О МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ ШИРОКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

© *С.Ю.Давыдов, С.К.Тихонов*

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 31 августа 1995 г. Принята к печати 4 сентября 1995 г.)

В рамках модели связывающих орбиталей Харрисона вычислены магнитные восприимчивости алмаза, карбида кремния, а также нитридов бора, алюминия и галлия. Проанализированы диамагнитные вклады остовных и валентных электронов и парамагнитная составляющая. Показано, что величина магнитной воспиимчивости возрастает в ряду SiC–BN–AlN–GaN.

Несмотря на то что интерес к широкозонным полупроводникам как к материалам для мощных высокотемпературных и высокочастотных приборов макроэлектроники велик [1], их физические свойства исследованы еще недостаточно. Это, в особенности, относится к нитридам бора, алюминия и галлия. Поэтому представляют интерес теоретические оценки тех или иных характеристик полупроводника. При этом, если используется теория, хорошо зарекомендовавшая себя при описании других полупроводниковых кристаллов, можно надеяться, что сделанные оценки недалеки от истины. С другой стороны, такая теория должна быть проста и физически прозрачна для того, чтобы можно было понять, от каких параметров главным образом зависит рассматриваемая характеристика и за счет чего она изменяется при переходе от одного материала к другому. Этим требованиям, на наш взгляд, отвечает модель связывающих орбиталей Харрисона [2–4]. В настоящей работе этот подход использован для расчета магнитной восприимчивости полупроводниковых кристаллов.

Хорошо известно, что магнитная восприимчивость кристалла χ может быть представлена в виде [2,5]

$$\chi = \chi_C + \chi_L + \chi_P, \tag{1}$$

где χ_C — диамагнитная восприимчивость заполненных оболочек ионных остовов, χ_L — ланжевеновская диамагнитная восприимчивость, связанная с орбитальным движением электронов проводимости, χ_P — парамагнитная восприимчивость проводящих электронов (парамагнетизм Ван Флека).

Как показано в [2], ланжевеновская диамагнитная восприимчивость χ_L имеет вид

$$\chi_L = -\gamma_m^2 N e^e d^2/24mc^2, \tag{2}$$

где m и e — масса и абсолютное значение заряда электрона, c — скорость света, N — плотность валентных электронов, d — расстояние между ближайшими соседями, γ_m — безразмерный параметр, связанный с матричным элементом квадрата оператора векторного потенциала.

Парамагнитная восприимчивость описывается формулой [2]

$$\chi_P = Ne^2\hbar^2\lambda_m^2\alpha_C^2/16mc^2|V_2|, \tag{3}$$

где $\hbar$ — постоянная Планка, V_2 и α_C — ковалентная энергия и ковалентность кристалла (мы используем определение прараметров, следуя работе [4]), λ_m — безразмерная константа, описывающая матричный элемент взаимодействия квазиимпульса с векторным потенциалом.

Диамагнитную восприимчивость остовов мы будем описывать формулой ланжевеновского типа [6]

$$\chi_C = -\frac{N_C e^2}{6mc^2}\,\langle r_C^2\rangle, \tag{4}$$

где N_C — плотность остовных электронов, $\langle r_C^2\rangle$ — среднее значение квадрата радиусов орбиты остовных электронов. Отметим, что χ есть восприимчивость единицы объема и является безразмерной величиной, которую не следует путать с молярной и удельной восприимчивостями [7].

Численный расчет проводился с использованием таблиц энергетических термов Фишер [2–4]. Как и в [2], константы γ_m и λ_m принимались равными 1.12 и 1.31 соответственно. Численные значения d брались из [2], значения $\langle r_C^2\rangle$ принимались равными квадрату радиусов ионов C^{4+}, Si^{4+} при расчете восприимчивостей алмаза и карбида кремния и ионов B^{3+}, Al^{3+}, Ga^{3+} и N^{5+} — для нитридов. Их величины приведены в [7]. В отличие от работы [2], где матричный элемент V_2 вычислялся по $|p\rangle$-орбиталям, мы определяли его на $|sp^3\rangle$-орбиталях, что, на наш взгляд, является более последовательным. Приведем удобные для оценок формулы

$$\chi_L = -3.82\cdot 10^{-6}/d, \tag{5}$$

$$\chi_P = 3.63\cdot 10^{-6}\alpha_C^3/d, \tag{6}$$

$$\chi_C = -0.38\cdot 10^{-6} z_C\langle r_C^2\rangle/d^3, \tag{7}$$

где z_C — число остовных электронов, d измеряется в Å.

К сожалению, сравнить наши результаты (см. таблицу) с экспериментом можно лишь для двух кристаллов: алмаза и карбида кремния [2,7]. Для алмаза $\chi \cong -(1.5\div 1.7)\cdot 10^{-6}$. Для карбида кремния существует лишь одна работа [3], где $\chi \cong -0.85\cdot 10^{-6}$, что хорошо согласуется с нашими результатами. Сопоставление наших расчетов с данными по алмазу, приведенными в [2], показывает, что вычисленное значение

Исходные параметры и магнитная восприимчивость

	C	SiC	BN	AlN	GaN
d, Å	1.54	1.88	1.57	1.89	1.94
α_C	1	0.97	0.94	0.81	0.80
$10^6\chi_L$	−2.47	−2.03	−2.43	−2.02	−1.97
$10^6\chi_P$	1.52	1.18	1.29	0.68	0.64
$10^6\chi_C$	−0.01	−0.09	−0.01	−0.18	−0.56
$10^6\chi$	−0.96	−0.94	−1.15	−1.52	−1.89

$\chi_P = 1.52 \cdot 10^{-6}$ несколько ниже экспериментального ($1.91 \cdot 10^{-6}$), тогда как величина χ_L приблизительно в 1.5 раза меньше паблюдаемой ($-3.56 \cdot 10^{-6}$). Заметим, однако, что наше значение χ для алмаза гораздо лучше согласуется с экспериментом, чем полученное в [2]. Следует также отметить, что мы не использовали параметры γ_m и λ_m для какой-либо подгонки результатов.

Из формул (5)–(7) и таблицы легко понять причины изменения восприимчивостей в ряду широкозонных полупроводников. Если значение χ_L зависит лишь от параметра d, то на величину χ_P сильно влияет ковалентность соединения. Так как у нитридов алюминия и галлия больше как постоянные решетки, так и ионности, их парамагнитные восприимчивости приблизительно в 2 раза меньше, чем у SiC и BN.

Как уже говорилось выше, для оценки χ_C использовались радиусы заполненных оболочек. Непосредственным расчетом можно показать, что подобное приближение для валентных электронов не проходит и нужно брать $\langle r_C^2 \rangle$, вычисленное непосредственно из распределения электронной плотности в атоме (см., например, [9]). К сожалению, для ионных остовов подобные расчеты нам неизвестны. Отметим, однако, что по порядку величины наши значения χ_C удовлетворительно согласуются с данными [10], приведенными в [2].

Таким образом, наши расчеты показывают, что в ряду SiC–BN–AlN–GaN магнитная восприимчивость растет по величине и все соединения диамагнитны.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства обороны США.

Список литературы

[1] *Proc. 5th Conf. «Silicon Carbide and Pelated Materials»*, ed. by M.G. Spencer et al., Bristol–Phytadelphia [Inst. Phys. Conf. Ser., N 137, (1993)].
[2] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1. [Пер. с англ.: W.A. Harrison. *Electronic Structure and Properties of Solids* (San Francisko, W.H. Freeman and Company)].
[3] W.A. Harrison. Phys. Rev. B, **24**, 5835 (1981).
[4] W.A. Harrison. Phys. Rev. B, **27**, 3592 (1983).
[5] Дж. Каллуэй. *Теория энергетической зонной структуры* (М., Мир, 1969).
[6] Ч. Киттель. *Введение в физику твердого тела* (М., Наука, 1978).
[7] *Физические величины*, справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова (М., Энергоатомиздат, 1991).

[8] D. Das. Indian J. Phys., 41, 525 (1967).
[9] А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. *Параметры атомов и атомных ионов* (М., Энергоатомиздат, 1986).
[10] П. Селвуд. *Магнетохимия* (М., ИЛ, 1958).

Редактор Т.А. Полянская

On magnetic susceptibility of wide band-gap semiconductors

S.Yu.Davydov, S.K. Tikhonov

A.F.Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,
194021 St.Petersburg, Russia