

ДОСЛІДЖЕННЯ ДИНАМІКИ ЕЛЕКТРОННОЇ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ЗАМІЩЕННЯ НА ОСНОВІ НАПІВПРОВІДНИКІВ АШВУ

Методом емпіричного псевдопотенціалу досліджено динаміку електронних зон потрійних твердих розчинів заміщення на основі АШВУ з урахуванням наявності антиструктурних дефектів та впливу температури.

Вузькощілинні тверді розчини заміщення на основі сполук АШВУ є перспективними матеріалами для твердотільної електроніки. Серед них в останні роки помітно зріс інтерес до багато-компонентних сплавів, потенційно дуже важливих матеріалів для створення інфрачервоних детекторів, низькошумних фільтрів систем зв'язку та лазерів з плавною перебудовою довжини хвилі [1]. Саме тому зростає зацікавленість фундаментальними властивостями, такими як електронна зонна структура, залежність ширини забороненої зони від складу сплаву та температури, а відтак оптичними та фотоелектричними характеристиками вказаних матеріалів зі структурою цинкової обманки. У ряді робіт експериментально досліджувались фізичні властивості твердих розчинів $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$, $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$, $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ [1–4], що дозволило виявити ряд особливостей в динаміці електронних зон (точки кросоверу, нелінійні залежності ширини забороненої зони від складу сплаву та ін.). В даній роботі ми дослідили електронний енергетичний спектр вказаних сплавів методом емпіричного псевдопотенціалу в модифікованому наближенні віртуального кристалу, теоретично дослідили концентраційні та температурні залежності ширини забороненої зони.

Для розрахунку електронної зонної структури було розв'язано хвильове рівняння Шредінгера, в якому істинний кристалічний потенціал був замінений на локальний псевдопотенціал. В

методі емпіричного псевдопотенціалу ми розглядаємо лише перші чотири псевдопотенціальні форм-фактори, що зумовлено ефектом обрізання сильного остовного потенціалу. Зонна структура може бути знайдена з розв'язку відповідного секулярного рівняння з урахуванням спин-орбітальної взаємодії [5]. Для твердого розчину заміщення відповідно до наближення віртуального кристалу (VCA) та закону Вегарда стала ґратки і псевдопотенціальні форм-фактори сплаву $AB_{1-x}C_x$ можна сконструювати у вигляді лінійних комбінацій:

$$a_{SS} = a_{AC} \cdot x + a_{AB} (1 - x)$$

$$V_{SS} = V_{AC} \cdot x + V_{AB} (1 - x), \quad (1)$$

де a_{SS} , V_{SS} - стала ґратки та форм-фактори твердого розчину заміщення. Рівняння (1) мають місце, якщо атоми В заміщаються атомами С або навпаки. Однак, внаслідок того, що синтез твердого розчину відбувається при порушенні умов термодинамічної рівноваги, атоми можуть зайняти чужі атомні позиції в ґратці ($A \leftrightarrow B$, $C \leftrightarrow A$), утворюючи антиструктурні дефекти. В модифікованому наближенні віртуального кристалу [6] форм-фактори атомів твердого розчину будуть залежати від ймовірності для кожного типу атомів зайняти ту чи іншу позицію.

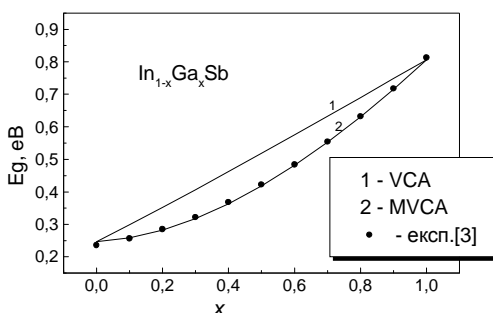


Рис.1. Залежність ширини забороненої зони $In_{1-x}Ga_xSb$ від складу x .

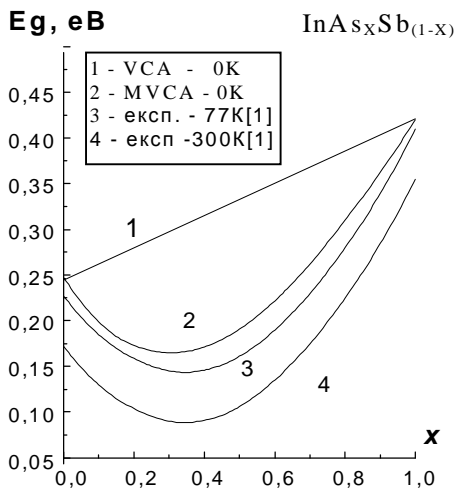


Рис. 2. Концентраційна залежність ширини забороненої зони $\text{InAs}_x\text{Sb}_{(1-x)}$

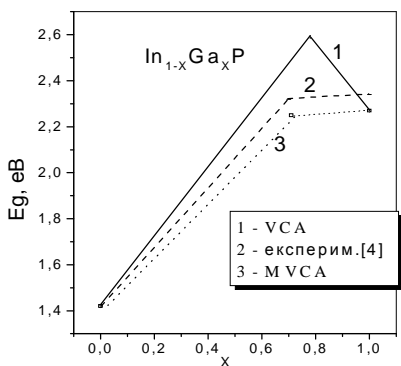


Рис.3. Концентраційна залежність E_g $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ від складу x

При цьому симетричні форм-фактори не зміняться, а антисиметричні будуть залежати від ймовірності формування антиструктурного дефекту для $x = 0.5$ [7]. При цьому ми прийняли, що залежність ймовірності утворення антиструктурних дефектів від складу x є квадратичною.

Чисельні розрахунки зонної структури були виконані по основних симетричних напрямках зони Бріллюена в базисі 137 плоских хвиль (секулярний детермінант з урахуванням спінових станів мав розмірність 274×274). На рис.1,2 показані залежності ширини забороненої зони від складу твердих розчинів $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$, $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, розраховані в VCA та в модифікованому VCA (MVCA) при 0 K у порівнянні з експериментальними даними.

Вплив температури на зонну структуру твердих розчинів заміщення $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ та $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ був врахований згідно теорії Брукса-Ю [5] (рис.3,4). Порівнюючи отримані результати, можемо бачити, що дефекти ґратки приводять до істотного відхилення від лінійності в

поведінці ширини забороненої зони сплавів $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ і $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$. В останньому випадку утворюється мінімум при $x \approx 0.3$ для $T=0\text{ K}$ (рис. 2), який з підвищенням температури зсувається у бік більших концентрацій і в даному підході пояснюється тим, що ймовірність формування антиструктурних дефектів у твердому розчині залежить крім усього іншого від концентрації x . В $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ на концентраційній залежності ширини забороненої зони (рис.3) отримано згин, який відповідає точці кросоверу, що спостерігалася експериментально [4]. Врахування наявності антиструктурних дефектів дозволило пояснити хід вказаних залежностей. Добре узгодження експериментальних залежностей з теоретично розрахованими дає підстави сподіватися, що вибрана модель коректно описує енергетичну зонну структуру напівпровідникових потрійних твердих розчинів заміщення. Вона є основою для подальшого аналізу та прогнозу їх оптичних властивостей та правильного підходу до розв'язку технологічних задач для отримання більш досконалих матеріалів з потрібною шириною забороненої зони.

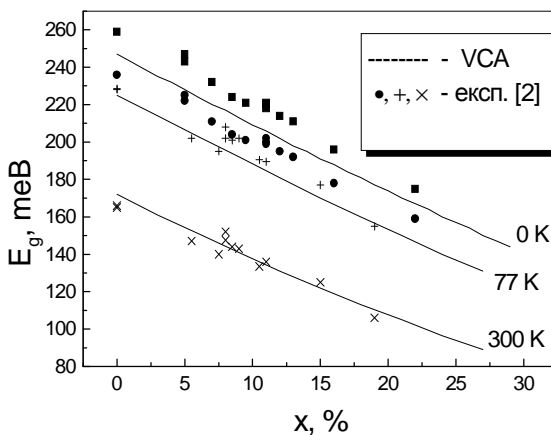


Рис.4. Залежність ширини забороненої зони $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ від складу x .

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Rogalski A. New Ternary Alloy Systems for Infrared Detectors.– Washington: SPIE Press, Bellingham, 1994.– 359 p.
2. Jean-Louis A.M., Ayrault B., Vargas J. Proprietes des alliages $\text{InSb}_{(1-x)}\text{Bi}_x$. II. Absorption optique // Phys.Stat.Sol.–1969.–**34**, №1.– P.341–350.
3. Imai S., Adachi S. Optical constants of $\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ternary alloys: experiment and modeling // Jpn. J. Appl. Phys.–1993.– **32**, N9A.– P.3860 - 3865.
4. Joullie A., Alibert C. On the Γ - Γ and X-X transits of the $\text{Ga}_x\text{In}_{(1-x)}\text{P}$ alloys // J. Appl. Phys.– 1974– **45**,№ 12.– P.5472-5474.
5. Cohen M.L. and Chelikowsky J.R. Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors.– Berlin: Springer-Verlag,1988–264 p.
6. Дмитриев А.П., Евлахов Н.В., Фурман А.С. Расчет зонной структуры твердого раствора SiC-AlN методом псевдопотенциала // ФТП.– 1996.– **30**, № 1.– С.106-117.
7. Дейбук В.Г. Розрахунок зонної структури твердого розчину $\text{InAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ // УФЖ.– 1998.– **43**, № 2.– С.230–232.

SUMMARY

DEIBUK V.G.

THE ELECTRONIC BAND STRUCTURE DYNAMICS OF AIII^{BV} SUBSTITUTION SOLID SOLUTIONS

A band structure dynamics of ternary semiconductor AIII^{BV} substitution solid solutions are investigated by the empirical pseudopotential method. Using the modified virtual-crystal approximation, in order to take into account antisite defects of lattice and temperature, the composition dependence of energy gap are studied. The results are in good agreement with experimental data available.