

## Энергетический спектр носителей заряда в сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

© В.В. Косарев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: vlad.kos@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 6 декабря 2006 г.  
В окончательной редакции 22 марта 2007 г.)

Исследования квантовых осцилляций магнитосопротивления (эффекта Шубникова–де Гааза) на сплавах  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  с содержанием сурьмы  $0.255 < x < 0.26$  обнаружили электронно-топологический переход Лифшица, возможное объяснение которого сводится к наличию в энергетическом спектре этих соединений седловой точки. Такая особенность возникает, если величина прямой щели в точке  $L$  в полупроводниковой области этих соединений ( $x > 0.04$ ) становится отрицательной. Это заставляет существенно пересмотреть все ранее сделанные расчеты на основе прежних значений зонных параметров. Для проверки соответствия новых значений параметров данным о плотности состояний, полученным из измерений термоэдс в классическом пределе сильных магнитных полей, проведены теоретические расчеты концентрации  $n$  и плотности состояний на уровне Ферми  $\rho(E_F)$  для случая отрицательных значений  $E_{gL}$ . Расчеты  $n$  и  $\rho(E_F)$  показывают, что изменение  $E_{gL}$  и соответствующая коррекция зонных параметров обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными данными. Согласно этим расчетам, один электронно-топологический переход появляется при  $x \sim 0.165$ , когда в энергетическом спектре появляется седловая точка. Второй переход связан со слиянием шести эллипсоидов поверхности Ферми в три гантелеобразные фигуры при  $0.255 < x < 0.26$ .

PACS: 71.20.-b, 71.20.Gi

Для материалов со сложной формой зонного спектра, какими являются сплавы  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , энергетический спектр электронов и дырок в точке  $L$  приближенно описывается уравнением Макклюра [1]

$$(E - a_1 k_y^2)(E + E_{gL} + a_2 k_y^2) = Q_{11}^2 k_x^2 + Q_{22}^2 k_y^2 + Q_{33}^2 k_z^2, \quad (1)$$

где  $a_1 = \gamma_{c22}/2$ ,  $a_2 = \gamma_{v22}/2$ , энергия  $E$  отсчитывается от края зоны проводимости,  $E_{gL}$  — прямая щель в точке  $L$ , индексы  $v$  и  $c$  соответствуют валентной зоне и зоне проводимости, параметры  $Q_{ii}$  характеризуют  $(kp)$ -взаимодействие этих зон, а параметры  $\gamma_{c,v,i,j}$  (обратные поправочные массы) учитывают влияние других, более удаленных зон, расположенных в той же точке  $L$  зоны Бриллюэна. Данный закон дисперсии записан в атомной системе единиц, где  $e = m_0 = \hbar = 1$ , а за единицы длины и энергии приняты борковский радиус ( $0.529 \text{ \AA}$ ) и хартри ( $27.2 \text{ eV}$ ).

Связь между значением термоэдс в классическом пределе сильных магнитных полей  $\alpha_{22\infty}$  и плотностью состояний  $\rho(E_F) = \partial n / \partial E$  на уровне Ферми  $E_F$  определяется соотношением, имеющим довольно общий характер [2]:

$$\alpha_{22\infty} = \frac{(\pi k_b)^2}{en} T \rho(E_F), \quad (2)$$

где  $n$  — концентрация носителей заряда,  $T$  — температура,  $k_b$  — постоянная Больцмана. Это соотношение остается справедливым и для энергетического спектра (1).

Данные измерений термоэдс в классически сильных магнитных полях уже анализировались ранее [3] на основе расчетов плотности состояний  $\rho$ , проведенных

со значениями зонных параметров, полученными в работе [1]. С ростом  $x$  результаты расчетов все более заметно отличались от значений  $\rho$ , рассчитанных по экспериментальным данным, и для достижения лучшего согласия с экспериментом приходилось довольно существенно корректировать значения некоторых из этих параметров.

Однако проведенные позднее исследования квантовых осцилляций магнитосопротивления (эффекта Шубникова–де Гааза) на сплавах  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  с большим содержанием сурьмы обнаружили электронно-топологический переход Лифшица в области  $0.255 < x < 0.26$ , возможное объяснение которого сводится к наличию седловой точки в энергетическом спектре этих соединений. Такая особенность возникает в том случае, когда величина прямой щели в точке  $L$  в полупроводниковой области соединений ( $x > 0.04$ ) становится отрицательной [4] и вклад от  $\gamma_{v22}$  начинает превосходить вклад  $(kp)$ -взаимодействия (рис. 1). Это заставило авторов работы [4] существенно пересмотреть результаты своих предыдущих работ по исследованию зонной структуры сплавов  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  и уточнить значения зонных параметров, зависящих от  $x$ . Согласно [4],

$$Q_{11} = 0.457 - 0.188x, \quad Q_{22} = 0.03 - 0.04x, \\ Q_{33} = 0.344, \quad (3)$$

$$\gamma_{c22} = 0.615 + 0.4x, \quad \gamma_{v22} = 1.1 + 0.7x. \quad (4)$$

Для проверки того, насколько эти новые данные согласуются с данными о термоэдс и плотности состояний, в настоящей работе проведены расчеты концентрации  $n(E_F)$  и плотности состояний  $\rho(E_F)$  на уровне Ферми  $E_F$  для случая отрицательных значений  $E_{gL}$

с параметрами спектра (4). Поскольку в более ранней работе [3] расчеты проводились только для того случая, когда поверхность Ферми близка к эллипсоидальной, в настоящей статье получены более общие выражения, справедливые в том числе и для случая, когда в энергетическом спектре появляется седловая точка и форма поверхности становится гантелеобразной (т.е. существенно отличной от эллипсоидальной). Для вычисления  $\rho(E_F)$  как производной от объема таких фигур требуются уже гораздо более сложные вычисления. С учетом того что цилиндрическая симметрия сохраняется и в этом случае, функции  $n(E_F)$  и  $\rho(E_F)$  вычисляются, так же как и ранее, не численно, а аналитически, но при этом получаются более общие выражения, чем те, что были получены ранее [3]:

$$\begin{aligned} \pi^2 Q_{11} Q_{33} n &= E_F(E_F + E_g)(k_2 - k_1) + a_1 a_2 (k_2^5 - k_1^5)/5, \\ \pi^2 Q_{11} Q_{33} \rho(E_F) &= (2E_F + E_g)(k_2 - k_1) \\ &+ E_F(E_F + E_g)(\partial k_2/\partial E - \partial k_1/\partial E) \\ &+ a_1 a_2 (k_2^4 \partial k_2/\partial E - k_1^4 \partial k_1/\partial E), \end{aligned} \quad (5)$$

где значения  $k_1$ ,  $k_2$  и их производные определяются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} 2a_1 a_2 k_1^2 &= (a_2 - a_1)E_F - a_1 E_g - Q_{22}^2 - \Sigma_1, \\ 2a_1 a_2 k_2^2 &= (a_2 - a_1)E_F - a_1 E_g - Q_{22}^2 + \Sigma_1, \\ 4a_1 a_2 k_1 \partial k_1/\partial E &= a_2 - a_1 - \Sigma_2/\Sigma_1, \\ 4a_1 a_2 k_2 \partial k_2/\partial E &= a_2 - a_1 + \Sigma_2/\Sigma_1, \\ \Sigma_1 &= \left( (a_1(E_F + E_g) + a_2 E_F + Q_{22}^2)^2 - 4Q_{22}^2 a_2 E_F \right)^{1/2}, \\ \Sigma_2 &= (a_1 + a_2)(a_1(E_F + E_g) + a_2 E_F + Q_{22}^2) - 4Q_{22}^2 a_2. \end{aligned}$$

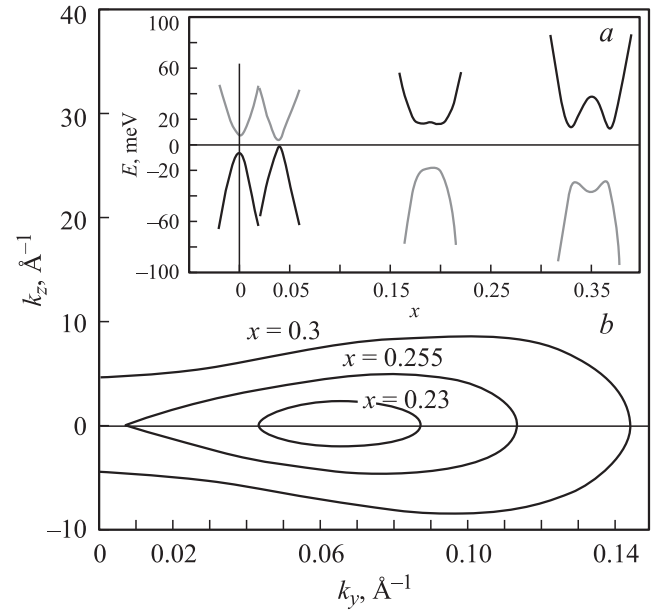
Энергетическое  $E_0$  и пространственное  $k_0$  (в импульсном  $\mathbf{k}$ -пространстве) положения экстремумов, расположенных ниже седловой точки, определяются из условий

$$\begin{aligned} k_1^2 = k_2^2 &= ((a_2 - a_1)E_0 - a_1 E_g - Q_{22}^2)/2a_1 a_2 = k_0^2, \\ (a_1(E_0 + E_g) + a_2 E_0 + Q_{22}^2)^2 &= 4Q_{22}^2 a_2 E_0. \end{aligned} \quad (6)$$

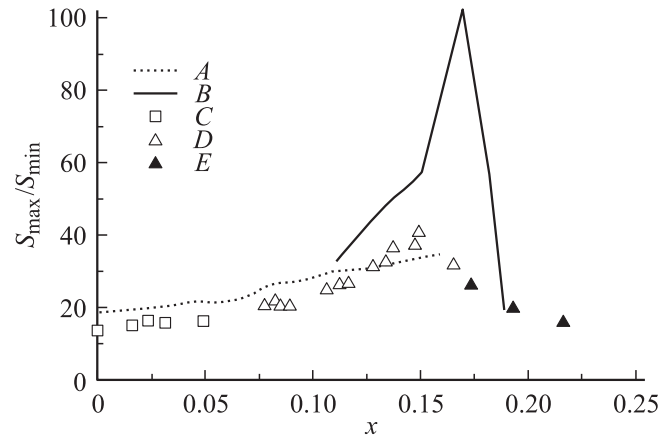
Эффективная масса на дне новых экстремумов может быть вычислена также аналитически через вторую производную  $\partial^2 E/\partial k^2$ . В предельном случае слияния обоих экстремумов имеем  $k_0 = 0$  и

$$\begin{aligned} m_0/m_1(0) &= 2Q_{11}^2/|E_{gL}|, \quad m_0/m_3(0) = 2Q_{33}^2/|E_{gL}|, \\ m_0/m_2(0) &= -\gamma_{v22} - 2Q_{22}^2/|E_{gL}|. \end{aligned} \quad (7)$$

Для случая  $E_{gL} < 0$  обратная эффективная масса  $m_0/m_2(0)$  может обращаться в нуль и даже менять знак. Это означает, что эллиптическое приближение для этой компоненты полностью неприменимо. Проведенные расчеты  $n(E_F)$  и  $\rho(E_F)$  показали, что изменение знака для



**Рис. 1.** Трансформация энергетического спектра носителей заряда в точке  $L$  при изменении  $x$  согласно [4] (а) и изоэнергетические поверхности в окрестности точки  $L$  на уровне Ферми  $E_F$  в плоскости  $k_y k_z$ , перпендикулярной бинарной оси  $C_2 \parallel k_x$ , при наличии седловой точки (б).



**Рис. 2.** Зависимости отношения площадей максимального и минимального сечений  $S_{\max}/S_{\min}$  поверхности Ферми от  $x$ . Кривые  $A$  и  $B$  соответствуют расчетам для  $n = 1.7 \cdot 10^{17}$  и  $1.4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , экспериментальные данные для образцов с концентрациями от 0.6 до  $2.3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  взяты из других работ:  $C$  — данные [6],  $D$  — [7],  $E$  — [8]. Точки пересчитаны по данным измерений анизотропии циклотронных масс с помощью соотношения  $S_{\max}/S_{\min} = m_{c,\max}/m_{c,\min} \approx m_{c,3}/m_{c,2}$ .

величины запрещенной зоны в (1) и связанная с этим коррекция зонных параметров приводят к существенному улучшению согласия расчетных значений плотности состояний с данными, полученными по термоэдс. При этом были использованы более точные, чем в [4], значения для величины  $E_{gL}$ . Еще лучшего согласия можно

Результаты расчетов плотности состояний  $\rho(E_F)$ , компоненты эффективной массы  $m_2(E_F)$  на уровне Ферми  $E_F$ , а также отношения площадей максимального и минимального сечений  $S_{\max}/S_{\min}$  поверхности Ферми для образцов, исследовавшихся ранее в [3]

Номер образца	$x$	$n$ , $10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$\rho(E_F)$ , $10^{31} \text{ erg}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$		$E_F$ , meV	$m_2(E_F)/m_0$	$S_{\max}/S_{\min}$
			Эксперимент	Расчет			
1	0.013	2.5	1.63	1.48	28.8	0.57	19.2
2	0.038	1.33	1.33	1.01	24.4	0.58	21.0
3	0.045	1.2	1.07	0.96	22.75	0.6	21.6
4	0.07	3.6	2.19	2.03	29.0	0.96	22.2
5	0.073	1.37	1.18	1.114	19.55	0.84	23.8
6	0.088	1.95	1.61	1.44	20.07	1.03	27.0
7	0.11	1.57	1.46	1.35	15.47	1.7	29.7
8	0.13	1.58	1.52	1.45	13.4	1.58	31.7
9	0.15	1.61	1.61	1.56	11.6	1.96	33.9
10	0.16	1.71	1.76	1.68	10.94	2.2	34.8

добиться, если учесть связь параметров  $Q_{11}$  и  $Q_{33}$ :

$$Q_{11}Q_{33} = 0.153 - 0.28x,$$

которая следует из определенной в [5] зависимости легкой циклотронной эффективной массы на дне зоны проводимости от  $x$  (при  $x > 0.04$ )

$$m_{c,2}/m_0 = (x - 0.04)0.00325$$

и соотношения

$$m_{c,2}/m_0 = (m_1 m_3)^{1/2}/m_0 = |E_{gL}|/(2Q_{11}Q_{33}).$$

Тогда при  $Q_{33} = 0.344$  для  $Q_{11}$  имеем

$$Q_{11} = 0.445 - 0.81x.$$

С учетом этих уточненных данных для величины  $E_{gL}$  седловая точка в спектре появляется при  $x > 0.165$ . Согласно вычислениям, топологические переходы происходят при  $x$  около 0.165 и 0.255. В первом случае седловая точка возникает, когда  $m_2(0)/m_0$  становится отрицательной величиной. При этом в окрестности точки  $x \approx 0.165$  на зависимости  $S_{\max}/S_{\min}(x)$  появляется особенность, обнаруженная в [7,8] (рис. 1, 2).

Второй топологический переход связан с ростом  $n$  после перехода полупроводник–полуметалл при  $x > 0.22$ . В области  $x > 0.255$  шесть эллипсоидов поверхности Ферми сливаются в три гантелеобразные фигуры [4]. Результаты расчетов зависимости  $S_{\max}/S_{\min}(x)$  представлены на рис. 2, а плотности состояний — в таблице, где они сравниваются с данными, рассчитанными по величинам термоэдс в классическом пределе сильных магнитных полей для экспериментально исследованных образцов [3].

Автор благодарит Н.А. Редько за стимулирование работы и последующие дискуссии.

## Список литературы

- [1] Н.Б. Брандт, Р. Герман, ГИ. Гольшева, Л.И. Девяткова, Д. Кусник, В. Краак, Я.Г. Пономарев. ЖЭТФ **83**, 2152 (1982).
- [2] И.Н. Дубровская, Ю.И. Равич. ФТТ **8**, 1455 (1966).
- [3] В.В. Косарев, Н.А. Редько, Н.А. Родионов. ФТТ **25**, 3138 (1983).
- [4] Н.Б. Брандт, ГИ. Гольшева, Нгуээн Минь Тху, М.В. Судакова, К.Н. Каширин, Я.Г. Пономарев. ФТН **13**, 1209 (1987).
- [5] G. Oelgart, R. Herrmann. Phys. Stat. Sol. (b) **75**, 189 (1976).
- [6] Г.А. Миронова, М.В. Судакова, Я.Г. Пономарев. ФТТ **22**, 3628 (1980).
- [7] B. Fellmoth, H. Kruger, R. Rudolf, R. Herrmann. Phys. Stat. Sol. (b) **106**, 561 (1981).
- [8] W. Braune, B. Fellmoth, N. Kubicki, R. Herrmann. Phys. Stat. Sol. (b) **110**, 549 (1981).