

## ИЗМЕНЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ $Sb$ С ДАВЛЕНИЕМ В МЕТОДЕ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА

Ю. А. Поспелов

Проведены расчеты на ЭВМ электронной структуры (ЭС)  $Sb$  и ее изменения при различных деформациях решетки. Повышение точности расчета энергий термов до  $\sim 10^{-5}$  Хартри, а площадей сечений изоэнергетических поверхностей до  $\sim 1\%$  привело к совпадению, в основном, расчетных изменений ЭС  $Sb$  с давлением с экспериментом. Приведены основные результаты расчетов, сравнение их с экспериментом и обсуждение.

Полуметаллы группы  $Vi$  ( $As$ ,  $Sb$ ,  $Bi$ ) давно привлекают к себе пристальное внимание, особенно после работы [1], в которой на основе идентичности их кристаллических решеток (малых отличий от кубических решеток) была сделана попытка построить из первых принципов их ЭС. Этот подход оказался удачным для  $Bi$ ; для  $As$  и  $Sb$ , обладающими большими концентрациями носителей тока, он не привел к адекватной опыту картине спектра. Был выполнен ряд других работ (см., например, [2]) с аналогичной, по-существу, целью построить ЭС этих полуметаллов на основе "малого буквенного параметра". Но не исключено, что особенности ЭС этих полуметаллов определяются "малыми численными параметрами". Поэтому представляют несомненный интерес и результаты численных методов расчета их ЭС. Но на этом пути также образовались трудности. Если ЭС  $Sb$  и  $As$  хорошо описываются при нормальном давлении псевдопотенциалами (ПП) Фаликова – Лин [3, 4], то работа Фаликова [5] по определению зависимости ЭС группы  $Vi$  от гидростатического давления (ГД) вела все три полуметалла к полупроводниковому состоянию под действием ГД, что, как оказалось в дальнейшем, не подтверждается экспериментом. Именно, в работе [6], подтвержденной целым рядом последующих исследований (см., например, [7]) было показано, что такое поведение ЭС справедливо для  $As$  и  $Bi$ , но не для  $Sb$ , в которой концентрация носителей тока,  $N(p)$ , с ГД увеличивается. Тем самым ПП  $Sb$  [3] был в большой мере дискредитирован.

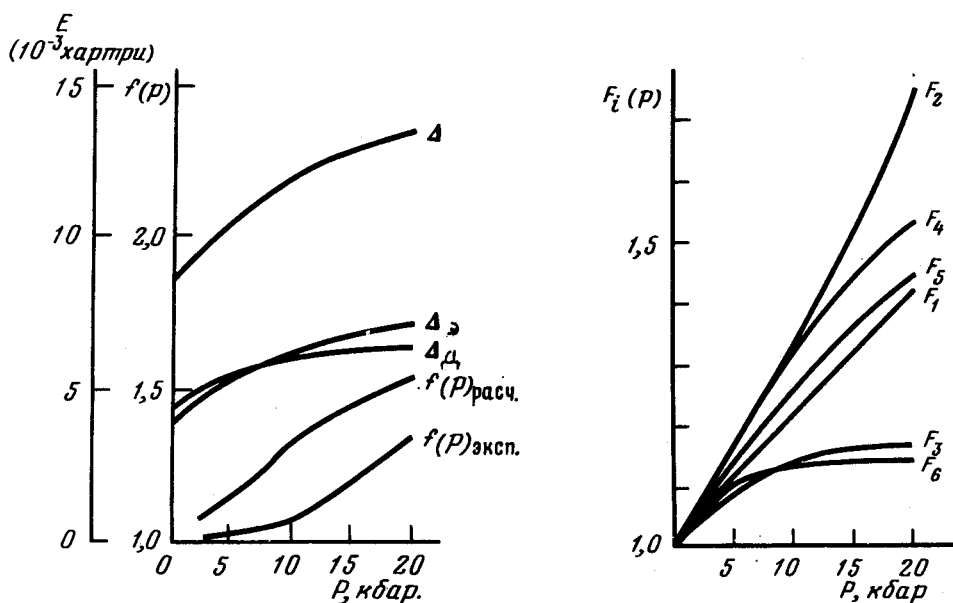
В настоящем сообщении показано, что указанное расхождение между экспериментом и расчетом вовсе не следует из ПП [3]. При более точном учете деформацией решетки  $Sb$ , а также более точном расчете ЭС  $Sb$  (все это, по-видимому, особенно существенно для полуметаллов, само существование которых обязано определенным "малостям") ПП [3] без всякой подгонки параметров ведет, в согласии с экспериментом, к росту  $N(p)$  с ГД.

Кратко о технике расчета. Фурье-образ  $v(q)$  ПП [3] быстро спадает по модулю с ростом волнового вектора  $q$ . Поэтому, в рамках этого ПП, несложно корректно поставить задачу определения ЭС с любой заданной точностью путем диагонализации на ЭВМ конечных секулярных

матрицу  $n \times n$ . Так как для сравнения с экспериментом [8, 9] необходимо вычислять площади сечений изоэнергетических поверхностей с точностью до нескольких процентов, то легко установить ( $dS \sim m_c^* dE$ ), что ошибка в вычислении энергий термов должна быть  $dE \sim (10^{-4} \div 10^{-5})$  Хартри<sup>1</sup>). Согласно оценкам такую точность должны обеспечить матрицы порядка  $100 \times 100$ . Исследование сходимости в зависимости от  $n$  (до матриц  $130 \times 130$ ) подтвердило этот вывод. Несравненно более сложная задача (при указанных точностях вычислений) – расчет сечений изоэнергетических поверхностей, объемов  $q$ -пространства, занятых носителями тока, и уровня Ферми (из условия электронейтральности) за разумные времена работы ЭВМ. Для решения этих задач были разработаны алгоритмы прямых методов построения изоэнергетических контуров, причем особое внимание было уделено их оптимизации<sup>2</sup>).

Приведем наиболее важные физические результаты, полученные нами.

На рис. 1 – зависимости от ГД функции  $f(p) = N(p)/N(0)$ , величин  $\Delta$  – перекрытия валентной зоны и зоны проводимости,  $\Delta_D$  и  $\Delta_Z$  – "парциальных" химических потенциалов (т. е. расстояний от уровня Ферми до абсолютных экстремумов пятой и шестой зон);  $f(p)_{\text{экс}}$  по [6] и [8].



На рис. 2 – зависимости от ГД всех главных экстремальных сечений поверхности Ферми (ПФ). Сечения занумерованы в таком порядке:

<sup>1</sup>) Ошибки в вычислении энергий термов в [3]  $\sim 10^{-3}$  Хартри.

<sup>2</sup>) Соответствующие алгоритмы будут опубликованы.

сначала дырки, потом электроны, каждый раз в последовательности  $S_{min}, S_{max}, S_{бин}; F_i(p) = S_i(p)/S_i(0)$ .

При  $p \approx 3$  кбар получен переход в симметрии  $T_6$  и  $T_7$  термов (шестой и седьмой уровни в точке  $T$ -центре гексагональной грани зоны Бриллюэна, возле которой расположены дырки).

При плоском нагружении (эксперимент [9]): при растяжениях вдоль бинарной оси  $C_2$  и вдоль биссекторной оси  $C_1$  изменения ПФ сводятся к перераспределению носителей тока между становящимися при таких нагрузках неэквивалентными долинами без изменения (в пределах точности расчета) суммарной концентрации носителей тока. Изменения, в процентах, при растяжении с силой  $F = 13,5$  кГ, направленной вдоль  $C_2$ , четырех главных сечений ПФ (для которых имеются экспериментальные данные [9]) приведены в табл. 1;  $\eta_i = 100\Delta S_i/S_i(0)$ , сечения занумерованы в том же порядке, как и выше, причем для дырок взят уменьшающийся "эллипсоид", а для электронов увеличивающийся.

Т а б л и ц а 1

	$\eta_1$	$\eta_2$	$\eta_3$	$\eta_4$
Расчет	- 8	- 4	- 7	16
Эксперимент. данные [9]	- 5,5	- 4	- 6,5	12

Необходимо остановиться на сравнении с экспериментом [8] данных, приведенных на рис. 2. В [8] было установлено, что с давлением сечения  $S_2$  и  $S_3$  растут монотонно, сечение  $S_1$  сначала убывает, затем растет, проходя через минимум возле  $p = 3$  кбар; сечение  $S_4$  монотонно уменьшается (вплоть до крайнего измеренного значения давления в  $p \approx 14$  кбар), по двум другим главным электронным сечениям окончательных данных нет, но в [8] отмечается, что эти сечения, если и растут, то слишком незначительно для компенсированного образца.

Ситуация с дырочными сечениями, по-видимому, определяется спин-орбитальным взаимодействием (СОВ), которое не включено в ПП [3]. Изменение в симметрии термов, полученное при  $p \approx 3$  кбар в точке  $T$ , несомненно изменит СОВ между пятым и шестым термами, что и может привести к немонотонному изменению с давлением максимума пятой зоны, что, в свою очередь, в наибольшей степени отразится на изменении с давлением именно  $S_1$ . Этой причиной можно объяснить и более медленный вначале рост функции  $f(p)_{\text{эксп}}$  по сравнению с  $f(p)_{\text{расч}}$ .

Что касается электронных сечений, то ситуация пока совершенно неясная, как с экспериментальной, так и с теоретической точек зрения. Быть может, например, электронный эллипсоид приобретает вид сильно сплюснутой в центре сигары, но тогда неизбежно в эксперименте должен наблюдаться дополнительный период осцилляций, связанный с нецентральной экстремальной сечением. Возле минимума шестой зоны, как показывает расчет, термы сильно сгущены и СОВ может да-

вать существенную поправку, но без точного расчета влияния СОВ на этот клубок уровней трудно сделать какой-либо определенный вывод. Ясно лишь, в свете изложенного, что весьма существенно для всей физики полуметаллов разобраться с зависимостью электронной части ПФ Sb от давления, для чего крайне желательны как новые тщательно поставленные эксперименты, так и расчет влияния СОВ на ЭС Sb.

Т а б л и ц а 2

	$(m_c)_1$	$(m_c)_2$	$(m_c)_3$	$(m_c)_4$	$(m_c)_5$	$(m_c)_6$
Эксперимент. данные [10]	- 0,069	- 0,18	- 0,215	0,084	0,325	0,32
Расчет [3]	-	-	~ - 0,3	-	-	~ 0,2
Настоящие расчеты	- 0,064	- 0,22	- 0,23	0,086	0,32	0,30

Отметим также, что разработанные нами вычислительные приемы дали и лучшее согласие с экспериментом расчетных характеристик ПФ Sb при нормальном давлении. В табл. 2 приведены, к примеру, величины циклотронных эффективных масс носителей тока.

Автор признателен И.М.Лифшицу за весьма полезное обсуждение работы.

Московский  
институт управления  
им. Серго Орджоникидзе

Поступила в редакцию  
19 декабря 1978 г.

### Литература

- [1] А.А.Абрикосов, Л.А.Фальковский. ЖЭТФ, **43**, 1089, 1962.
- [2] С.А.Гордюнин, Л.П.Горьков. ЖЭТФ, **63**, 1923, 1972.
- [3] L.M.Falicov, P.T.Lin. Phys. Rev., **141**, 562, 1966.
- [4] P.T.Lin, L.M.Falicov. Phys. Rev., **142**, 441, 1966.
- [5] L.M.Falicov: Proc. of the First Intern. Conf. on the Physics of Solids at High Pressure, Arizona USA, 1965.
- [6] Н.Б.Брандт, Н.Я.Минина, Ю.А.Поспелов. ЖЭТФ, **55**, 1656, 1968.
- [7] D.V.McWhan. Sci, **176**, 751, 1972.
- [8] Н.Б.Брандт, Е.В.Богданов, Н.Я.Минина, ФТТ, **20**, 142, 1978.
- [9] Н.Б.Брандт, Е.В.Богданов, Н.Я.Минина. ФНТ, **4**, 489, 1978.
- [10] W.R.Datars, J.Vanderkooy. IBM J. Res. Develop., **8**, 247, 1964.