

# Влияние антиструктурных дефектов на зонную структуру и диэлектрическую функцию твердых растворов $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

© В.Г. Дейбук, В.И. Студенец

Черновицкий государственный университет,  
274012 Черновцы, Украина

(Получена 31 июля 1997 г. Принята к печати 26 февраля 1998 г.)

Эмпирическая нелокальная псевдопотенциальная схема используется для расчета электронной структуры твердых растворов. Спин-орбитальное взаимодействие также включено в нелокальные расчеты. Нелинейная экспериментальная зависимость ширины запрещенной зоны от состава объясняется на основе модифицированного приближения виртуального кристалла. Используя зонную структуру, рассчитана дисперсия диэлектрической постоянной и проведено сравнение ее с экспериментальными результатами.

Сплавы  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  являются привлекательными полупроводниковыми материалами для оптоэлектронных устройств в ближней инфракрасной спектральной области. Значение оптических свойств особенно важно при их проектировании и анализе. Хотя диэлектрические функции GaSb и InSb недавно были хорошо изучены [1–3], информация относительно тех же свойств для их сплавов довольно скудная. Поэтому в работе предпринята попытка на основе корректного расчета зонной структуры указанного твердого раствора определить диэлектрическую функцию, которая непосредственно связана с его основными оптическими характеристиками [1].

Одноэлектронный псевдопотенциальный гамильтониан представим в виде (в качестве единицы энергии используется Ридберг ( $Ry$ ))

$$H = -\nabla^2 + V_p(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где

$$V_p(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) + \sum_t (E - E_t) |b_t\rangle \langle b_t|, \quad (2)$$

$V(r)$  — истинный кристаллический потенциал,  $|b_t\rangle$  — волновая функция основного состояния с энергией  $E_t$ . Если пренебречь влиянием нелокальности псевдопотенциала, то можно записать фурье-преобразование для  $V_p(\mathbf{r})$

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_L(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (3)$$

где

$$V_L(\mathbf{G}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{G}) v_{\alpha}(\mathbf{G}), \quad (4)$$

$$S_{\alpha}(\mathbf{G}) = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_j e^{-i\mathbf{G}\mathbf{R}_j^{\alpha}}, \quad (5)$$

$\mathbf{G}$  — векторы обратной решетки и  $v_{\alpha}(\mathbf{G})$  — атомные форм-факторы;  $N_{\alpha}$  — число атомов сорта  $\alpha$ ,  $\mathbf{R}_j^{\alpha}$  определяет положение  $j$ -го атома сорта  $\alpha$ . Эти уравнения в случае соединений  $\text{A}^N\text{B}^{6-N}$  со структурой цинковой обманки могут быть приведены к виду

$$V_L(\mathbf{G}) = v^S(\mathbf{G}) \cos \mathbf{G}\boldsymbol{\tau} + iv^A(\mathbf{G}) \sin \mathbf{G}\boldsymbol{\tau}, \quad (6)$$

где

$$v^S(\mathbf{G}) = [v_A(\mathbf{G}) + v_B(\mathbf{G})]/2, \\ v^A(\mathbf{G}) = [v_A(\mathbf{G}) - v_B(\mathbf{G})]/2, \quad (7)$$

$\boldsymbol{\tau} = (a/8)(1, 1, 1)$ ,  $a$  — постоянная решетки.

В методе эмпирического псевдопотенциала мы рассматриваем только первых 4 значения  $v^S$  и  $v^A$ . Следуя работе [4,5], записываем нелокальную атомную поправку через нелокальную ионную в виде

$$V_{NL} = (\mathbf{K}, \mathbf{K}', E) = \frac{V_{NL}^{\text{ion}}(\mathbf{K}, \mathbf{K}')}{\varepsilon(\mathbf{q})}, \quad (8)$$

где  $q = |\mathbf{K} - \mathbf{K}'|$ ,  $\varepsilon(\mathbf{q})$  локальный линейный фактор экранирования и

$$V_{NL}^{\text{ion}}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = - \sum_{l=0,2} A_l(E) f(\mathbf{r}) \hat{P}_l, \quad (9)$$

Здесь  $A_l(E)$  — подгоночный параметр размерности энергии, зависящий от глубины потенциальной ямы,  $\hat{P}_l$  — проективный оператор для  $l$ -й компоненты углового момента и

$$f(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} < \mathbf{R}_l, \\ 0, & \mathbf{r} \geq \mathbf{R}_l. \end{cases} \quad (10)$$

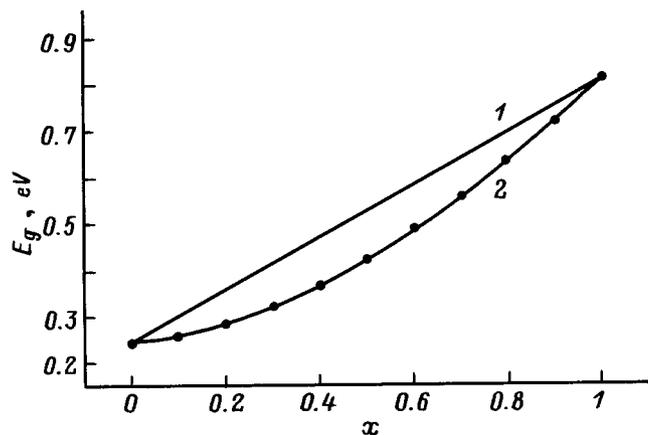
Зонная структура может быть найдена из решения секулярного уравнения

$$\det \left( \{ \mathbf{k}^2 - E_n(\mathbf{k}) \} \delta_{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \delta_{ss'} + \{ V_L(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_{NL}(\mathbf{K}, \mathbf{K}', E) \} \delta_{ss'} + V_{so}^{ss'}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') \right) = 0. \quad (11)$$

Спин-орбитальный член имеет вид

$$V_{so}^{ss'}(\mathbf{K}, \mathbf{K}') = \mathbf{K} \times \mathbf{K}' \sigma_{ss'} \left\{ -i\lambda^S \cos(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\boldsymbol{\tau} + \lambda^A \sin(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\boldsymbol{\tau} \right\}. \quad (12)$$

Здесь  $s$  и  $s'$  — спиновые состояния,  $\sigma_{ik}$  — матрицы Паули,  $\lambda^A$  и  $\lambda^S$  рассматриваются как подгоночные параметры.



**Рис. 1.** Зависимость ширины запрещенной зоны твердого раствора  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  от состава  $x$ . Сплошные линии — расчет: 1 — в приближении виртуального кристалла, 2 — в модифицированной модели виртуального кристалла. Точки — экспериментальные данные [7].

Согласно обычному приближению виртуального кристалла (VCA) постоянная решетки и псевдопотенциальные форм-факторы твердого раствора  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  определяются как линейные комбинации:

$$\begin{aligned} a_{ss} &= a_{\text{GaSb}}x + a_{\text{InSb}}(1-x), \\ V_{ss} &= V_{\text{GaSb}}x + V_{\text{InSb}}(1-x), \end{aligned} \quad (13)$$

где  $a_{ss}$  и  $V_{ss}$  — постоянная решетки и форм-факторы твердого раствора замещения.

Уравнения (13) имеют место, если атомы In замещаются атомами Ga или наоборот. Однако, вследствие того что синтез твердого раствора происходит при условиях, далеких от термодинамического равновесия, атомы могут занять позиции атомов другого сорта в решетке. Исследуем влияние антиструктурных дефектов решетки на зонную структуру  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  в модифицированном приближении виртуального кристалла [6]. В этом приближении форм-факторы атомов твердого раствора должны зависеть от вероятности для каждого типа атомов занять ту или иную позицию. Тогда симметричные форм-факторы не изменятся. Антисимметричные форм-факторы имеют вид

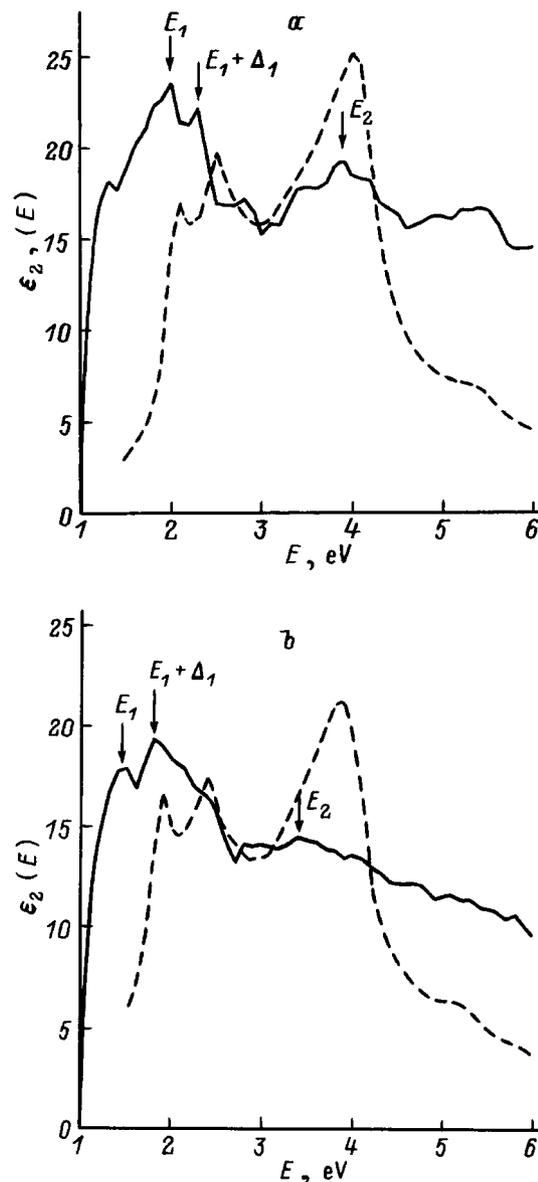
$$V_{ss}^a = [1 - 8\alpha x(1-x)] [V_{\text{GaSb}}^a x + V_{\text{InSb}}^a (1-x)]. \quad (14)$$

При получении выражения (14) мы принимали, что зависимость вероятности антиструктурных дефектов от состава является квадратичной

$$1 - W_{\text{In}} = 1 - W_{\text{Ga}} = 1 - W_{\text{As}} = 4\alpha(1-x)x, \quad (15)$$

где  $\alpha$  — коэффициент, равный вероятности формирования антиструктурного дефекта при  $x = 0.5$ . Так как степень беспорядка в твердом растворе при этом составе наивысшая,  $\alpha$  принимает максимальное значение.

Численный расчет зонной структуры был выполнен по основным симметричным направлениям зоны Бриллюэна в базе 137 плоских волн. В граничных случаях  $x = 1$  (GaSb) и  $x = 0$  (InSb) рассчитанные значения энергии в симметричных точках находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными данными. На рис. 1 показана зависимость ширины запрещенной зоны от состава твердого раствора, рассчитанная в моделях VCA и модифицированного VCA для  $\alpha \approx 0.05$ . Экспериментальные данные взяты из работы [7]. Сравнивая полученные результаты, мы можем видеть, что дефекты решетки ведут к существенному отклонению от линейности в поведении ширины запрещенной зоны сплавов  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ .



**Рис. 2.** Теоретический (сплошная линия) и экспериментальный (штриховая линия) [2] спектры диэлектрической функции  $\varepsilon_2(E)$  для GaSb (a) и InSb (b).

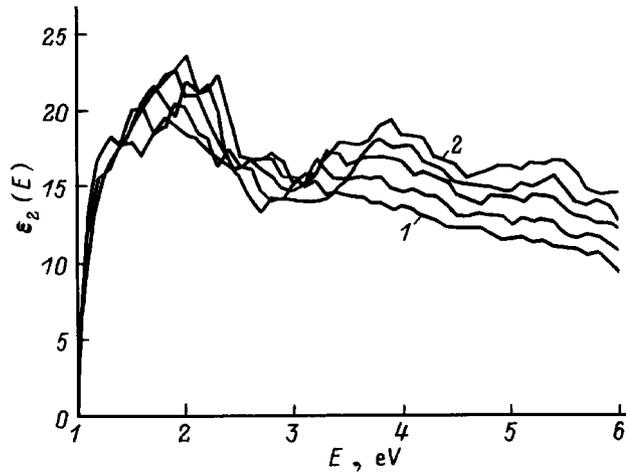


Рис. 3. Рассчитанные спектры  $\varepsilon_2(E)$  для сплавов  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ : 1 —  $x = 0$ , 2 —  $x = 1$ . Между кривыми 1 и 2 величина  $x$  изменяется с шагом  $\Delta x = 0.25$ .

Знание энергетической структуры позволяет перейти к исследованию частотной зависимости диэлектрической функции. Мнимая часть диэлектрической функции рассчитывалась с использованием выражения [5]

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2 \hbar}{\pi m} \sum_{n_c n_v} \int \frac{f_{n_c n_v}(\mathbf{k}) dS}{E_{n_c n_v}(\mathbf{k}) |\nabla_{\mathbf{k}} E_{n_c n_v}(\mathbf{k})|}, \quad (16)$$

где

$$E_{n_c n_v}(\mathbf{k}) = E_{n_c}(\mathbf{k}) - E_{n_v}(\mathbf{k}), \quad (17)$$

а

$$f_{n_c n_v}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{m} \frac{|\langle n_c, \mathbf{k} | \nabla | n_v, \mathbf{k} \rangle|^2}{E_{n_c n_v}(\mathbf{k})} \quad (18)$$

— межзонная сила осциллятора. Сумма ведется по начальным состояниям валентной зоны  $n_v$  и по конечным состояниям зоны проводимости  $n_c$ ,  $S$  — поверхность постоянной энергии в  $k$ -пространстве.

Результаты наших вычислений для спектра  $\varepsilon_2(E)$ , а также соответствующие экспериментальные кривые приведены на рис. 2. Согласие между ними в основном хорошее. Общее расхождение в расчетных и экспериментальных данных — то, что амплитуда пика  $E_2$  является слишком маленькой по сравнению с пиками  $E_1$  и  $E_1 + \Delta_1$ . Тонкая структура в кривых на рис. 2, *a, b* не изменяется при интегрировании с уменьшением шага энергии от 0.05 до 0.02 эВ. Таким образом, можно предположить, что тонкая структура на рис. 2, *a, b* определяется главным образом зонной структурой, но не техникой интегрирования. Замечено, что экспериментальные пики  $E_1$ ,  $E_1 + \Delta_1$  и  $E_2$  в спектре  $\varepsilon_2(E)$  немного меньше, чем расчетные. Это вызвано тем фактором, что псеводиэлектрическая функция была бы точно равна объемной диэлектрической функции данного образца, если бы поверхность была совершенно резкой и свободной. Действительно, мы знаем [8], что готовить высококачественные поверхности на сплавах полупроводников труднее, чем на GaSb и InSb.

Известно также, что на диэлектрическую функцию полупроводников сильно влияют микроскопические неровности поверхности. На рис. 3 представлен рассчитанный спектр  $\varepsilon_2(E)$  для сплавов  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  с шагом  $x = 0.25$ . Рассчитанный спектр  $\varepsilon_2(E)$  смещается в сторону более высоких энергий с увеличением  $x$  в соответствии с [8]. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными по всему диапазону энергий.

## Список литературы

- [1] S. Zollner, M. Garriga, J. Humlicek, S. Gopalan, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **43**, 4349 (1991).
- [2] D.E. Aspnes, A.A. Studna. *Phys. Rev. B*, **27**, 985 (1983).
- [3] J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **14**, 556 (1976).
- [4] T.P. Humphreys, G.P. Srivastava. *Phys. St. Sol. (b)*, **112**, 581 (1982).
- [5] M.L. Cohen, V. Heine. *Sol. St. Phys.*, **24**, 37 (1970).
- [6] А.П. Дмитриев, Н.В. Евлахов, А.С. Фурман. *ФТП*, **30**, 106 (1996).
- [7] D. Auvergne, J. Camassel, H. Mathieu, A. Joullie. *J. Phys. Chem. Sol.*, **35**, 133 (1974).
- [8] S. Imai, S. Adachi. *Japan J. Appl. Phys.*, **32**, 3860 (1993).

Редактор Т.А. Полянская

## The influence of antisite lattice defects on the band structure and the dielectric function of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ solid solutions

V.G. Deibuk, V.I. Studenets

Chernivtsi State University  
274012 Chernivtsi, the Ukraine

**Abstract** An empirical nonlocal pseudopotential scheme is employed to calculate the electronic structure of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$  solid solutions. Spin-orbit interactions are also included in the nonlocal calculations. Nonlinear experimental dependence of the energy gap on composition is explained on the basis of a modified virtual crystal approximation. Using this band structure, we calculate the dispersion of the dielectric constant and compare it against experimental results.