\varphi = \text{arctg}(y/x), \varphi \in [0, 2\pi). \quad (\text{П. 8.5})$$

Шредингерова једначина у сферном координатном систему има следећи облик (Eisberg и Resnick, 1985):

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2\eta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right\} \Psi = 0. \quad (\text{П. 8.6})$$



Слика П.4. Трансформација Декартових координата у сферне координате.

Први корак у решавању парцијалне диференцијалне једначине (П.8.6) је раздвајање на више обичних диференцијалних једначина у којима фигуришу појединачне сферне координате. Да би се сложена једначина свела на више једноставнијих једначина претпостави се да је непозната таласна функција сепарабилна по координатама, тј. да се решење једначине (П.8.6) може написати преко производа радијалног $R(r)$ и ангуларног дела $Y(\theta, \varphi)$ (Harrison, 1989):

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi). \quad (\text{П. 8.7})$$

Заменом израза (П.8.7) у једначину (П.8.6) добија се:

$$\frac{Y}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + \frac{2\eta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) RY = 0. \quad (\text{П. 8.8})$$

Множењем једначине (П.8.8) са $r^2/R Y$ долази до раздвајања њених чланова на оне који зависе само од радијалне координате и на чланове који зависе од углова (Dirac, 1958; Eisberg и Resnick, 1985; Harrison, 1989):

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\eta r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) + \frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} = 0. \quad (\text{П. 8.9})$$

Једначина (П.8.9) се може раздвојити на радијалну једначину (Dirac, 1958; Eisberg и Resnick, 1985):

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2\eta r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - S_l = 0, \quad (\text{П. 8.10})$$

и на ангуларну једначину (Eisberg и Resnick, 1985):

$$\frac{1}{Y \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{Y \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} + S_I = 0, \quad (\text{П. 8.11})$$

где S_I представља константу раздвајања (сепарације). Да би се одредила непозната константа S_I прво ће бити решена једначина (П.8.11). Прво се функција Y представи као производ функције зависне од угла елевације $\Theta(\theta)$ и функције зависне од азимута $\Phi(\varphi)$ (Bransden и Joachain, 1983; Eisberg и Resnick, 1985):

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (\text{П. 8.12})$$

Заменом израза (П.8.12) у једначину (П.8.11) добија се:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + S_I \sin^2 \theta + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = 0. \quad (\text{П. 8.13})$$

Слично као за једначину (П.8.9), једначина (П.8.13) се може раздвојити на једначину зависну од угла елевације (Eisberg и Resnick, 1985):

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + S_I \sin^2 \theta - S_{II} = 0, \quad (\text{П. 8.14})$$

и једначину зависну од азимута:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + S_{II} = 0, \quad (\text{П. 8.15})$$

где је S_{II} нова константа раздвајања. Једначина (П.8.15) је обична диференцијална једначина другог реда са константним коефицијентима чијим се решавањем добија (Bransden и Joachain, 1983; Eisberg и Resnick, 1985)

$$\Phi(\varphi) = c e^{im\varphi}, \quad (\text{П. 8.16})$$

$$S_{II} = m^2, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (\text{П. 8.17})$$

Овим је дефинисан математички облик азимутног дела таласне функције $Y(\theta, \varphi)$. Сада је потребно пронаћи и математички облик за део функције који зависи од угла елевације (или само елевације). Први корак је замена (П.8.17) у (П.8.14):

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(S_I - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (\text{П. 8.18})$$

Да би се решила ова једначина, могуће је функцију $\Theta(\theta)$ заменити новом функцијом $P(\cos \theta) = \Theta(\theta)$, $t = \cos \theta$, приликом чега долази до промене облика извода по углу θ :

$$\frac{d}{d\theta} = \frac{dt}{d\theta} \frac{d}{dt} = -\sin \theta \frac{d}{dt}. \quad (\text{П. 8.19})$$

Наредни корак је замена (П.8.19) у (П.8.18):

$$\frac{d}{dt} \left(\sin^2 \theta \frac{dP}{dt} \right) + \left(S_l - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0. \quad (\text{П. 8.20})$$

Уколико се искористи идентитет $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta = 1 - t^2$ једначину (П.8.20) је могуће написати (Eisberg и Resnick, 1985):

$$\frac{d}{dt} \left((1 - t^2) \frac{dP}{dt} \right) + \left(S_l - \frac{m^2}{1 - t^2} \right) P = 0. \quad (\text{П. 8.21})$$

Ова једначина има облик опште Лежандрове (франц. *Legendre*) диференцијалне једначине чија су решења придружени Лежандрови полиноми:

$$P_l^m = (1 - t^2)^{\frac{m}{2}} \left[a_0 \sum_{i=0}^{\infty} \frac{a_{2i}}{a_0} t^{2i} + a_1 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{a_{2i+1}}{a_1} t^{2i+1} \right], \quad (\text{П. 8.22})$$

$$a_{i+2} = \frac{(i + m)(i + m + 1) - S_l}{(i + 1)(i + 2)} a_i. \quad (\text{П. 8.23})$$

Из рекурзивне формуле (П.8.23) се долази до услова конвергенције једначине (П.8.22):

$$S_l = l(l + 1), l \in \mathbb{Z}. \quad (\text{П. 8.24})$$

На основу особина Лежандровог полинома, l ограничава вредности m на интервал: $-l \leq m \leq l$ (Harrison, 1989). Пошто је из услова конвергенције одређена вредност константе сепарације S_l , сада је могуће вратити се на анализу радијалне једначине по непознатој функцији $R(r)$. Коришћењем израза (П.8.24) добија се (Dirac, 1958; Eisberg и Resnick, 1985):

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[\frac{2\eta r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) - l(l + 1) \right] R = 0. \quad (\text{П. 8.25})$$

Једначина (П.8.25) се може свести на облик Лагерове (франц. *Laguerre*) једначине чија су решења придружени Лагерови полиноми. Да би се то урадило, први корак је дефинисање функције:

$$f = rR, \quad (\text{П. 8.26})$$

на основу које се може увести следећа замена:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = r \frac{d^2 f}{dr^2}. \quad (\text{П. 8.27})$$

Други корак је поједностављивање нотације увођењем следеће замене:

$$-\frac{2\eta}{\hbar^2} E = \frac{\epsilon^2}{4}, \quad (\text{П. 8.28})$$

након чега једначина (П.8.25) поприма нови облик:

$$\frac{d^2 f}{dr^2} + \left[-\frac{\epsilon^2}{4} + \frac{2\eta}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{l(l + 1)}{r^2} \right] f = 0. \quad (\text{П. 8.29})$$

Коначно, последња замена коју је потребно увести је дата преко следећег израза:

$$t = r\epsilon, \quad (\text{П. 8.30})$$

на основу које се добија једначина (Dirac, 1958):

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2\eta}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon t} - \frac{l(l+1)}{t^2} \right] f(t) = 0. \quad (\text{П. 8.31})$$

Једначина (П.8.31) је Лагерова једначина чија решења су придружени Лагерови полиноми:

$$f_j^k(t) = t^{\frac{(k+1)}{2}} e^{-\frac{t}{2}} L_j^k(t), \quad (\text{П. 8.32})$$

где су $L_j^k(t)$ генералисани Лагерови полиноми реда j . Овде је $\frac{2\eta}{\hbar^2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} = \frac{2j+k+1}{2}$ и $l(l+1) = \frac{k^2-1}{4}$. Укупна таласна функција има облик:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) = AR_{n,l}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}, \quad (\text{П. 8.33})$$

где је A константа која се добија из услова ортонормираности таласне функције, док је $R_{n,l}(r)$ радијални део укупне таласне функције. Функције $Y_l^m(\theta, \varphi) = P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$ се називају *сферни хармоници* и оне се користе као атомске орбитале за конструкцију непознате електронске таласне функције у полупроводничком кристалу у оквиру формализма јаке везе. Сферни хармоници су својствена стања оператора момента количине кретања \hat{L}^2 и \hat{L}_z (Harrison, 1989):

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (\text{П. 8.34})$$

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (\text{П. 8.35})$$

За сферне хармонике важи особина ортогоналности:

$$\langle Y_l^m(\theta, \varphi) | Y_{l'}^{m'}(\theta, \varphi) \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (\text{П. 8.36})$$

и они формирају комплетан нормиран скуп функција (Ferrers, 1877):

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |Y_l^m(\theta, \varphi)\rangle \langle Y_l^m(\theta, \varphi)| = 1. \quad (\text{П. 8.37})$$

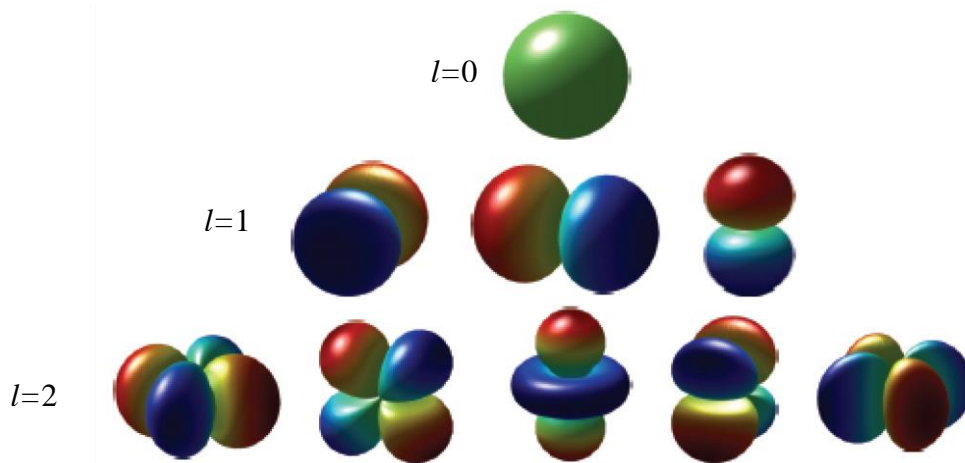
Помоћу сферних хармоника је могуће представити било коју функцију $F(\theta, \varphi)$:

$$F(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_l^m Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (\text{П. 8.38})$$

Изрази за неколико првих хармоника имају следећи облик:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}},$$

$$\begin{aligned}
 Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \\
 Y_1^{\pm 1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}, \\
 Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \\
 Y_2^{\pm 1} &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}, \\
 Y_2^{\pm 2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i2\varphi}.
 \end{aligned}
 \tag{П. 8.39}$$

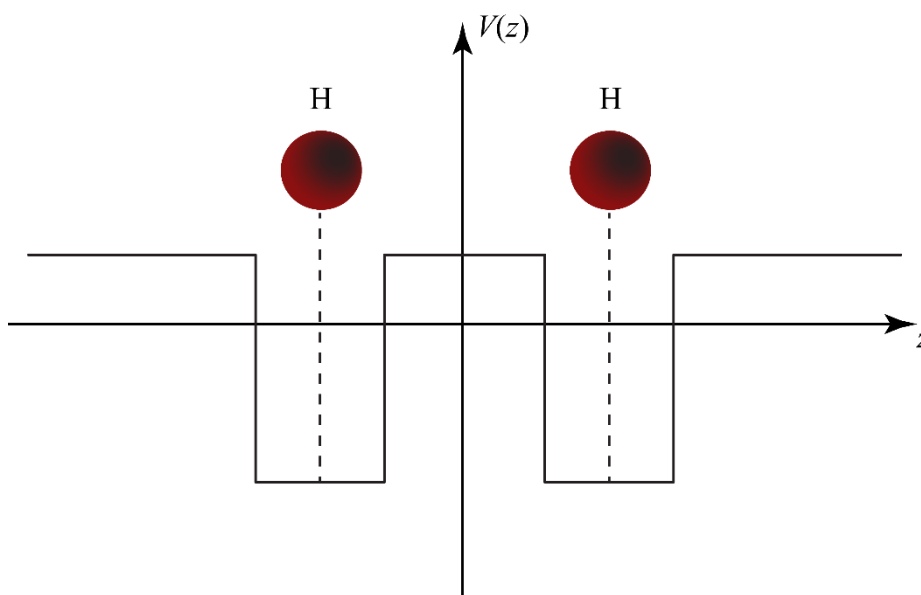


Слика П.5. Угаона зависност квадрата модула сферних хармоника који се користе као атомске орбитале у методу јаке везе. Први ред: s -орбитала; Други ред: p -орбитале; Трећи ред: d -орбитале (преузето из референце Goldmann, 2014).

На сл. П.5 су представљене просторне зависности за сферне хармонике у случају када је $l=0$ (s -орбитала), $l=1$ (p -орбитале) и $l=2$ (d -орбитале).

Прилог 9 Случај двоатомског молекула

У основи метода јаке везе стоји идеја да се вишеатомски системи, као што су молекули или кристални материјали, могу описати уз претпоставку да су електрони у појединачним атомима релативно јако локализовани (везани) и слабо спрегнути са суседним атомима (Harrison, 1989). Иако ова претпоставка није у реалним случајевима увек тачна, она омогућава формирање једноставног модела помоћу којег се релативно тачно описује зонска структура у полупроводничким материјалима. У овој секцији ће бити представљен случај најједноставнијег хомополарног двоатомског молекула H_2 . Овај молекул се састоји од два атома водоника повезана ковалентном везом.



Слика П.6. Модел хомополарног двоатомског молекула. Поједностављени модел две идентичне спрегнуте квантне јаме.

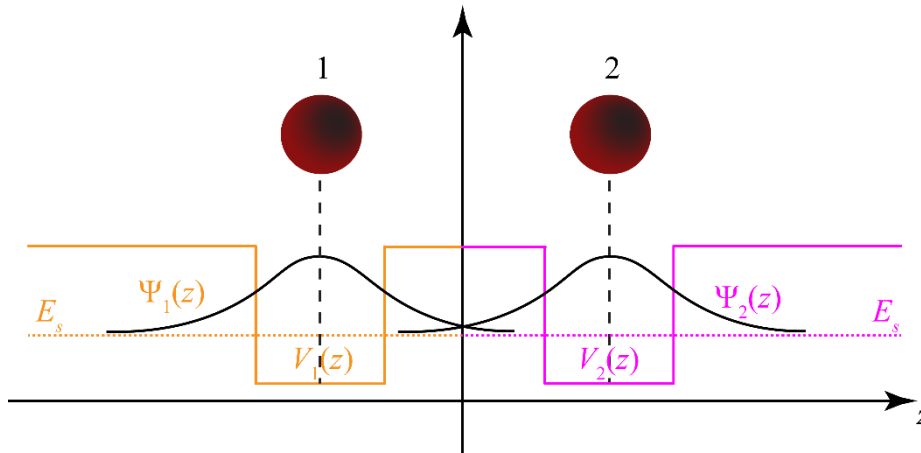
Услед одбојног Кулоновог потенцијала између нуклеуса атома водоника (протона) овакав молекул се може приближно моделовати помоћу две идентичне, али спрегнуте квантне јаме (видети сл. П.6) (O'Reilly, 2003). Да би се поједноставило објашњење интеракције између атома, биће размотрен једноставан 1Д случај две спрегнуте квантне јаме. У моделу јаке везе, две квантне јаме са сл. П.6 се прво посматрају одвојено. Појединачне квантне јаме се моделују помоћу тзв. „непертурбованог“ потенцијала. Непертурбовани потенцијал леве квантне јаме је означен са $V_1(z)$, док је потенцијал десне квантне јаме означен са $V_2(z)$ (видети сл. П.7). Решавањем Шредингерове једначине за леву квантну јаму добијају се енергија E_s и таласна функција $\Psi_1(z)$, док су решења Шредингерове једначине за десну квантну јаму означена са E_s и $\Psi_2(z)$. У реалном 3Д случају молекула H_2 , $\Psi_1(z)$ и $\Psi_2(z)$ би одговарале $1s$ орбиталама. С обзиром да су квантне јаме идентичне, добијене енергије имају исту вредност, док су таласне функције локализоване на исти начин. Потенцијал система од две спрегнуте квантне јаме једнак је збиру појединачних потенцијала:

$$V(z) = V_1(z) + V_2(z). \quad (\text{П. 9.1})$$

Први корак у развоју модела јаке везе је коришћење таласних функција изолованих квантних јама $\Psi_1(z)$ и $\Psi_2(z)$ као базисних функција приликом експанзије непознате таласне функције $\Psi(z)$ у сложеном систему. За ове таласне функције се може рећи да су приближно ортогоналне у случају када је баријера између јама довољно широка. Ово је основна претпоставка у моделу по којој су таласне функције већим делом ограничене на област јаме,

са веома малом вероватноћом налажења и у баријери. Непозната таласна функција $\Psi(z)$ се може написати као линеарна комбинација таласних функција $\Psi_1(z)$ и $\Psi_2(z)$ (Harrison, 1989; O'Reilly, 2003):

$$\Psi(z) = c_1\Psi_1(z) + c_2\Psi_2(z). \quad (\text{П. 9.2})$$



Слика П.7. Две „непертурбоване“ квантне јаме са потенцијалима $V_1(z)$ и $V_2(z)$. Решења Шредингерове једначине за прву квантну јаму су E_s и $\Psi_1(z)$, док су решења за другу квантну јаму означена са E_s и $\Psi_2(z)$.

На основу (П.9.2) својствени проблем се може написати у матричном облику:

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{П. 9.3})$$

У матрици хамилтонијана из једначине (П.9.3) матрични елемент H_{11} има форму:

$$H_{11} = \int \Psi_1^*(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V_1(z) + V_2(z) \right) \Psi_1(z) dz = \langle 1|H|1 \rangle. \quad (\text{П. 9.4})$$

С обзиром на претпоставку да је баријера довољно широка, таласна функција $\Psi_1(z) \cong 0$ у области десне баријере која се описује потенцијалом $V_2(z)$. Одавде следи да се једначина (П.9.4) такође може апроксимирати:

$$H_{11} \cong \int \Psi_1^*(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} + V_1(z) \right) \Psi_1(z) dz = E_s. \quad (\text{П. 9.5})$$

У изразу (П.9.5), $H_{11} \cong E_s$ зато што је потенцијална енергија првог атома умањена за потенцијалну енергију другог атома. На сличан начин се може показати да је $H_{22} = \langle 2|H|2 \rangle = H_{11} \cong E_s$. С обзиром да је $\Psi_1(z) \cong 0$ у десној јами и $\Psi_2(z) \cong 0$ у левој јами интеграл преклапања таласних функција у области јама и у спољашњим баријерама се могу занемарити. Интеракције у баријери између јама неће бити занемарене с обзиром да таласне функције у овој области имају малу али коначну вредност. Интератомски матрични елементи у области баријере се дефинишу на следећи начин:

$$H_{12} = \int_b \Psi_1^*(z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \Psi_2(z) dz = \langle 1|H|2 \rangle = -V_{ss}. \quad (\text{П. 9.6})$$

Изабрана ознака за матрични елемент $H_{12} = \langle 1|H|2 \rangle = -V_{ss}$ је у складу са Слејтер-Костеровом нотацијом. Према уведеним апроксимацијама једначина (П.9.3) се сада може написати као (Harrison, 1989):

$$\begin{bmatrix} E_s & -V_{ss} \\ -V_{ss}^* & E_s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}. \quad (\text{П. 9.7})$$

Коефицијенти експанзије у оквиру ове упрошћене анализе припадају скупу реалних бројева, док у општем случају ови коефицијетни могу да буду комплексни бројеви (Harrison, 1989). Матрични елементи H_{12} и H_{21} се називају и *ковалентним енергијама*. Својствене вредности једначине (П.9.7) се проналазе из услова:

$$\begin{vmatrix} E_s - E & -V_{ss} \\ -V_{ss}^* & E_s - E \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{П. 9.8})$$

одакле произилази квадратна једначина:

$$(E_s - E)^2 - |V_{ss}|^2 = E^2 - 2E_s E + E_s^2 - |V_{ss}|^2 = 0. \quad (\text{П. 9.9})$$

Својствене вредности једначине (П.9.7) су:

$$E = E_s \pm |V_{ss}|. \quad (\text{П. 9.10})$$

Из једначине (П.9.10) се може закључити да ће и у оквиру сложенијег модела, попут молекула H_2 , доћи до симетричног цепања енергије E_s на два поднивоа од којих један има увећану, а други умањену енергију за вредност $|V_{ss}|$ (Harrison, 1989):

$$E_a = E_s + |V_{ss}|, \quad (\text{П. 9.11})$$

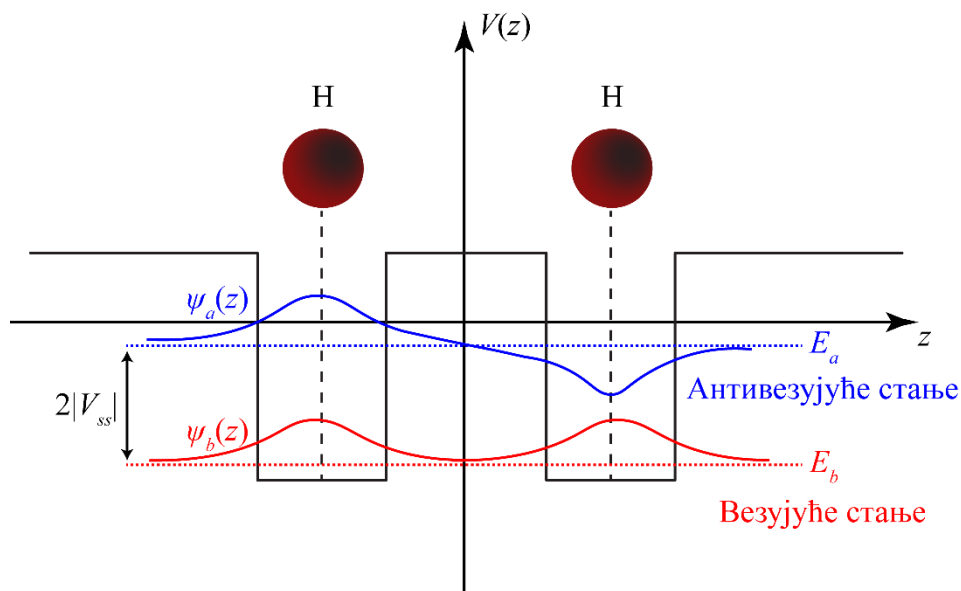
$$E_b = E_s - |V_{ss}|. \quad (\text{П. 9.12})$$

Код молекула водоника раздвајање енергетских стања потиче од спрезања $1s$ орбитала суседних атома. Заменом израза (П.9.11) и (П.9.12) у (П.9.7) могуће је пронаћи непознате коефицијенте c_1 и c_2 . Применом услова нормираности, таласна функција која одговара енергији E_a има облик (O'Reilly, 2003):

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 - \Psi_2), \quad (\text{П. 9.13})$$

док се таласна функција која одговара енергији E_b може написати на следећи начин (O'Reilly, 2003):

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 + \Psi_2). \quad (\text{П. 9.14})$$



Слика П.8. Илустрација формирања везујућих и антивезујућих орбитала у хомополарном двоатомском молекулу H_2 помоћу поједностављеног примера система две идентичне спрегнуте квантне јаме.

Илустрација ових таласних функција је представљена на сл. П.8, одакле се лако може уочити да је ψ_a непарна функција, док је ψ_b парна функција координате. Стање ниже енергије E_b је представљено симетричном линеарном комбинацијом атомских орбитала и назива се *везујуће стање*, док је стање више енергије E_a представљено антисиметричном линеарном комбинацијом атомских орбитала и назива се *антивезујуће стање* (Harrison, 1989; O'Reilly, 2003). Цепане дегенерисаних стања атома у случају када се приближе један другом је феномен који се дешава и у полупроводничким кристалима (Harrison, 1989). Полупроводнички кристали се састоје од много већег броја атома, што узрокује појаву низа дискретних стања блиских енергија које се организују у енергетске зоне (Harrison, 1989; O'Reilly, 2003). Модел постаје још компликованији кад се у разматрање укључи већи број орбитала по појединачном атому што додатно компликује рачун услед појаве великог броја матричних елемената између различитих орбитала. Ово доводи до повећања нумеричке комплексности модела, што знатно умањује брзину рачунања. У оквиру емпиријског метода јаке везе врши се параметризација мањег броја матричних елемената фитовањем на вредности добијене помоћу сложенијих модела заснованих на првим принципима, што значајно убрзава време израчунавања и смањује захтеве за рачунарским ресурсима.

Биографија аутора

Душан (Бранислав) Топаловић рођен је 28.03.1989. године у Прибоју. Основну школу и гимназију је завршио у Новој Вароши као носилац Вукове дипломе. Основне академске студије на Електротехничком факултету у Београду, студијски програм Електротехника и рачунарство, уписао је 2008. године. Дипломирао је 29.06.2012. године на одсеку за Физичку електронику, смер Наноелектроника, оптоелектроника и ласерска техника, са просечном оценом 8,64 и одбрањеним завршним радом „Упоредна анализа методе коначних разлика и методе коначних елемената за решавање Шредингерове једначине у раванској геометрији“, чиме је стекао стручно звање дипломирани инжењер електротехнике и рачунарства. Мастер академске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, студијски програм Електротехника и рачунарство, модул Наноелектроника и фотоника, уписао је 2013. године. Мастер академске студије је завршио 03.07.2013. године, са просечном оценом 10,00, одбранивши завршни рад „Спин-орбитна интеракција у валентној зони полупроводничке квантне јаме“, чиме је стекао стручно звање мастер инжењер електротехнике и рачунарства. Докторске студије на Електротехничком факултету Универзитета у Београду, модул Наноелектроника и фотоника уписао је 2013. године. Положио је све испите са просечном оценом 10,00 и испунио све обавезе прописане студијским програмом сакупивши предвиђених 120 ЕСПБ.

Од 01.10.2013. године запослен је у Лабораторији за заштиту од зрачења и заштиту животне средине, Института за нуклеарне науке „Винча“, Универзитета у Београду. У звање истраживач сарадник је изабран 02.04.2015. године, а реизабран 26.04.2018. године. Научно-истраживачки рад Душана Б. Топаловића се одвија у оквиру области наноелектронике. У ужем смислу посебно је заинтересован за проучавање егзистенције стања тополошког изолатора у наносистемима различите димензионалности и геометрије који се базирају на HgTe и фосфорену. Поред научно-истраживачког рада Душан Б. Топаловић учествује и у активностима Лабораторије за заштиту од зрачења и заштиту животне средине, Института за нуклеарне науке „Винча“. У лабораторији је ангажован на истраживању оптималних метода калибрације сензора за широку примену помоћу метода вештачке интелигенције. Од школске 2018/19. године ангажован је приликом извођења наставе на Машинском факултету, Универзитета у Београду, на предмету Електротехника, на катедри за Физику и електротехнику. Добитник је награде за најбољи рад младог истраживача у оквиру стручне секције Микроелектроника и оптоелектроника, 57 ЕТРАН конференције, Златибор, јун 3-6, 2013. године. Додатна усавршавања је стекао као гостујући истраживач на Департману за физику, Универзитета у Антверпену, Антверпен, Белгија и у Норвешком институту за истраживање ваздуха, Кјелер, Норвешка. Служи се енглеским језиком.

Изјава о ауторству

Име и презиме аутора Душан Топаловић

Број индекса 2013/5008

Изјављујем

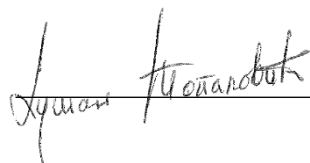
да је докторска дисертација под насловом

Анализа и моделовање електронских стања у HgTe наноструктурама

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да дисертација у целини ни у деловима није била предложена за стицање друге дипломе према студијским програмима других високошколских установа;
- да су резултати коректно наведени и
- да нисам кршио/ла ауторска права и користио/ла интелектуалну својину других лица.

Потпис аутора

У Београду, 08.07.2020.



Изјава о истоветности штампане и електронске верзије докторског рада

Име и презиме аутора Душан Топаловић

Број индекса 2013/5008

Студијски програм Наноелектроника и фотоника

Наслов рада Анализа и моделовање електронских стања у HgTe наноструктурама

Ментор др Владимир Арсоски, ванредни професор

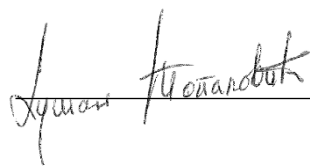
Изјављујем да је штампана верзија мог докторског рада истоветна електронској верзији коју сам предао/ла ради похрањивања у **Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду**.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци везани за добијање академског назива доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада.

Ови лични подаци могу се објавити на мрежним страницама дигиталне библиотеке, у електронском каталогу и у публикацијама Универзитета у Београду.

Потпис аутора

У Београду, 08.07.2020.



Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Анализа и моделовање електронских стања у HgTe наноструктурама

која је моје ауторско дело.

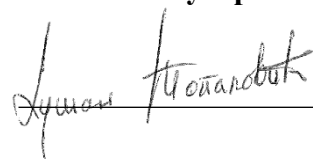
Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Београду и доступну у отвореном приступу могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
- ③ Ауторство – некомерцијално – без прерада (CC BY-NC-ND)
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)
5. Ауторство – без прерада (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)
(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци. Кратак опис лиценци је саставни део ове изјаве).

Потпис аутора

У Београду, 08.07.2020.



1. **Ауторство.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
2. **Ауторство – некомерцијално.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
3. **Ауторство – некомерцијално – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
4. **Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
5. **Ауторство – без прерада.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
6. **Ауторство – делити под истим условима.** Дозвољаваате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.