

# Polovodiče, topologické izolátory

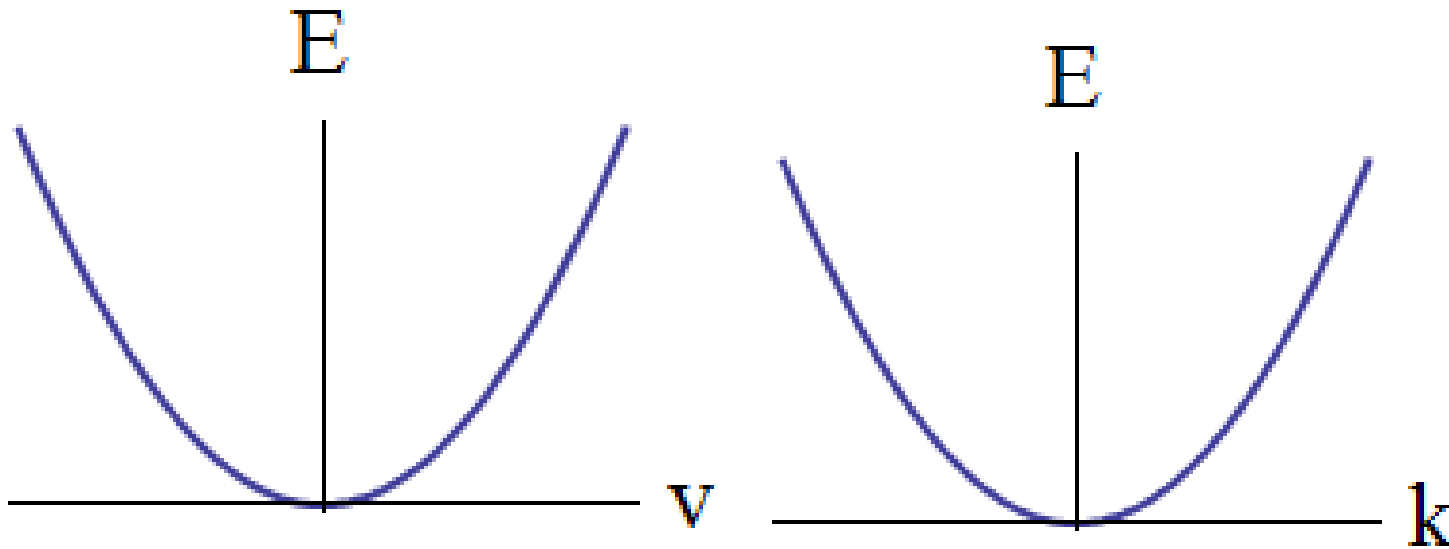
Prezentace výzkumu  
ÚFKL PŘF + CEITEC

O. Caha

# Osnova

- Krátké a stručné přiblížení pásového modelu pevných látek
- Rtg difrakční metody
- polovodiče se širokým pásem zakázaných energií
- topologické izolátory

# Pásová struktura



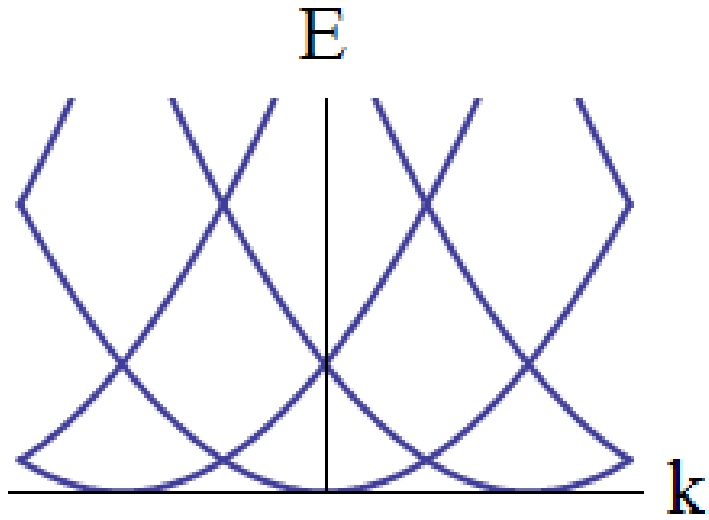
Závislost kinetické energie elektronu na rychlosti

$$E = mv^2/2$$

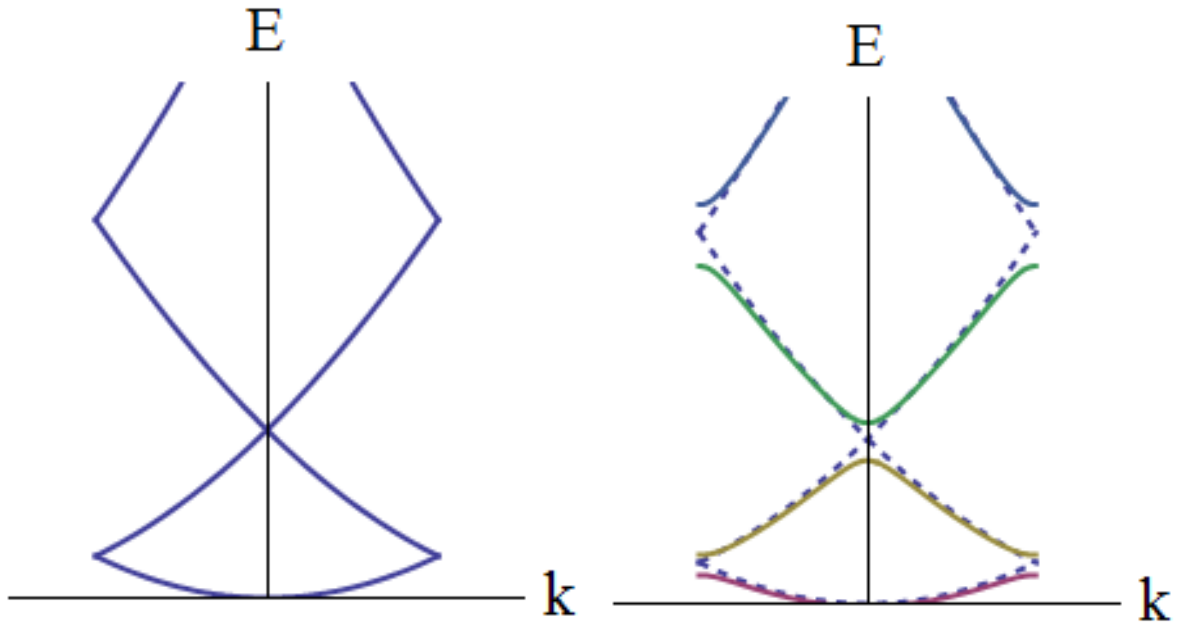
hybnost  $p = mv$   $E = p^2/2m$

vlnový vektor  $p = \hbar k$   $E = \hbar^2 k^2 / 2m$

# Pásová struktura

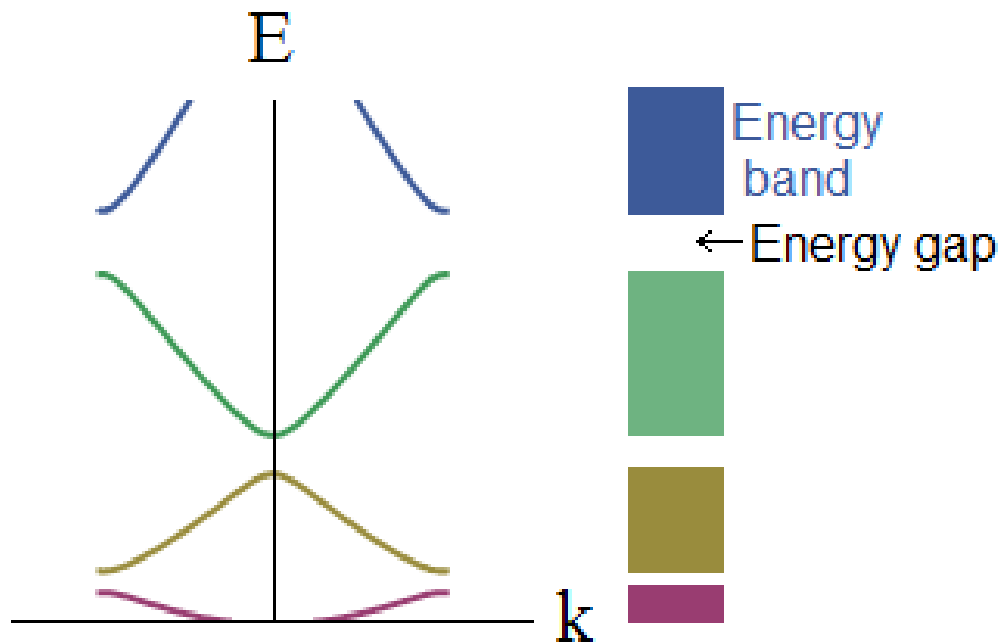


Elektron v krystalové mříži



Vliv elektrostatické interakce s jádry atomů i elektrony navzájem

# Pásová struktura



Pásová struktura

Pauliho vylučovací princip

Kovy: zcela zaplněný pás  
snadná vedení proudu

Zcela zaplněný pás izolátory a polovodiče.

Polovodiče mají zakázaný pás relativně úzký (do cca 4eV), možnost tepelné excitace elektronů, dopování

# Pásová struktura

Periodic Table of the Elements © www.elementsdatabase.com

1 H																	2 He
3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
55 Cs	56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
87 Fr	88 Ra	89 Ac	104 Unq	105 Unp	106 Unh	107 Uns	108 Uno	109 Une	110 Unn								

- hydrogen
- alkali metals
- alkali earth metals
- transition metals
- poor metals
- nonmetals
- noble gases
- rare earth metals

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

# Rtg difrakce

Rentgenové záření má energii řádově keV, vlnové délky 0.01 až 1nm, srovnatelné se vzdáleností atomů v krystalu

Rtg difrakce umožňuje určování:

- krystalické struktury, uspořádání atomů, fázové přechody mezi různými strukturami
- polykrystaly - velikosti zrn, preferenční orientace
- tenké vrstvy od monoatomárních vrstev
- defekty v krystalech
- ....

# Polovodiče se širokým pásem zakázaných energií

Optoelektronika

možnost vybuzení celého spektra viditelného záření (2 až 3 eV)

LED osvětlovací zdroje - GaN

NC 2014: Isamu Akasaki, Hiroši Amano a Shuji Nakamura

“za vývoj modrých světelných diod umožňujících vytvoření nového, ekologického světelného zdroje”



# Polovodiče se širokým pásem zakázaných energií

Výkonová elektronika:

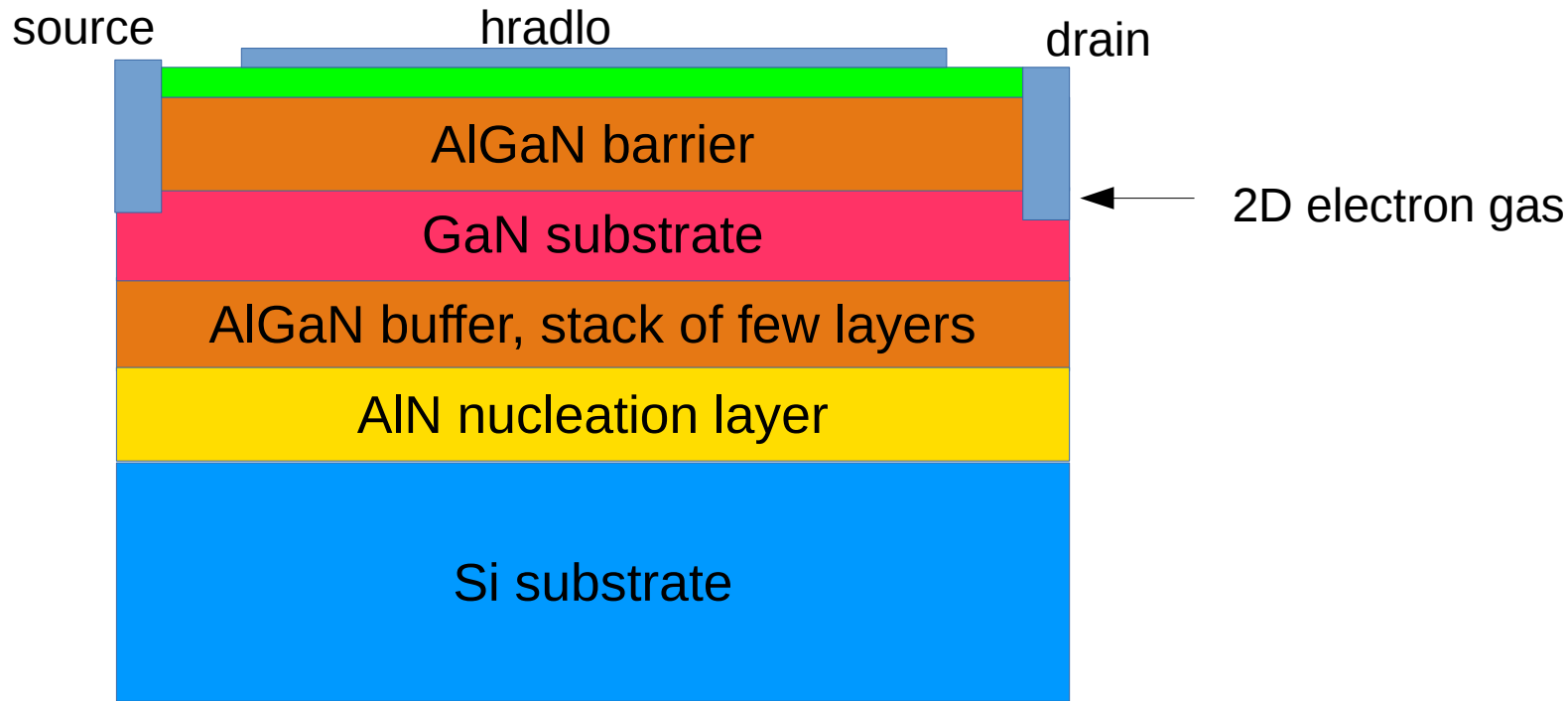
širší pás zakázaných energií → vyšší průrazné napětí → menší rozměry výkonových součástek → rychlejší spínací a usměrňovací prvky →

- 1) možnost vypínání momentálně nepotřebných obvodů → úspora energie
- 2) menší ztráty při přepínání → vyšší účinnost napájecích obvodů → úspora energie
- 3) vyšší účinnost DC/AC konverze na vyšších frekvencích
- 4) menší rozměry součástek - nižší výrobní náklady
- 5) ...

# Polovodiče se širokým pásem zakázaných energií

Materiál	band gap (eV)	průrazné napětí (kV/cm)	pohyblivost (cm <sup>2</sup> /V.s)
Si	1.12	300	1400
GaN	3.17	5000	1000
SiC 4H	3.3	3000 až 5000	900
SiC 6H	3.0	3000 až 5000	400

# GaN HEMT



- Substrate Si (111)
- (Al,Ga)N buffer with gradually increasing Ga concentration
- GaN layer, cca 1 $\mu$ m
- Near interface GaN channel for HEMT device
- Doped AlGaN barrier, cca 20-30nm
- Passivation and further processing layers Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, AlN

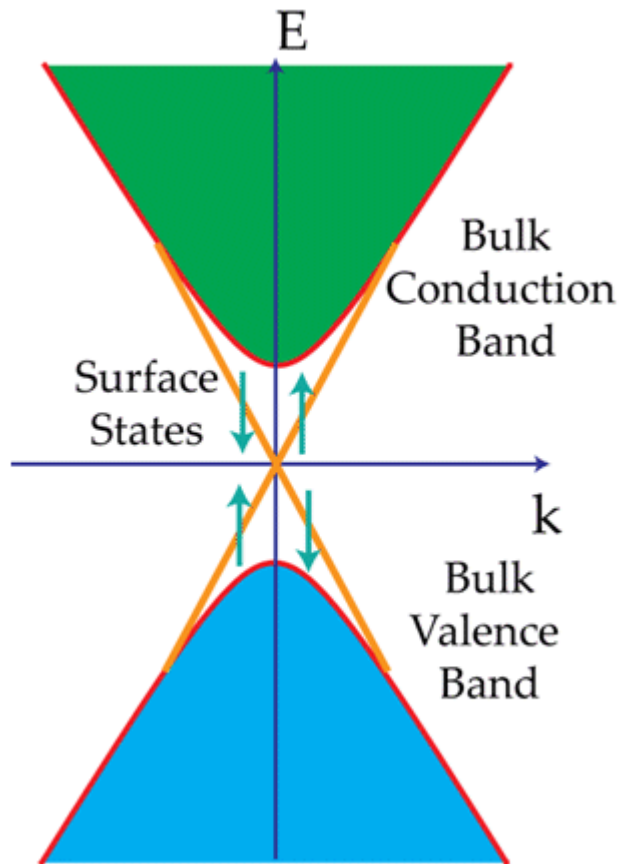
# Polovodiče

Spolupráce s ON Semiconductor (Rožnov pod Radhoštěm)

možnost stáže ve výrobním podniku

# Topologické izolátory

## Pásová struktura topologického izolátoru



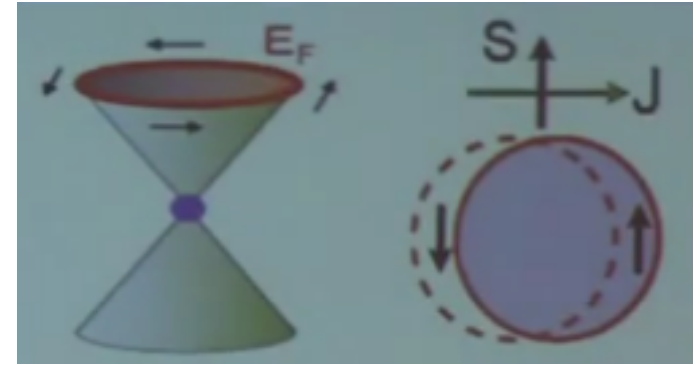
Povrchové stavy polarizovaného spinu

NC 2016: David J. Thouless, Duncan Haldane a Michael Kosterlitz  
“za teoretické objevy topologických fází hmoty a topologických fázových přechodů”

# Topologické izolátory

Vlastnosti topologických izolátorů:

- proud je úměrný magnetizaci
  - nové aplikační možnosti
- Absence zpětného rozptylu elektronů
  - vysoké pohyblivosti až  $10000\text{cm}^2/\text{Vs}$ , elektronika s malým příkonem
- Robustní vůči nemagnetickým nečistotám
  - povrchové stavy jsou důsledkem symetrie



# Topologické izolátory

Další možné aplikace:

- kvantové počítače
- spintronicke součástky
- ...

# Topologické izolátory

Problémy:

současně známe materiály  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$

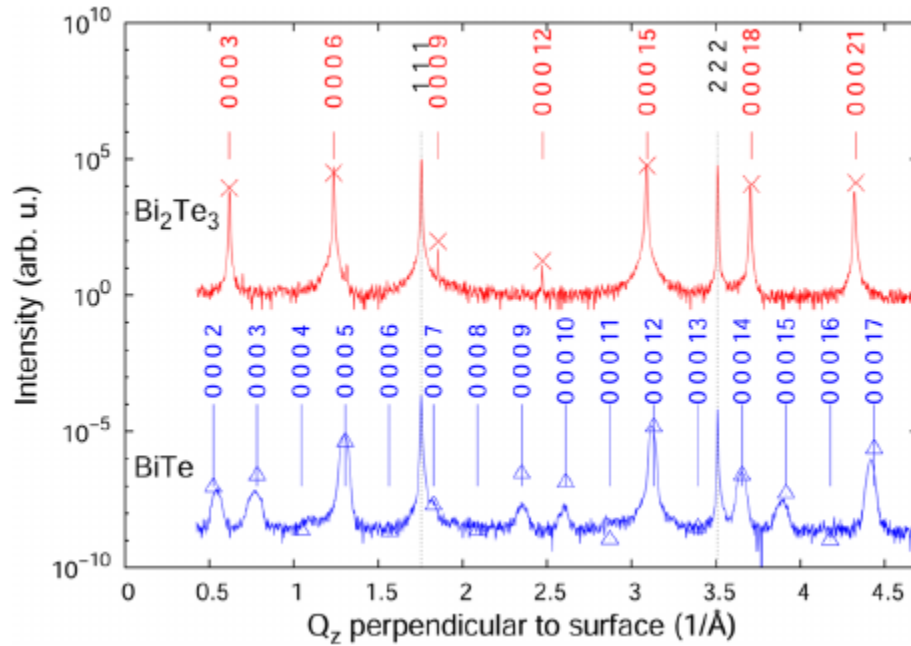
$(\text{Pb},\text{Sn})\text{Te}$ ,  $(\text{Pb},\text{Sn})\text{Se}$ , atd mají úzký pás zakázaným energií (0.2 až 0.3 eV)

velká koncentrace elektronů v objemu materiálu, které převáží vliv povrchových stavů



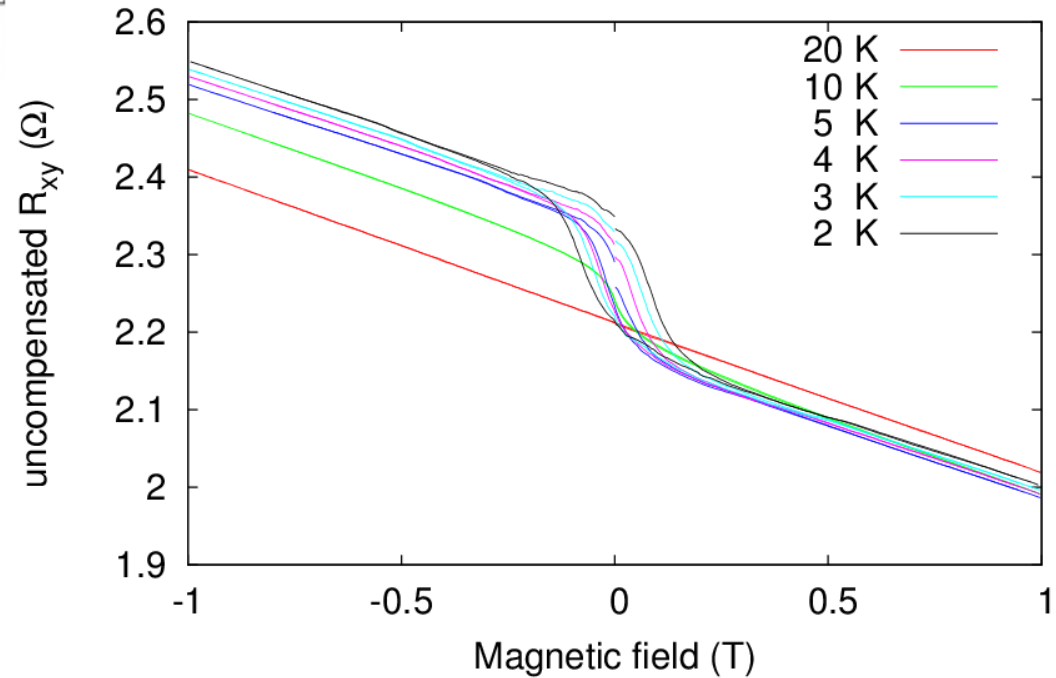
# Topologické izolátory

Spolupráce s JKU Linz - strukturní analýza vrstev topologických izolátorů



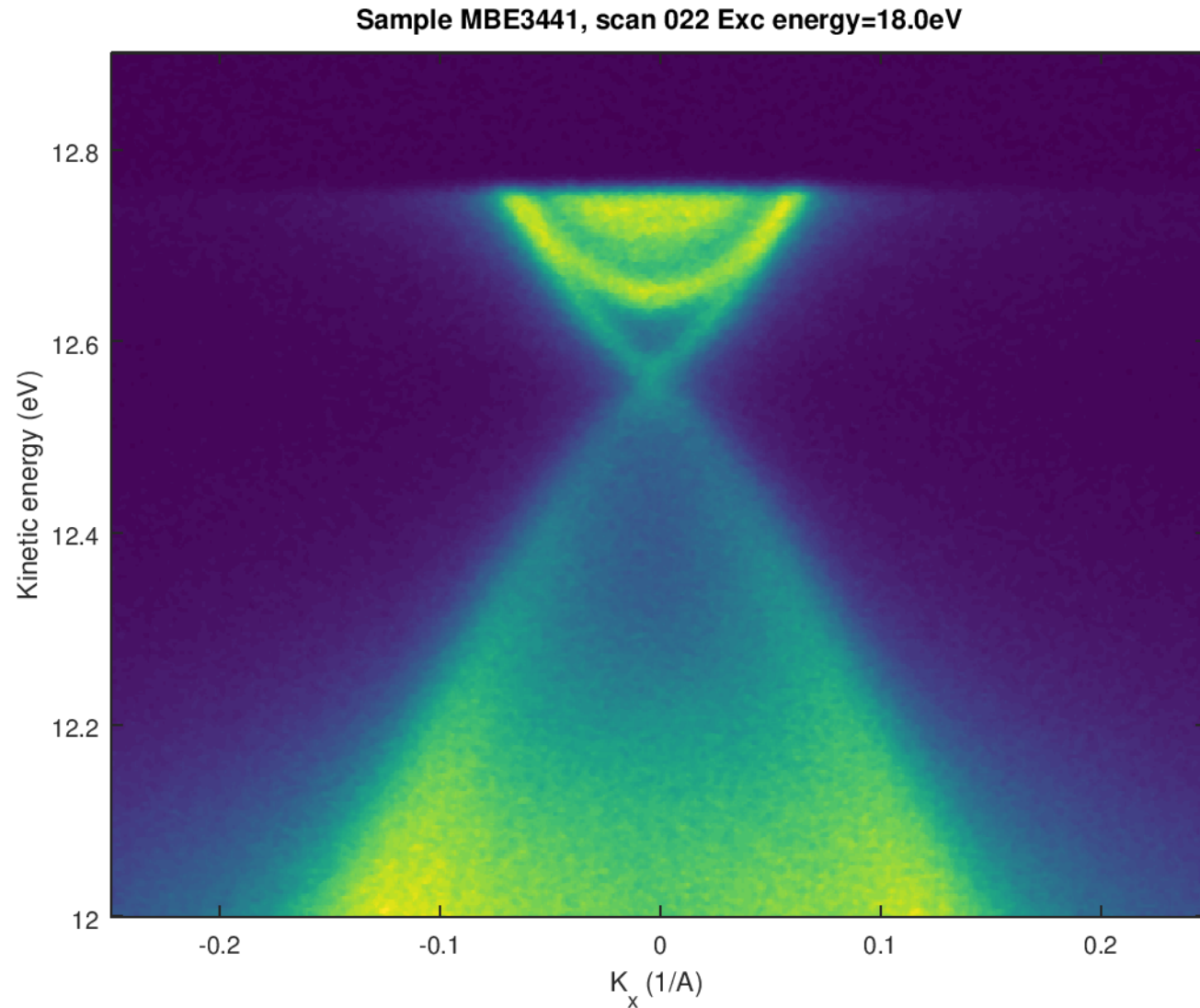
transportní měření na CEITEC  
teploty až 2K, magnetické pole 9T

Hall effect at low temperature 2899  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ :Mn 6%



# Topologické izolátory

Spolupráce s JKU Linz - elektroné struktura pomocí fotoelektronové spektroskopie



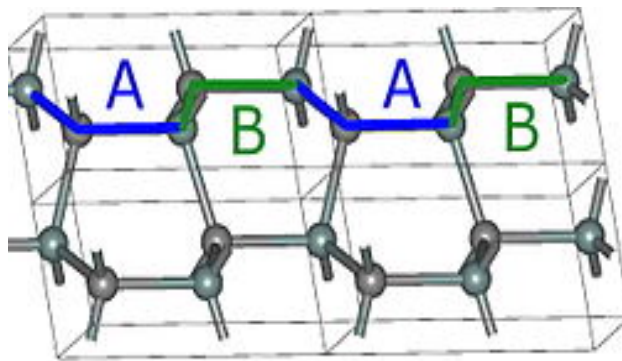
# SiC

Well known mineral (carborundum)

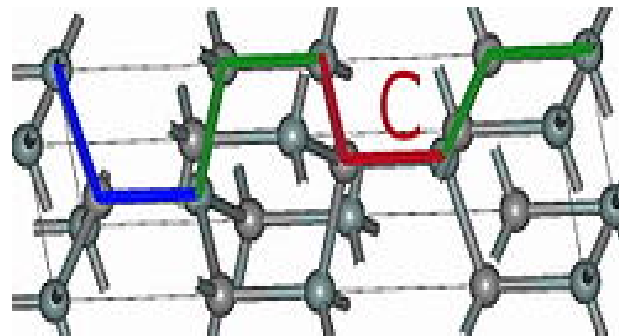
- wide scale production developed by Acheson (1890)
- commonly used as abrasive
- First observed electroluminescence 1907



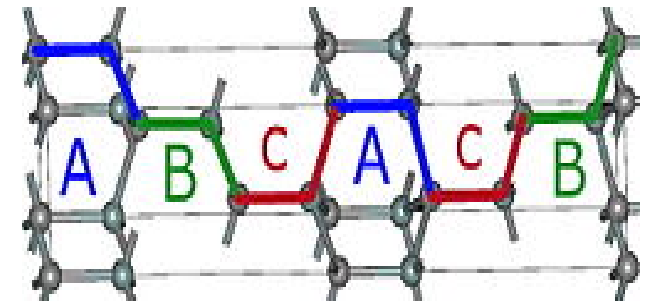
Many structural polytypes:



2H SiC



4H SiC

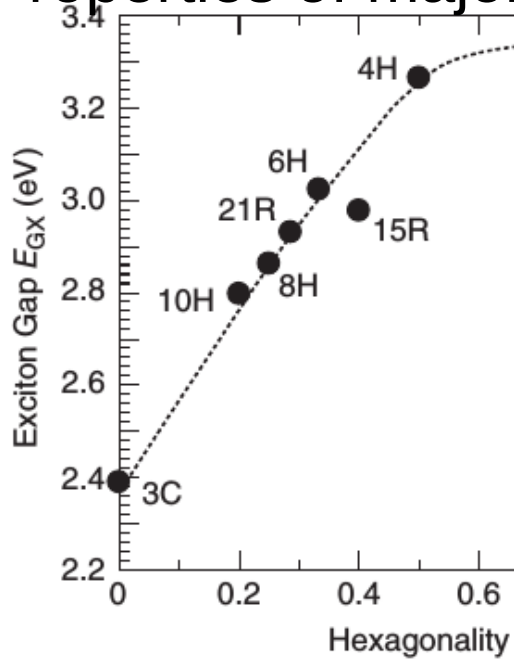


6H SiC

Many other polytypes were already described

# SiC

Properties of major polytypes:



Polytype	Crystal structure	a (Å)	c (Å)	Band gap (eV)
2H	wurtzite ABAB	3.0730	5.048	3.3
3C	zinc-blende ABC	4.3596		2.3
4H	NiAs ABAC	3.0730	10.053	3.3
6H	ABCACB	3.0730	15.11	3.0

# Topologické izolátory

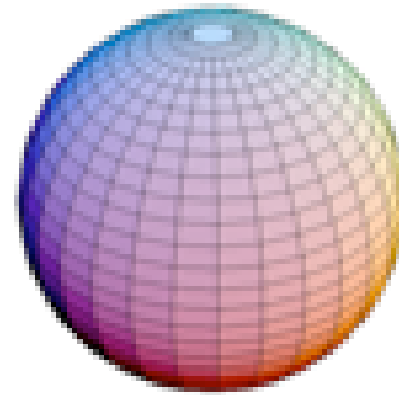
Topologie

Gaussův-Bonnetův teorém

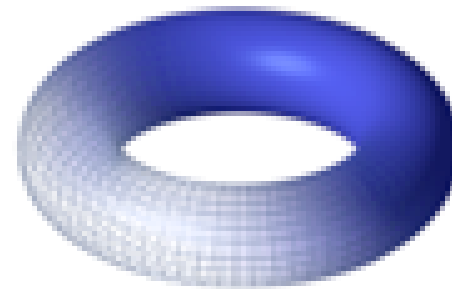
$$\kappa = (r_1 r_2)^{-1}$$

$$\int_M \kappa dA = 2\pi\chi = 2\pi(2 - 2g)$$

$g$  je genus - “počet děr”



$g=0$



$g=1$

# Topologické izolátory

V pásové struktuře

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

$$A = \langle u_{\mathbf{k}} | -i\nabla_{\mathbf{k}} | u_{\mathbf{k}} \rangle$$

$$F = \nabla \times A \quad \text{Berryho křivost}$$

Důsledek:  
na rozhraní dvou oblastí s  
různým Chernovým číslem  
musí existovat povrchové  
stavy s jistými vlastnostmi

Integrál přes obsazené stavy - Chernovo  
číslo  $n$

NC 2016: David J. Thouless, Duncan Haldane a Michael Kosterlitz  
“za teoretické objevy topologických fází hmoty a topologických fázových přechodů”

# Topologické izolátory

První podobný stav: Kvantový Hallův jev

