

## ДЕФОРМАЦИОННЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ У ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СПЛАВА $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЯМЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЩЕЛЕЙ С ПОМОЩЬЮ РЕЗОНАНСНОЙ УДАРНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Богданов Е. В., Лавренко М. Ю., Минина Н. Я.

Впервые определены деформационные потенциалы запрещенной зоны у полупроводниковых сплавов  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ . Расчет проведен по данным о перестройке энергетического спектра  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$  при всестороннем и одноосном сжатии. Показано, что для экспериментального определения прямых щелей в спектре при анизотропной деформации может быть использован эффект резонансной ударной ионизации.

*Вычисление деформационных потенциалов сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$ .* В твердых растворах замещения  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  осуществляется плавный переход от энергетического спектра висмута к спектру сурьмы, причем специфика каждого из этих полуметаллов определяется симметрией ближайших к уровню Ферми термов и их удалением от него по шкале энергий. Если для чистых висмута и сурьмы компоненты тензора деформационного потенциала экспериментально были определены с помощью ультразвуковых методик [1, 2], то для полупроводникового интервала в сплавах  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  ( $0,065 \leq x \leq 0,22$ ) до последнего времени какие-либо данные о деформационных потенциалах отсутствовали. В настоящей работе деформационные потенциалы запрещенной зоны у сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$  рассчитаны по данным о перестройке энергетического спектра при статическом упругом деформировании ( $T=4,2$  К), которые были получены из непосредственного наблюдения за изменениями поверхности Ферми (ПФ) слабо легированных образцов  $n$ - и  $p$ -типа.

Дно зоны проводимости у полупроводникового сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$  определяется 3 эквивалентными экстремумами  $L^a$ , а потолок валентной зоны — 3 экстремумами  $L^s$  и близко расположенным экстремумом  $T$  (рис. 1, а). В недеформированном состоянии величины всех прямых и непрямых энергетических щелей между экстремумами  $L^a$  и  $L^s$  совпадают ( $E_{LL}=14$  мэВ), так же как и величины 3 непрямых щелей  $L^a-T$  ( $E_{LT}^i=16$  мэВ). Анизотропная деформация приводит в общем случае к неэквивалентному смещению всех 6 экстремумов, лежащих в  $L$ -точках зоны Бриллюэна, и к образованию 12 различных по величине запрещенных интервалов энергий (рис. 1, б).

Деформационные потенциалы какого-либо энергетического параметра  $E$  определяют его изменение  $\Delta E$  при деформировании:

$$\Delta E = \sum_{i,j} D_{ij} \varepsilon_{ij}, \quad (1)$$

где  $\varepsilon_{ij}$  — компоненты тензора деформации, а  $D_{ij}$  — компоненты тензора деформационного потенциала, или просто деформационные потенциалы.

Симметричный тензор  $D_{ij}$ , так же как и  $\varepsilon_{ij}$ , имеет в общем случае 6 независимых компонент, следовательно, для полного описания изменения 12 энергетических щелей необходимо знать 72 значения  $D_{ij}$ . В силу симметрии решетки сплавов висмут—сурьма из этих 72 значений только 8 являются независимыми.

Если тензор деформации задавать в осях, связанных с одной из  $L$ -точек (в этом случае эта точка обычно обозначается как  $L_1$ , а соответствующий ей экстремум называется «главным»  $L_1$ -экстремумом), то все 72 значения можно выразить через 4 компоненты —  $D_{11}$ ,  $D_{22}$ ,  $D_{23}$  и  $D_{33}$ <sup>1</sup> для непрямой щели  $E_{L_1^q T}$  и аналогичные 4 компоненты для энергетического зазора  $E_{L_1^q T}$  между экстремумами валентной зоны  $T$  и  $L_1^q$ . Это является следствием того, что главные экстремумы  $L_1^q$  и  $L_1^s$  имеют лишь упомянутые 4 ненулевые компоненты тензора деформационного потенциала, а экстремум  $T$  — только 2:  $D_{11}^T = D_{22}^T$  и  $D_{33}^T$  [1]; поэтому и для

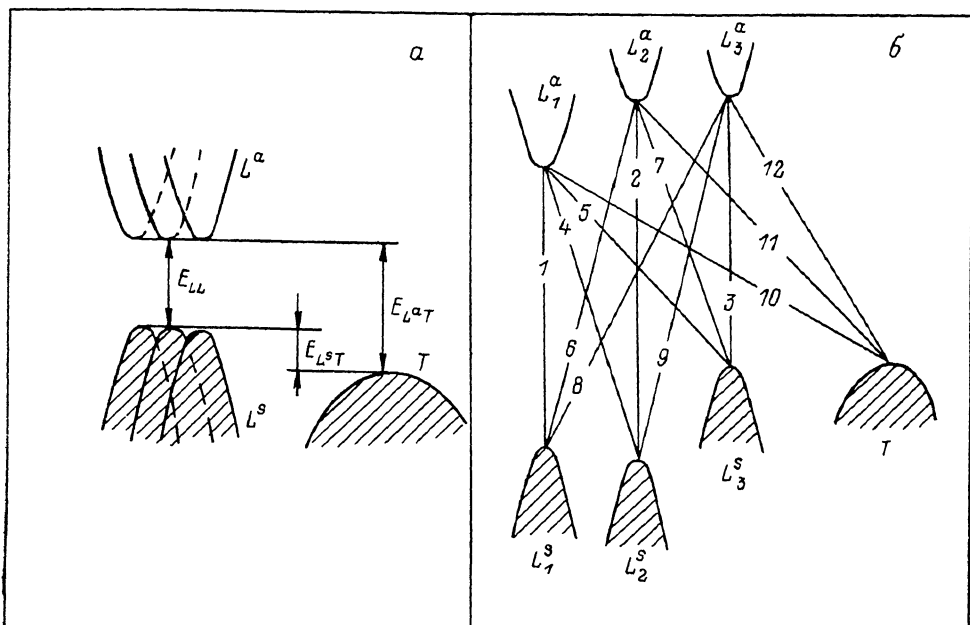


Рис. 1. Зонная структура вблизи уровня Ферми у сплава  $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$  в недеформированном состоянии (а) и в общем случае сильной анизотропной деформации (б).

Цифрами на б обозначены прямые (1–3) и не прямые (4–12) щели: 1 —  $E_{L_1 L_1}$ , 2 —  $E_{L_2 L_2}$ , 3 —  $E_{L_3 L_3}$ , 4 —  $E_{L_1 L_2}$ , 5 —  $E_{L_1 L_3}$ , 6 —  $E_{L_2 L_1}$ , 7 —  $E_{L_2 L_3}$ , 8 —  $E_{L_3 L_1}$ , 9 —  $E_{L_3 L_2}$ , 10 —  $E_{L_1 T}$ , 11 —  $E_{L_2 T}$ , 12 —  $E_{L_3 T}$ .

каждой из величин  $E_{L_1^q T}$  и  $E_{L_1^s T}$  соответствующий тензор  $D_{ij} = D_{ij}^{L_1^q} - D_{ij}^T$  имеет лишь 4 ненулевые компоненты —  $D_{11}$ ,  $D_{22}$ ,  $D_{23}$  и  $D_{33}$ .

Деформационные потенциалы  $D_{ij}^{L_2}$  и  $D_{ij}^{L_3}$ -термов в точках  $L_2$  и  $L_3$ , переход к осям которых соответствует повороту системы координат вокруг  $C_3$  на  $+120^\circ$  и  $-120^\circ$  соответственно, определяются простым геометрическим преобразованием:

$$\begin{aligned} D_{11}^{L_2} &= D_{11}^{L_3} = 0.25D_{11}^{L_1} + 0.75D_{22}^{L_1}, \\ D_{22}^{L_2} &= D_{22}^{L_3} = 0.75D_{11}^{L_1} + 0.25D_{22}^{L_1}, \\ D_{33}^{L_2} &= D_{33}^{L_3} = D_{33}^{L_1}, \\ D_{23}^{L_2} &= D_{23}^{L_3} = -0.5D_{23}^{L_1}, \\ D_{13}^{L_2} &= -D_{13}^{L_3} = -(\sqrt{3}/2)D_{23}^{L_1}, \\ D_{12}^{L_2} &= -D_{12}^{L_3} = -(\sqrt{3}/4)(D_{11}^{L_1} - D_{22}^{L_1}), \end{aligned}$$

что и позволяет определить деформационные потенциалы всех 12 щелей лишь по компонентам  $D_{ij}$  для  $E_{L_1^q T}$  и  $E_{L_1^s T}$ .

Деформационные потенциалы главных  $L_1$ -экстремумов рассчитаны с помощью решения системы уравнений типа (1), в которые заложены данные об изменении величин  $E_{L_1^q T}$  и  $E_{L_1^s T}$  при различных типах статического упругого

<sup>1</sup> Здесь и далее бинарная ось кристалла  $C_2$  обозначена как ось 1, биссекторная ось  $C_1$  — как ось 2, а тригональная  $C_3$  — как ось 3.

деформирования. Экстремальные данные, использованные при расчете, приведены в табл. 1.

Величины деформаций в случае анизотропного деформирования определены рентгенографически [5], а при всестороннем сжатии рассчитаны по упругим модулям сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$ . Дополнительно использованы данные о величине  $D_{23}$  для  $L_1^q$ -терма у висмута ( $D_{23} = +1.5$  эВ [1]) и  $L_1^q$ -терма у сурьмы ( $D_{23} = +1$  эВ [2]), определенные из ультразвуковых измерений. Результаты вычислений приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 1

Изменение энергетических зазоров  $E_{L_1^q T}$  и  $E_{L_1^s T}$  и компоненты тензора деформации у сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$  при различных типах сжатия

Тип сжатия	$\Delta E$ , мэВ		Деформации $\epsilon_{ij} \cdot 10^4$					
	$\Delta E_{L_1^q T}$	$\Delta E_{L_1^s T}$	$\epsilon_{11}$	$\epsilon_{22}$	$\epsilon_{33}$	$\epsilon_{23}$	$\epsilon_{13}$	$\epsilon_{12}$
Гидростатическое [3]	0.55	2.55	-6.5	-6.5	-16.5	0	0	0
Вдоль $C_1$ [4]	-20	-20	10.5	-24.4	8.0	-11.0	0	0
Вдоль $C_2$ [4]	10	12.5	-24.6	10.2	8.3	10.5	0	0

Примечание. Данные для гидростатического сжатия приведены для давления  $P = 0.1$  ГПа (1 кбар), а для анизотропного сжатия — в пересчете на одноосное напряжение такой же величины. Индекс 1 соответствует оси  $C_2$ , 2 — оси  $C_1$ , 3 — оси  $C_3$ .

Полученные деформационные потенциалы позволяют вычислить по формуле (1) изменение любой энергетической щели при деформировании, если известны компоненты тензора деформаций или напряжений. Вследствие слабой зависимости скорости относительного смещения  $L$ - и  $T$ -термов при деформировании

Т а б л и ц а 2

Деформационные потенциалы запрещенной зоны у сплава  $\text{Bi}_{0,9}\text{Sb}_{0,1}$

Обозначение щели	Деформационные потенциалы $D_{ij}$ , эВ					
	$D_{11}$	$D_{22}$	$D_{33}$	$D_{23}$	$D_{13}$	$D_{12}$
$E_{L_1 L_1}$	0.7	1.6	0.3	-0.5	0	0
$E_{L_2 L_2}$	1.4	0.9	0.3	0.2	-0.4	-0.4
$E_{L_3 L_3}$	1.4	0.9	0.3	0.2	0.4	0.4
$E_{L_1 L_2}$	-5.6	7.9	0.3	1.8	-1.3	1.3
$E_{L_1 L_3}$	-5.6	7.9	0.3	1.8	3.6	-3.6
$E_{L_2 L_1}$	7.7	-5.4	0.3	-2.0	0.9	-4.0
$E_{L_2 L_3}$	1.4	0.9	0.3	0.2	1.3	-8.2
$E_{L_3 L_1}$	7.7	-5.4	0.3	-2.0	-0.9	4.0
$E_{L_3 L_2}$	1.4	0.9	0.3	0.2	-1.3	8.2
$E_{L_1^q T}$	-2.3	7.0	-2.2	1.0	0	0
$E_{L_2^q T}$	4.7	0	-2.2	-0.5	0.9	-4.0
$E_{L_3^q T}$	4.7	0	-2.2	-0.5	-0.9	4.0
$E_{L_1^s T}$	-3.0	5.4	-2.5	1.5	0	0

Примечание. Все величины  $D_{ij}$  определены с точностью 0.3+-0.5 эВ, -за исключением  $D_{12}$  и  $D_{13}$  для  $E_{L_1^q T}$ ,  $E_{L_1^s T}$  и  $E_{L_1 L_1}$ , которые точно равны нулю из соображений симметрии.

ст концентрации  $\text{Sb}$  [4] деформационные потенциалы (табл. 2) могут быть использованы во всей полупроводниковой области сплавов  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ . Отметим некоторые особенности деформационных потенциалов этих сплавов.

1) Сильная анизотропия деформационных потенциалов непрямых щелей (разные знаки  $D_{ij}$ ) приводит к их повышенной чувствительности к анизотропному деформированию по сравнению со всесторонним сжатием.

2) Одинаковые знаки при деформационных потенциалах прямых щелей показывают, что наиболее эффективным воздействием на величину  $E_{L_i L_i}$  является гидростатическое сжатие.

3) Деформационные потенциалы прямых щелей почти на порядок меньше деформационных потенциалов не прямых, что обуславливает неизменность (или слабую зависимость) прямых щелей  $E_{L_i L_i}$  от анизотропной деформации. Это обстоятельство получило подтверждение при исследовании  $E_{L_i L_i}$  методом резонансной ударной ионизации, описанным далее.

Для экспериментального изучения влияния деформаций на прямую энергетическую щель можно воспользоваться эффектом резонансной ударной ионизации [6]. Появление резонансных максимумов скорости ударной ионизации в квантующем магнитном поле связано с вертикальными оже-переходами. Эти переходы при выполнении условия

$$E_{n,s} - E_0 = E_{L_i L_i}, \quad (2)$$

где  $E_{n,s}$ ,  $E_0$  — энергии  $n$ ,  $s$ -го и нижнего уровней Ландау, обладают минимальной пороговой энергией, что вместе с особенностями плотности состояний на дне подзон Ландау приводит к резонансному возрастанию скорости ударной ионизации. В том случае, когда диамагнитный сдвиг нулевого уровня Ландау в точности совпадает со сдвигом, обусловленным  $g$ -фактором, для носителей с кейновским законом дисперсии из (2) следует, что магнитные поля  $H_N$  наблюдения резонансов равны:

$$H_N = M \frac{cm_0}{e\hbar} \frac{E_{L_i L_i}^2}{N}, \quad (3)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона,  $M$  — константа, определяемая величиной матричных элементов оператора скорости,  $N=1, 2, 3, \dots$  [6]. Вообще говоря, при различии этих сдвигов для описания экспериментальных данных нужно пользоваться более общим выражением (2), однако, благодаря тому что у легких носителей в  $L$ -долинах в сплавах висмут—сурьма это различие невелико, для этих материалов достаточно учесть в соотношении (3) зависимость величины  $E_{L_i L_i}$  от магнитного поля аналогично тому, как это было сделано в работе [6]. Концентрационная зависимость прямой энергетической щели, определенная для сплава висмут—сурьма в [6], согласуется с данными традиционных методов с точностью  $\pm 0.5$  мэВ, что и определяет возможную величину ошибки, вносимой при использовании соотношения (3). Устойчивость матричных элементов к внешним воздействиям открывает возможность использования эффекта для изучения влияния деформаций на прямую энергетическую щель  $E_{L_i L_i}$ . Метод является достаточно удобным в осуществлении, поскольку резонансы скорости ударной ионизации проявляются в виде минимумов на фоне плавного хода легко получаемых магнитополевых зависимостей сопротивления в области пробивных электрических полей.

Эксперименты проводились на сплавах  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$   $n$ - и  $p$ -типа ( $0.10 \leq x \leq 0.15$ ;  $n, p = 10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) при одноосном сжатии до 0.3 % вдоль бинарной и биссекторной осей с помощью методики, описанной в работе [7]. С целью исключения перегрева образцов для измерений сопротивления  $\rho$  при 4.2 К в сильных электрических полях до 50 В/см (плотность измерительного тока  $j = 10^4 \text{ А/см}^2$ ) использовалась импульсная методика. Измерения проводились в продольной ориентации магнитного поля  $H$ , для которой монотонный ход сопротивления минимален и связанные с резонансами особенности хорошо выражены.

На рис. 2 приведены типичные зависимости  $\rho$  от  $H$  для случая сжатия вдоль биссекторной оси. При малых измерительных токах отмечается монотонный рост сопротивления. При больших токах, которые, согласно контрольным измерениям вольтамперных характеристик, действительно отвечают области межзонного пробы, появляются достаточно выраженные резонансные минимумы. Резонанс при  $H = 12$  кЭ связан с переходами в эквивалентных  $L_2$ - и  $L_3$ -долинах ( $N=1$ ) [6], а при  $H = 6$  кЭ обусловлен переходами как в  $L_1$  ( $N=1$ ), так и в  $L_2$ ,  $L_3$  ( $N=2$ ).<sup>2</sup> Неизменность положения резонанса при 12 кЭ и отсутствие расщеп-

<sup>2</sup> В этой ориентации величина  $M$  из (3) для  $L_1$  практически в 2 раза меньше, чем для  $L_2$ ,  $L_3$  [6].

ления резонанса при 6 кЭ при деформациях вплоть до предельных значений  $\epsilon = -0.3\%$  свидетельствуют о постоянстве прямых щелей  $E_{L_1L_1}$ ,  $E_{L_2L_2}$  и  $E_{L_3L_3}$  (в пределах 3–5%, определяемых точностью фиксирования минимума на зависимостях  $\rho$  от  $H$ ).

При сжатии вдоль  $C_2$  особенности магнитосопротивления менее выражены (рис. 3), однако все закономерности остаются теми же. В этом случае наблю-

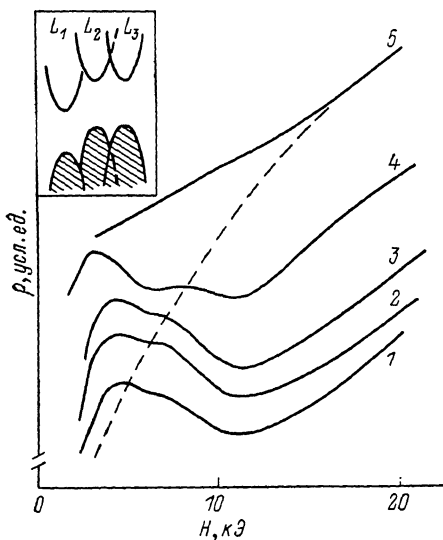


Рис. 2. Магнитополевые зависимости сопротивления  $\text{Bi}_{0.895}\text{Sb}_{0.105}$ .

$j=3 \cdot 10^3 \text{ A/cm}^2$ ,  $j \parallel H \parallel C_1$ . Деформация вдоль биссекторной оси  $\epsilon$ , %: 1 — 0, 2 — 0.07, 3 — 0.13, 4 — 0.19, 5 — 0.29. Штриховая кривая соответствует  $j=10 \text{ A/cm}^2$ ,  $\epsilon=0$ . Кривые смещены по оси ординат. На вставке — относительное расположение зон при сжатии вдоль  $C_1$ , не нарушающем эквивалентности экстремумов  $L_2$  и  $L_3$ .

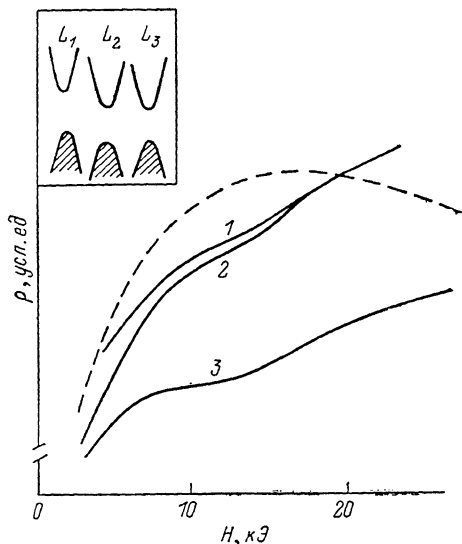


Рис. 3. Магнитополевые зависимости сопротивления  $\text{Bi}_{0.85}\text{Sb}_{0.15}$ .

$j=3.3 \cdot 10^3 \text{ A/cm}^2$ ,  $j \parallel H \parallel C_2$ . Деформация сжатия вдоль бинарной оси  $\epsilon$ , %: 1 — 0, 2 — 0.15, 3 — 0.3. Штриховая кривая соответствует  $j=11 \text{ A/cm}^2$ ,  $\epsilon=0$ . Кривые смещены по оси ординат. На вставке — относительное расположение зон при сжатии вдоль  $C_2$ , не нарушающем эквивалентности экстремумов  $L_2$  и  $L_3$ .

дается один резонанс, обусловленный переходами в эквивалентных долинах  $L_2$  и  $L_3$  ( $N=1$ ) [6], положение которого также не изменяется при деформировании.

Отсутствие заметного изменения прямых энергетических щелей при одноосном деформировании монокристаллов  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , наблюдаемое методом резонансной ударной ионизации, находится в полном соответствии с результатами расчета с использованием деформационных потенциалов, определенных в настоящей работе.

### Л и т е р а т у р а

- [1] Walther K. — Phys. Rev., 1968, v. 174, N 3, p. 782—793.
- [2] Hoshino S., Kumashizo Y., Takano S. — J. Phys. Soc. Japan, 1981, v. 50, N 2, p. 476—481.
- [3] Пономарев Я. Г. — Автореф. докт. дис. М., 1983.
- [4] Брандт Н. Б., Германн Р., Кульбачинский В. А., Лавренюк М. Ю., Минина Н. Я., Шнайдер Г. — ФТТ, 1982, т. 24, в. 7, с. 1966—1972.
- [5] Ильинский А. Л., Исакова О. Л., Лавренюк М. Ю., Минина Н. Я. — Вестн. МГУ, сер. 3, Физика, астрономия, 1986, т. 27, в. 4, с. 83—88.
- [6] Богданов Е. В., Брандт Н. Б., Мананков В. М., Флейшман Л. С. — Письма ЖЭТФ, 1982, т. 35, в. 2, с. 75—77.
- [7] Брандт Н. Б., Егоров В. С., Лавренюк М. Ю., Минина Н. Я., Савин А. М. — ЖЭТФ, 1985, т. 89, в. 12, с. 2257—2269.