

О СПЕКТРАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ТИПА $A^{IV}B^{VI}$

С.А.Гордюнин, Л.П.Горьков

В предположении, что электронные свойства $SnTe$ близки к сурьме, получены выражения для электронных спектров, основанные на модели [2] для полуметаллов пятой группы. Обсуждаются экспериментальные следствия и возможности сопоставления свойств $SnTe$ и Sb .

В работах авторов [1] делалась попытка разработать микроскопическую теорию электронного спектра полуметаллов пятой группы (As , Sb , Bi). Мы исходим из картины спектра, предложенной в [2], в которой считается, что в близкой к решетке Bi простой кубической решетке ферми-поверхности носителей налагаются друг на друга при переносе на половину диагонали исходной кубической зоны Бриллюэна (вектор q_0). В [1] было отмечено, что такая картина конгруэнтных ферми-поверхностей отвечает модели диэлектрического перехода [3, 4]. В соответствии с этим в [1] был проведен качественный анализ возможностей этой модели как механизма, обуславливающего появление малых групп носителей в As , Sb , Bi .

Полупроводники типа $A^{IV}B^{VI}$, как отмечалось в литературе (см., например, [5]), во многом близки полуметаллам пятой группы. Они кристаллизуются в кубическую решетку типа $NaCl$, электронный спектр в них имеет общие черты, некоторые из них ($GeTe$) испытывают структурный переход, связанный с подвижкой гранецентрированных подрешеток и ромбоэдрической деформацией. С этой точки зрения наибольший интерес, видимо, представляет $SnTe$, который по своим свойствам должен быть сопоставлен с Sb . Отличие можно описать малым

дополнительным вкладом в кристаллический потенциал $\Delta_0(\mathbf{x}) = \Delta_0 u(\mathbf{x})$ для электронов в SnTe. В остальном же электронные спектры SnTe и Sb совпадают и в простой кубической фазе описываются моделью [2]. Относительно величины Δ_0 считается, что она достаточна, чтобы предотвратить переход в ромбоэдрическую фазу.

При выборе центра симметрии в узле исходной простой кубической решетки $\Delta_0(\mathbf{x})$ отвечает представлению пространственной группы $\Gamma_1(\mathbf{q}_0)$, т. е. отвечает звезде \mathbf{q}_0 (удвоение периода вдоль диагонали примитивной ячейки) и единичному представлению кристаллического класса O_h . Новая трансляционная симметрия приводит к расщеплению электронных термов исходной простой кубической решетки. Спектр в произвольной точке около поверхности Ферми, имеет обычный вид, характерный для модели [3, 4].

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta_0(\mathbf{p})|^2}, \quad (1)$$

где

$$\Delta_0(\mathbf{p}) = \int \phi_{1\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}) \Delta_0(\mathbf{x}) \phi_{2\mathbf{p}-\mathbf{q}_0}(\mathbf{x}) d^3x,$$

а $\phi_{1\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ и $\phi_{2\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ — функции Блоха электронов в первой и второй зонах.

Экспериментально наблюдаемые в SnTe изоэнергетические поверхности расположены вблизи точек L . Точкам L в решетке SnTe соответствуют точки $\mathbf{k}_i = \left(\pm \frac{1}{4}, \pm \frac{1}{4}, \pm \frac{1}{4}\right)$ в простой кубической решетке. Вбли-

зи \mathbf{k}_i необходимо учесть двукратное вырождение, что приводит к матрице $D_{ss'}$ [2] с той разницей, что $\Delta_0(\mathbf{x})$ отвечает представлению $\Gamma_1(\mathbf{q}_0)$ (вместо $\Gamma_{15}(\mathbf{q}_0)$). Ввиду двукратного вырождения и удвоения периода (звезда \mathbf{q}_0) матрица $D_{ss'}$ имеет размерность 4×4

$$D_{ss'} = \begin{vmatrix} p & q & \gamma & \delta \\ q^* & p & \delta^* & \gamma \\ \gamma & \delta & -p & -q \\ \delta^* & \gamma & -q^* & -p \end{vmatrix} \quad (2)$$

Здесь $p = a\kappa_z$; $q = b(\kappa_x + i\kappa_y)$; $\gamma = \gamma_0 + \mu\gamma_0(p^2 + \nu|q|^2)$; $\delta = \lambda\gamma_0(pq + \zeta q^{*2})$; $\gamma_0 \sim \Delta_0$; $\mu, \nu, \lambda, \zeta \sim 1$. Ось z направлена по оси третьего порядка, ось y по оси второго порядка, ось x лежит в плоскости отражения. Знак γ_0 можно выбрать положительным. Знаки μ, ν, λ, ζ — произвольны.

Энергетическая щель в точке \mathbf{k}_i равна γ_0 . Считая, что уровень Ферми электронов (дырок), определяемый степенью легирования, примерно совпадает с γ_0 , т. е. $(\omega - \gamma_0)/\gamma_0 \ll 1$, надо учесть зависимость $\Delta_0(\mathbf{k}_i + \vec{\kappa})$ от $\vec{\kappa}$. Это отражено в наличии членов δ и добавок в γ .

Уравнения для изоэнергетических поверхностей имеет вид ($\epsilon = \omega - \gamma_0 \ll \ll \gamma_0$):

$$\begin{aligned} p &= |q| \pm \left[2\gamma_0\epsilon - 2\gamma_0^2|q|^2(\mu\nu - \lambda\zeta \cos 3\phi) \right]^{1/2}, \\ p &= -|q| \pm \left[2\gamma_0\epsilon - 2\gamma_0^2|q|^2(\mu\nu + \lambda\zeta \cos 3\phi) \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Общая симметрия поверхности D_{3d} ($\text{tg } \phi = \kappa_x / \kappa_y$). Вид поверхности изображен на рис. 1. "Усы" лежат в плоскостях отражения. Экспериментальные результаты для SbTe [6] приводят к поверхностям Ферми вида рис. 1, в частности, они не являются фигурой вращения и сильно вытянуты вдоль оси C_3 . Отсюда отношение a/b определяется как $1/5 + 1/10$. Напомним, что такой же раствор конуса $\rho = |q|$ должен быть в Sb. Электронные эллипсоиды в Sb лежат в биссекторных плоскостях. В рамках принятой выше модели они сильно вытянуты вдоль конуса $\rho = |q|$. Оценка для отношения a/b в SnTe полностью совпадает с тем, что угол наклона электронных эллипсоидов в Sb к базисной плоскости равен $5 + 10^\circ$. Более детальная обработка результатов [6] затрудняется неопределенностью в легировании.

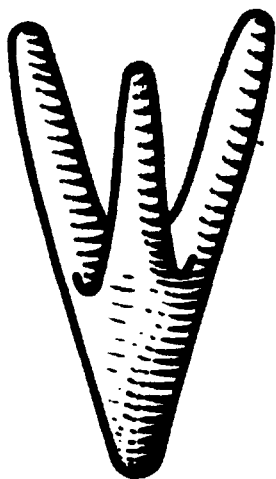


Рис. 1

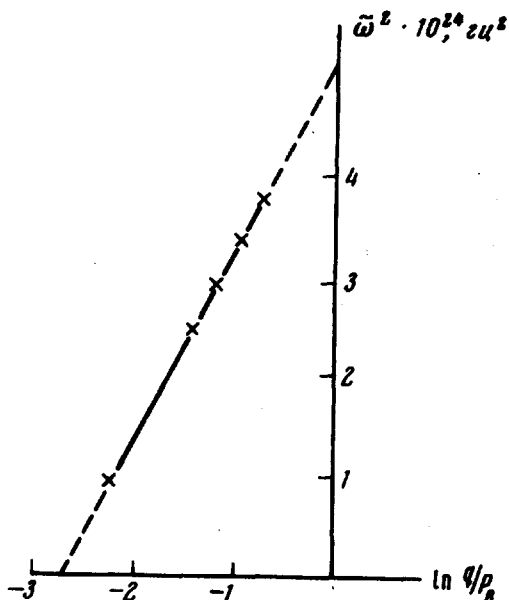


Рис. 2

Есть еще одна особенность SnTe — мягкая оптическая мода [7]. В принятых предположениях взаимодействие электронов с представлением $\Gamma_{15}(q_0)$ приводит к смягчению соответствующей фононной частоты и в Sb обуславливало бы сдвиг подрешеток. В SnTe это смягчение останавливается величиной Δ_0 . Нетрудно найти, вычисляя поляризационные операторы на новых функциях Грина, что

$$\tilde{\omega}_{\text{SnTe}}^2(q=0) = g^2 \omega_0^2 \left(\ln \frac{\Delta_0}{\Delta_{\text{Sb}}} + 1 \right). \quad (4)$$

В области волновых векторов $E_F \gg vq \gg \Delta_0, \Delta_{\text{Sb}}$ фононные спектры SnTe и Sb должны совпадать:

$$\tilde{\omega}^2(q) = g^2 \omega_0^2 \ln \frac{vq}{\Delta_{\text{Sb}}}. \quad (5)$$

В (4) и (5) g^2 – безразмерная постоянная взаимодействия с фононами в кубической фазе; $\omega_0 = \omega(q_0)$, v – средняя скорость на поверхности Ферми, $\Delta_{Sb} = 2E_F e^{-p/g^2}$ – подвижка решеток в Sb в энергетических единицах.

На рис. 2 приведены данные [7] в логарифмическом масштабе в соответствии с выражением (5). Отсюда, используя (4) и (5) найдем: $g = 0,7$; $\Delta_0/\Delta_{Sb} = 0,44$; $E_F/\Delta_{Sb} = 20$. $g\omega_0 = 1,35 \cdot 10^{12}$ *ц*. Данные по фоновым спектрам Sb отсутствуют. Однако в рамках данной модели можно точно указать, что $\tilde{\omega}_{Sb}(q=0) = 1,35 \cdot 10^{12}$ гц. Сравнительно большая величина g указывает, что смягчение оптической моды в Sb должно быть сравнительно небольшим.

Авторы признательны А.А.Абрикосову и Э.И.Рашба за обсуждения.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
17 октября 1974 г.

Литература

- [1] С.А.Гордюнин, Л.П.Горьков. ЖЭТФ, 63, 1922, 1972; J. Low Temp. Phys., 11, 147, 1973.
- [2] А.А.Абрикосов, Л.А.Фальковский. ЖЭТФ, 43, 1089, 1962.
- [3] Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. ФТТ, 6, 2791, 1964.
- [4] А.Н.Козлов, Л.П.Максимов. ЖЭТФ, 48, 1134, 1965.
- [5] The Physics of Semimetals and Narrow-Gap Semiconductors, edited by D.L.Carter and R.T.Bate (Pergamon. Oxford, 1971).
- [6] R.S.Allgaier, B.Houston. Phys. Rev., B5, 2186, 1972.
- [7] G.S.Pawley, W.Cochron, R.A.Cowley, G.Dolling. Phys. Rev. Lett., 17, 753, 1966.