

## О ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЯХ В БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

© В.Е.Бисту

Институт физики твердого тела Российской академии наук,  
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия  
(Поступило в Редакцию 31 марта 1995 г.)  
В окончательной редакции 28 июня 1995 г.)

Получены спектры поверхностных состояний для поверхности (001) и симметричных направлений поверхности (110). Расчет проводился в рамках метода эффективной массы при учете кубической симметрии кристалла. Показано, что учет кубической симметрии не приводит к появлению дополнительных поверхностных мод по сравнению с изотропным случаем, что противоречит численным расчетам некоторых авторов.

В работе Льяконова и Хаепкого [1] было впервые показано, что в бесщелевых полупроводниках типа HgTe существуют специфические поверхностные состояния, представляющие собой суперпозицию состояний электрона в валентной зоне и зоне проводимости. Спектр поверхностных электронных состояний был получен в рамках метода эффективной массы в сферическом приближении гамильтониана Латтинжера, и было показано, что этот спектр квадратичен, а число его ветвей и их положение зависят от единственного существующего в этом случае параметра — отношения масс электрона и дырки. Получаемые в этом случае поверхностные состояния невырождены. Для параметров HgTe этот расчет дает только одно поверхностное состояние электронного типа.

В появившейся позднее работе Молоткова и Татарского [2] поверхностные электронные состояния в HgTe были рассчитаны численно для поверхности (110) методом сильной связи при учете спин-орбитального взаимодействия. Казалось бы, результаты численного счета должны соответствовать полученным в [1] в пределе малых  $k$ . Однако были получены две поверхностные ветви дырочного типа; найденные состояния совпадают в симметричных точках зоны Бриллюэна; при выходе из симметричных точек имеется их расщепление.

В методе сильной связи естественным образом учитываются кубическая симметрия кристалла и симметрия поверхности. Таким образом, возник вопрос: не может ли учет кубической симметрии в методе эффективной массы привести к возникновению дополнительной поверхностной моды?

Если оси  $x, y, z$  направлены по ребрам кубической элементарной ячейки кристалла, объемный гамильтониан Латтинжера имеет вид

$$H_0 = \begin{vmatrix} P+Q & R & -S & 0 \\ R^* & P-Q & 0 & S \\ -S^* & 0 & P-Q & R \\ 0 & S^* & R^* & P+Q \end{vmatrix}, \quad (1)$$

где

$$P = \frac{1}{2}\gamma_1(k_z^2 + k^2), \quad Q = \frac{1}{2}\gamma_2(-2k_z^2 + k^2), \quad S = \sqrt{3}\gamma_3k_zk_-,$$

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_3 + \gamma_2)k_-^2 + \frac{\sqrt{3}}{4}(\gamma_3 - \gamma_2)k_+^2, \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2)$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  — параметры Латтинжера. При  $\gamma_1 < 2|\gamma_2|$ ,  $\gamma_1 < 2|\gamma_3|$  мы имеем бесщелевой полупроводник. Сферическому приближению соответствует  $\gamma_2 = \gamma_3$ .

Спектр поверхностных состояний того же типа, что и полученные в [1], он должен зависеть от ориентации поверхности и направления распространения волны. Рассмотрим различные случаи.

1) П о в е р х н о с т ь (001). Пусть кристалл занимает область  $z > 0$ , поверхность его соответствует плоскости  $z = 0$ . С помощью унитарного преобразования  $U(k_x, k_y)$  [3] гамильтониан  $H_0$  (1) приводится к блочно-диагональному виду

$$H'_0 = \begin{vmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{vmatrix}, \quad H^{U(L)} = \begin{vmatrix} P \pm Q & \tilde{R} \\ \tilde{R}^* & P \mp Q \end{vmatrix}, \quad \tilde{R} = |R| - i|S|, \quad (3)$$

откуда видно, что имеется два соответственных значения энергии

$$E_{1,2} = P \pm \sqrt{Q^2 + |R|^2 + |S|^2}, \quad (4)$$

В цилиндрических координатах ( $\mathbf{k}$  лежит в плоскости  $x - y$ )

$$E_{1,2}(\mathbf{k}, k_z) = \frac{\gamma_1}{2}(k^2 + k_z^2) \pm \sqrt{\gamma_2^2(k^2 + k_z^2)^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)k^2k_z^2 + \frac{3}{4}(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)k^4 \sin^2 2\varphi}. \quad (5)$$

Эти состояния двукратно вырождены. Каждой из энергий  $E_{1,2}$  соответствуют две волновые функции

$$\Psi_{E_{1,2}}^U = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda_{E_{1,2}}^U \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\rho + ik_z z}, \quad \Psi_{E_{1,2}}^L = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda_{E_{1,2}}^L \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\rho + ik_z z}, \quad (6)$$

$$\lambda_{E_{1,2}}^U = -\frac{\tilde{R}^*}{P - Q - E} = -\frac{P + Q - E}{\tilde{R}}; \quad \lambda_{E_{1,2}}^L = -\frac{\tilde{R}^*}{P + Q - E} = -\frac{P - Q - E}{\tilde{R}}. \quad (7)$$

Нас интересует закон дисперсии  $E(\mathbf{k})$  поверхностных состояний, затухающих в глубь кристалла, бегущих вдоль его поверхности и удовлетворяющих граничному условию

$$\Psi|_S = \Psi|_{z=0} = 0. \quad (8)$$

Затухание в глубь кристалла соответствует мнимым  $k_z = iq$  ( $q > 0$ ). В этом случае при заданных  $E$  и  $\mathbf{k}$  возможно, что одновременно

$$E = E_1(\mathbf{k}, iq_1), \quad E = E_2(\mathbf{k}, iq_2) \quad (9)$$

и волновая функция имеет вид

$$\psi_{E\mathbf{k}} = A\Psi_{E_1}^U + B\Psi_{E_2}^U + C\Psi_{E_1}^L + D\Psi_{E_2}^L. \quad (10)$$

Требование выполнения граничного условия (8) приводит к уравнению

$$\det \begin{vmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ \lambda_{E_1}^U & \lambda_{E_2}^U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{E_1}^L & \lambda_{E_2}^L \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 0. \quad (11)$$

Решение системы уравнений (9), (11) дает закон дисперсии поверхностных волн  $E(\mathbf{k})$ , а также коэффициенты затухания  $q_1$  и  $q_2$ . Если ввести обозначения  $q = kx$ ,  $E = k^2\varepsilon$ , то уравнения для  $\varepsilon$ ,  $x_1$ ,  $x_2$  не будут зависеть от  $k$ ; останется только зависимость от угла  $\varphi$ . Вместо  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\gamma_3$  введем новые параметры  $m_e$ ,  $\beta$  и  $\delta$ .

$$\frac{1}{2m_e} = \frac{\gamma_1}{2} + |\gamma_2|, \quad \frac{1}{2m_h} = -\left(\frac{\gamma_1}{2} - |\gamma_2|\right), \quad \beta = \frac{m_e}{m_h}, \quad \delta = (\gamma_3^2 - \gamma_2^2)/\gamma_2^2. \quad (12)$$

Кроме того, положим  $1/2m_e = 1$ ,  $\beta \leq 1$  ( $\beta > 1$  рассматривается аналогично заменой  $\beta$  на  $1/\beta$  и  $E$  на  $-E$ ). Тогда для  $\varepsilon$  получается следующее уравнение:

$$\varepsilon^2 - \frac{3}{2}(1 - \beta)\varepsilon + \frac{3}{16}(1 - 3\beta)(3 - \beta) - \frac{3}{4}\beta\delta \sin^2 2\varphi = 0, \quad (13)$$

которое дает две ветви поверхностной энергии

$$\varepsilon_S^\pm = \frac{3}{4}(1 - \beta) \pm \sqrt{\frac{3}{4}\beta(1 + \delta \sin^2 2\varphi)}. \quad (14)$$

Для границ объемного спектра, получающихся из (5) при  $k_z = 0$ ,  $k = 1$ , имеем

$$\varepsilon_V^\pm = \frac{1 - \beta}{2} \pm \frac{1 + \beta}{2} \sqrt{1 + \frac{3}{4}\delta \sin^2 2\varphi}. \quad (15)$$

Энергии поверхностных волн должны лежать между границами объемного спектра. При  $\varepsilon > 0$  имеем ветвь электронного типа ( $e$ ), при  $\varepsilon < 0$  — дырочного ( $h$ ). Определим критические значения параметров  $\beta_{1c}(\delta, \varphi)$  и  $\beta_{2c}(\delta, \varphi)$  следующим образом:

$$\varepsilon_S^+(\beta_{1c}, \delta, \varphi) = \varepsilon_V^+(\beta_{1c}, \delta, \varphi), \quad \varepsilon_S^-(\beta_{2c}, \delta, \varphi) = 0. \quad (16)$$

При  $\delta \sin^2 2\varphi \ll 1$

$$\beta_{1c} = \frac{1}{3} + \frac{1}{6}\delta \sin^2 2\varphi, \quad \beta_{2c} = \frac{1}{3} - \frac{1}{6}\delta \sin^2 2\varphi \quad (17)$$

(в сферическом приближении  $\beta_{1c} = \beta_{2c} = 1/3$ ). Число и тип поверхностных ветвей зависят от  $\beta$ ,  $\delta$  и угла  $\varphi$ . Возможны следующие случаи:

- a)  $e$  и  $h$  ( $\beta > \beta_{1c}, \beta_{2c}$ ),
- b)  $2e$  ( $\beta_{2c} > \beta > \beta_{1c}$ ),
- c)  $e$  ( $\beta < \beta_{1c}, \beta_{2c}$ ),
- d)  $h$  ( $\beta_{2c} < \beta < \beta_{1c}$ ).

2) П о в е р х н о с т ь (110). В этом случае ось  $z$  лежит в плоскости поверхности кристалла, оси  $x$  и  $y$  под углом  $45^\circ$  к поверхности. Перейдем к новым осям  $x'$  и  $y'$

$$x' = \frac{1}{\sqrt{2}}x - \frac{1}{\sqrt{2}}y, \quad y' = \frac{1}{\sqrt{2}}y + \frac{1}{\sqrt{2}}x. \quad (18)$$

Теперь ось  $y'$  направлена по нормали к поверхности. Найдем закон дисперсии поверхностных волн, распространяющихся в симметричных направлениях. а) распространение вдоль оси  $x'$ .  $k_{x'} = k$ ,  $k_{y'} = ikx$ ,  $k_z = 0$ ,  $E = k^2 \varepsilon_{x'}$ . б) распространение вдоль оси  $z$ .  $k_z = k$ ,  $k_{y'} = ikx$ ,  $k_{x'} = 0$ ,  $E = k^2 \varepsilon_z$ .

Как и в случае (001), получаем систему уравнений, аналогичную (9), (11), что приводит к следующим уравнениям для  $\varepsilon_{x'}$ ,  $\varepsilon_z$ :

$$\varepsilon_{x'}^2 \left(1 + \frac{3}{4}\delta\right) - \varepsilon_{x'} \frac{3}{2}(1 - \beta)(1 + \delta) + \frac{3}{16}(1 - 3\beta)(3 - \beta)(1 + \delta) = 0,$$

$$\varepsilon_z^2 \left(1 + \frac{3}{4}\delta\right) - \varepsilon_z \frac{3}{2}(1 - \beta) \left(1 + \frac{\delta}{2}\right) + \left(\frac{3}{4}\right)^2 (1 - \beta)^2 - \frac{3}{4}\beta(1 + \delta) = 0. \quad (19)$$

Для границ объемного спектра имеем

$$\varepsilon_{V_z}^\pm = \frac{1 - \beta}{2} \pm \frac{1 + \beta}{2} \sqrt{1 + \frac{3}{4}\delta},$$

$$\varepsilon_{V_x}^\pm = \frac{1 - \beta}{2} \pm \frac{1 + \beta}{2}. \quad (20)$$

Приведем еще значения критических параметров для  $\delta \ll 1$

$$\beta_{1c}^{x'} = \frac{1}{3} - \frac{\delta}{2}, \quad \beta_{2c}^{x'} = \frac{1}{3}, \quad \beta_{1c}^z = \frac{1}{3}, \quad \beta_{2c}^z = \frac{1}{3} - \frac{\delta}{6}. \quad (21)$$

Итак, что дает учет кубической симметрии? Для параметров HgTe по-прежнему возможно только одно поверхностное состояние электронного типа.

Метод эффективной массы, безусловно, дает правильное описание спектра вблизи точки  $k = 0$ . За рамками этого метода могли бы появляться поверхностные состояния при конечных  $k$ . Возможно, в [2] получены именно такие моды. Устранение противоречия между работами [1] и [2], касающегося числа состояний, требует, по нашему мнению, детального рассмотрения модели численного счета.

Автор выражает благодарность В.И. Марченко за постоянное внимание к работе.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 93-02-2113).

### Список литературы

- [1] Дьяконов М.И., Хаецкий А.В. Письма в ЖЭТФ **33**, 115 (1981).
- [2] Молотков С.Н., Татарский В.В. Поверхность, **2**, 47 (1989).
- [3] Jang S.-R.E., Broido D.A., Sham L.J. Phys. Rev. **В 31**, 888 (1985).

*Физика твердого тела, том 38, № 1, 1996*  
*Solid State Physics, vol. 38, N 1, 1996*

## ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ НА ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ СТРУКТУР РАЗРУШЕНИЯ В ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ

© О.М.Савенко, Г.И.Геринг

Омский государственный университет,  
644077 Омск, Россия  
(Поступило в Редакцию 22 февраля 1993 г.  
В окончательной редакции 13 апреля 1994 г.)

В работе [1] обнаружено образование в ионных кристаллах NaCl, KCl, KBr под действием импульсов растяжения с амплитудой десятки мегапаскалей и длительностью сотни наносекунд двух типов структур разрушения: дисковых трещин и скоплений микропор. Известно, что существует зависимость механических свойств ионных кристаллов от их примесного состава [2-4]. Действительно, как показали дальнейшие исследования, в кристаллах марки ХЧ и в кристаллах с уровнем содержания примеси не выше  $\sim 10^{-5}$  mol.% образуются только хрупкие трещины.

Целью данной работы является определение типа примеси, ответственной за появление в хрупком материале структур разрушения (скопления микропор), характерных для вязкопластических сред [5,6]. Для решения поставленной задачи были проведены параллельные исследования спектров излучения и характера разрушения в ионных кристаллах, нагружаемых биполярным акустическим импульсом амплитудой  $\sim 50$  МПа и длительностью  $\sim 200$  пс.

Анализ спектров излучения исследованных образцов в видимой и ультрафиолетовой областях спектра позволил установить, что поры образуются в кристаллах NaCl, KCl, KBr, содержащих двухвалентную примесь металлов Mg с концентрацией  $\sim 5 \cdot 10^{-3}$  mol.% либо Pb