

Локализация полос межзонных переходов в объеме зоны Бриллюэна кристаллов группы III–V

© В.В. Соболев, Д.А. Перевощиков

Удмуртский государственный университет,
426034 Ижевск, Россия

E-mail: sobolev@uni.udm.ru

(Получена 17 сентября 2015 г. Принята к печати 14 октября 2015 г.)

В рамках теории функционала электронной плотности определена локализация переходов в объеме зоны Бриллюэна, формирующих основные структуры в спектрах мнимой части диэлектрической функции до ~ 7 эВ полупроводников группы III–V (AlSb, GaSb, InSb и InAs). Выявлено, что интенсивные переходы происходят не только в окрестности осей высокой симметрии зоны Бриллюэна, но и в нескольких конкретных больших объемах неприводимой части зоны Бриллюэна.

1. Введение

Полупроводники группы III–V широко используются при изготовлении различных оптоэлектронных устройств [1]. Поэтому их электронной структуре посвящено множество разнообразных экспериментальных и теоретических [2–29] работ. Теоретические кривые мнимой части диэлектрической функции $\epsilon_2(E)$ [8–21] до ~ 7 эВ содержат три максимума E_1 , E_2 , E'_1 и широкую ступеньку E'_0 между E_1 и E_2 . В редких случаях [9,11,13,14,18,20] между E_2 и E'_1 также выделяют слабую структуру, не имеющую общепринятого обозначения (далее будем обозначать как E_x).

Характерная особенность этих работ состоит в том, что максимумы спектра $\epsilon_2(E)$ обусловлены переходами в точках высокой симметрии зоны Бриллюэна (ЗБ) (Γ , L , X , K) и вдоль трех осей Λ (Γ – L), Δ (Γ – X), Σ (Γ – K), неприводимая часть которой приведена на рис. 1. Здесь и далее координаты всех точек в обратном пространстве приводятся в единицах $2\pi/a_0$ (a_0 — параметр решетки кристалла), а система координат выбирается так, что координаты точек высокой симметрии ЗБ принимают следующие значения: Γ — (0, 0, 0), L — (0.5, 0.5, 0.5), X — (1, 0, 0), K — (0.75, 0.75, 0), U — (1, 0.25, 0.25) и W — (1, 0.5, 0).

Самый длинноволновый максимум E_1 образован переходами из двух верхних валентных зон (ВВЗ) V_1 и V_2 в нижнюю зону проводимости (НЗП) C_1 на оси Λ . Он расположен в зависимости от кристалла и метода расчета на участке от точки (0.15, 0.15, 0.15) до L [8–13,18] или только в небольшой окрестности точки L [17,19,21]. Максимум E_2 в основном формируют переходы между ВВЗ и НЗП [8–14]. Наиболее интенсивные из них происходят в окрестности оси Σ от точки (0.45, 0.45, 0) до точки K [8,10–12], а также вдоль оси Δ [8,9,11,17,19,21] (в особенности около точки X [8,9,17,21]). Существование третьего максимума E'_1 связывают с переходами из зон V_1 , V_2 в C_2 , расположенными в точке L [9,10,13,21] и ее окрестности до точки (0.375, 0.375, 0.375) [11,12], а также на оси Δ [11]. Существование небольшой структуры E_x связано с переходами из ВВЗ во вторую

НЗП (C_2), происходящими в объеме ЗБ в окрестности точек от $\sim (0.5, 0.0, 0.0)$ до $\sim (0.7, 0.0, 0.0)$ на оси Δ [9,11,13,14]. В формировании ступеньки E'_0 участвуют переходы из двух ВВЗ: в НЗП на участке оси Δ от (0.5, 0.0, 0.0) до (0.7, 0.0, 0.0) [9,11,12,18] и во вторую НЗП в окрестности центра ЗБ [8,9,11,13,17,18].

Дополнительно в работах [9,10,13,18] предполагаются качественные схемы более сложной локализации переходов и их расположения в широкой области \mathbf{k} -точек. Наибольшие различия схем локализации структур переходов возникают в случае основного максимума E_2 . Так, определяющую роль в образовании E_2 играют ось X – U и ее окрестность [9], оси Δ , W – K и L – W [18], окрестности точки K и оси L – U треугольных форм на гранях ΓLK и ΓLUX неприводимой части ЗБ [10], окрестность точки (0.75, 0.25, 0.25) на ΓLUX [13]. Полосы E_x и E'_1 в [18] образованы переходами из V_1 и V_2 в C_2 вдоль осей Δ , X – W и L – W .

Итак, во всех этих расчетах локализация полос переходов четырех кристаллов группы III–V рассматривалась на основе только общих схем изоэнергетических

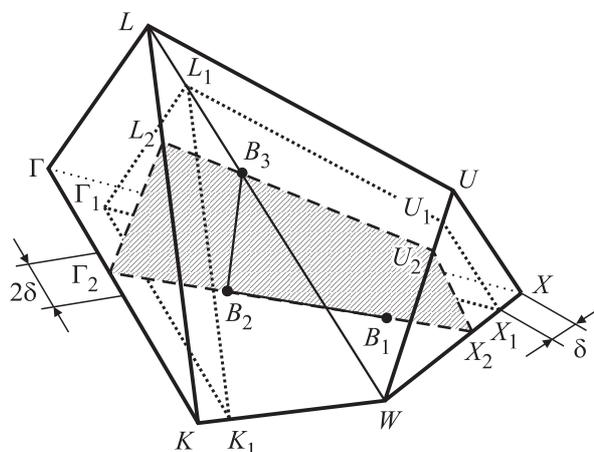


Рис. 1. Нприводимая часть зоны Бриллюэна и схематическое расположение плоскостей $\Gamma_1L_1U_1X_1$, $\Gamma_1L_1K_1$, $\Gamma_2L_2U_2X_2$ и точек B_1 , B_2 , B_3 .

поверхностей с весьма приближенным указанием области их расположения в ЗБ. Общепринято, что роль той или иной области ЗБ при формировании структур спектра $\varepsilon_2(E)$ не представляет собой тривиальную задачу, при этом данные различных расчетов заметно неодинаковы и противоречивы.

Оптические спектры кристаллов группы III–V в широкой области энергий экспериментально исследованы во многих работах [2–6,24–27]. Спектры диэлектрической проницаемости при этом получены эллипсометрическими методами в основном в области 1.5–6.5 эВ при температурах $T = 10$ (GaSb) [25], 22 (InAs) [27], 100 (InSb) [26] и 300 К (AlSb) [24]. Во всех этих спектрах хорошо выделяются длинноволновый максимум E_1 при (2.4 ± 0.45) эВ, основной максимум E_2 при (4.27 ± 0.27) эВ и слабый максимум E'_1 при больших энергиях. Кроме того, по обе стороны главного максимума наблюдаются менее интенсивные структуры E'_0 и E_x .

В [3,5–7] приводятся данные исследований в области длинноволнового края поглощения кристаллов группы III–V при температурах жидкого гелия. Это позволило подробно изучить строение их ВВЗ и НЗП в окрестности точки Γ и с высокой точностью определить значения запрещенных зон: GaSb, InSb и InAs являются прямозонными полупроводниками с прямыми запрещенными зонами $E_{gd}^e(\Gamma) = 0.811, 0.23$ и 0.418 эВ соответственно (индекс e указывает, что значения экспериментальные). Максимум ВВЗ AlSb расположен в центре ЗБ, минимум НЗП — в точке X , а соответствующее значение непрямой запрещенной зоны $E_{gi}^e(\Gamma-X) = 1.677$ эВ.

Цель данной работы состоит в получении новой информации о локализации полос переходов четырех наиболее популярных кристаллов группы III–V в конкретных объемах ЗБ.

2. Методика расчетов

Зоны и спектры мнимой части диэлектрической проницаемости четырех соединений группы III–V рассчитаны на основе теории функционала электронной плотности при помощи пакета программ Wien2k [30] без учета спин-орбитальной связи. Спин-орбитальное взаимодействие в основном дублетно расщепляет длинноволновый максимум E_1 без изменения его сравнительно простой локализации и очень слабо влияет на другие структуры $\varepsilon_2(E)$. Поэтому неучет этого эффекта заметно облегчает расчеты без уменьшения информации о локализации и энергии остальных максимумов $\varepsilon_2(E)$. В данном пакете программ используется метод FP–LAPW, а в качестве обменно-корреляционного потенциала — обобщенное градиентное приближение GGA–PBE [31]. Экспериментальные значения параметров решеток кристаллов составляют $a_0 = 6.1355$ (AlSb), 6.096 (GaSb), 6.479 (InSb) и 6.058 \AA (InAs) [28]. Основной недостаток первопринципных расчетов, использующих приближение локального поля и метод обобщенного градиентного

приближения, состоит в заметном занижении энергии запрещенной зоны $E_{gd}(\Gamma)$ [5,20–23,29]. Этот эффект особенно заметен для узкозонных кристаллов с экспериментальными значениями $E_g(\Gamma) = 0.23$ (InSb) и 0.418 эВ (InAs): при использовании экспериментальных значений параметра кристаллической решетки a_0 теоретическая щель E_{gd} у них исчезает. Поэтому без потери общности результатов расчетов спектров локализации полос переходов для получения положительных энергий $E_{gd}(\Gamma)$ для InSb и InAs в расчетах их зон нами были использованы параметры $a_0 = 6.364$ и 5.900 \AA , уменьшенные на 1.8–2.6% от их экспериментальных значений для InSb и InAs соответственно. Интегрирование по всему объему неприводимой части ЗБ выполнено методом тетраэдров [32] на основе 4612 k -точек. В расчетах спектров мнимой части диэлектрической проницаемости применялась формула [5]

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi^2 e^2}{m^2 (\hbar\omega)^2 \Omega_0} \sum_{V,C} \int_S \frac{|P_{CV}|^2 f(E_C)[1 - f(E_V)]}{|\nabla_{\mathbf{k}}(E_C(\mathbf{k}) - E_V(\mathbf{k}))|} dS, \quad (1)$$

где e, m — заряд и масса электрона соответственно, Ω_0 — объем элементарной ячейки, E_V, E_C — энергии валентной зоны и зоны проводимости соответственно, P_{CV} — матричный элемент вероятности перехода из валентной зоны V в зону проводимости C , $f(E)$ — функция распределения Ферми–Дирака, S — поверхность постоянной энергии $E_C(\mathbf{k}) - E_V(\mathbf{k}) = \hbar\omega$. Отсюда видно, что спектр $\varepsilon_2(E)$ имеет особенности при $\nabla_{\mathbf{k}} E_C = \nabla_{\mathbf{k}} E_V$, т.е. в случае ковариантности валентной зоны и зоны проводимости. На этом основан весьма упрощенный, но часто применяемый теоретический анализ кривых ε_2 : максимумам спектра $\varepsilon_2(E)$ ставят в соответствие переходы, для энергии которых соответствующие пары зон ковариантны в наибольшей области \mathbf{k} -пространства. Также заметную роль в вычислении диэлектрической проницаемости может играть значение матричного элемента вероятности перехода P_{CV} в электромагнитном поле световой волны [33], определяемое по формуле

$$P_{CV} = -A_0 \frac{ie\hbar}{mc\Omega_0} \int_{\Omega_0} \psi_{V,\mathbf{k}}^*(r) \nabla \psi_{C,\mathbf{k}}(r) dr, \quad (2)$$

где $\psi_{V,\mathbf{k}}$ и $\psi_{C,\mathbf{k}}$ — начальное и конечное состояния электрона, A_0 — амплитуда векторного потенциала электромагнитной волны, c — скорость света в вакууме. Учет P_{CV} может привести к существенному изменению интенсивности межзонных переходов.

На основе полученных данных о зонных структурах и матричных элементах вероятности переходов определение локализации переходов в ЗБ проводилось с помощью пакета программ, разработанного в отделе оптической спектроскопии УдГУ. Для наиболее широких максимумов E_1 и E_2 локализация переходов изучалась не при одной энергии (энергии максимума), а в интервале энергий, в которой расположена наибольшая часть рассматриваемой полосы.

3. Результаты расчетов и их обсуждение

Сначала были рассчитаны энергетические зоны кристаллов AlSb, GaSb, InSb и InAs по всему объему ЗБ. Установлено, что GaSb, InSb и InAs являются прямозонными полупроводниками с запрещенной зоной E_{gd}^t в точке Γ : $E_{gd}^t(\Gamma) = 0.33$ (GaSb), 0.11 (InSb) и 0.15 эВ (InAs) (индекс t указывает, что значения получены теоретически). Максимум ВВЗ AlSb расположен в Γ , минимум НЗП — в точке X , а энергии запрещенных зон принимают значения: $E_{gd}^t(\Gamma) = 1.61$ эВ, $E_{gi}^t(\Gamma-L) = 1.37$ эВ и $E_{gi}^t(\Gamma-X) = 1.25$ эВ. Введем поправку $\Delta_{e-t} = E_{gd}^e(\Gamma) - E_{gd}^t(\Gamma)$ для GaSb, InSb, InAs и $\Delta_{e-t} = E_{gi}^e(\Gamma-X) - E_{gi}^t(\Gamma-X)$ для AlSb, связанную с традиционным занижением теоретических расчетов E_g^t относительно экспериментальных данных E_g^e . Таким образом, наши расчетные данные занижены на $0.12-0.48$ эВ: $\Delta_{e-t} = 0.43$ (AlSb), 0.48 (GaSb), 0.12 (InSb) и 0.27 эВ (InAs).

За исключением непрямозонности, в остальном зоны AlSb не имеют существенных отличий от зон других рассмотренных нами соединений. Поэтому дальнейшее обозначение зон одинаково для всех четырех кристаллов. Вдоль двух главных осей Λ , Δ и в их небольшой окрестности верхние валентные зоны V_1 и V_2 вырождены. В остальных точках высокой симметрии ЗБ уровень V_2 расположен ниже, чем V_1 , на энергию от 0.5 до 1.5 эВ. Принимая обычную схему расположения максимума ВВЗ в точке Γ за начало отсчета энергии, получаем, что две ВВЗ во всех кристаллах расположены в интервале от 0 до (-3.5 ± 0.3) эВ, а третьи ВВЗ

Таблица 1. Энергии основных структур в спектрах ϵ_2 кристаллов AlSb, GaSb, InSb, InAs

Соединение	Источник	E_1	E'_0	E_2	E_x	E'_1
AlSb	Наши данные	2.81	3.73	4.05	4.95	5.09
	Эксп. [24]	2.838	3.76	4.00	—	5.22
	Теор. [15]	2.8	—	3.8	—	4.7
	Теор. [17]	2.67	3.44	3.86	—	5.06
GaSb	Наши данные	2.28	3.38	4.23	5.06	5.47
	Эксп. [25]	2.16	3.4	4.13	5.11	5.4
	Теор. [15]	1.9	—	3.6	—	4.8
	Теор. [17]	1.95	3.04	4.00	—	—
InSb	Наши данные	1.93	3.22	3.83	4.42	4.98
	Эксп. [26]	1.968	3.14	4.186	—	5.22
	Теор. [16]	2.17	—	4.10	—	5.20
	Теор. [17]	1.86	2.88	4.13	—	5.09
InAs	Наши данные	2.63	4.17	4.54	5.07	5.91
	Эксп. [27]	2.608	—	4.54	5.282	6.261
	Теор. [17]	2.55	4.21	4.61	—	—
	Теор. [20]	3.33	—	4.55	5.10	5.90

Примечание. Все значения приведены в эВ; Эксп. — эксперимент, Теор. — теоретический расчет.

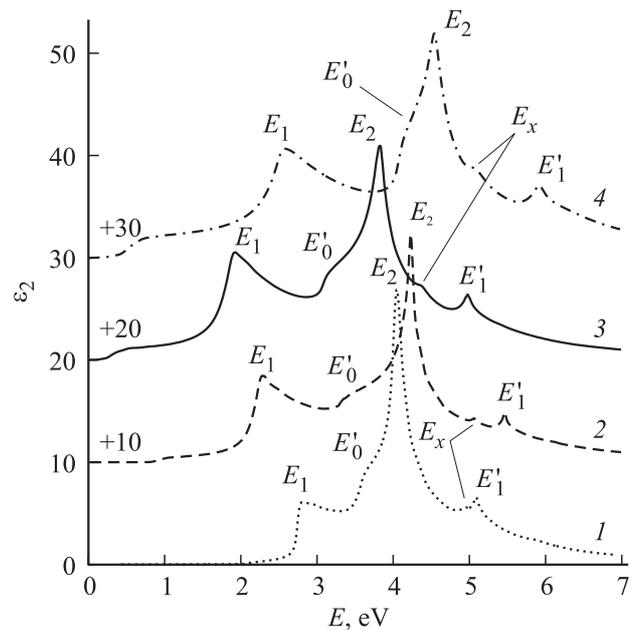


Рис. 2. Функция $\epsilon_2(E)$ кристаллов AlSb (1), GaSb (2), InSb (3) и InAs (4).

находятся в интервале от 0 до (-6.2 ± 0.8) эВ. Нижние зоны проводимости имеют сложное строение и во многих направлениях перекрываются между собой. Ширина двух нижних зон проводимости C_1 и C_2 составляет $\sim (4.3 \pm 0.3)$ эВ.

Далее на основе полученных зон с учетом поправки Δ_{e-t} для каждого кристалла были рассчитаны спектры мнимой части функции диэлектрической проницаемости $\epsilon_2(E)$. Они содержат пять основных структур: E_1 , E'_0 , E_2 , E_x , E'_1 (рис. 2). Значения энергий этих структур представлены в табл. 1 в сравнении с аналогичными значениями из других теоретических и экспериментальных работ. Отличия наших данных от экспериментальных в основном не превышают 0.1 эВ и достигают 0.36 эВ для E_2 (InSb) и E'_1 (InAs). Необходимо отметить, что благодаря особенностям симметрии зон V_1 и V_2 интенсивность переходов с их участием существенно неодинакова. Окрестность длинноволнового максимума E_1 от энергии длинноволнового края поглощения до ступеньки E'_0 формирует переходы лишь из двух вырожденных ВВЗ в НЗП ($V_{1,2} \rightarrow C_1$). В области больших энергий (ступенька E'_0) начинаются переходы во вторую НЗП ($V_{1,2} \rightarrow C_2$). Так, самый интенсивный максимум E_2 образован в основном переходами $V_1 \rightarrow C_1$ (см. вторую колонку в табл. 2). Начиная с E_x их вклад (наряду с $V_2 \rightarrow C_1$) значительно уменьшается. Поэтому в области структур E_x и E'_0 определяющую роль играют переходы $V_1 \rightarrow C_2$. Участие остальных пар зон не оказывает столь же заметного влияния. Поэтому до ~ 7 эВ будет достаточно рассмотреть локализацию в обратном пространстве лишь для переходов из двух ВВЗ в две НЗП. Следует учитывать, что при описании наших данных о локализации в какой-либо области ЗБ, будет также

Таблица 2. Вклады (в %) переходов $V_1 \rightarrow C_1$ спектра $\varepsilon_2(E)$ в интенсивность основного максимума E_2 в различных участках ЗБ кристаллов AlSb, GaSb, InSb и InAs

Соединение	Область				
	Весь объем ЗБ	ΓLUX	$\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$	Область II	Область III
AlSb	88.5	30	12	13	33.5
GaSb	92	39	12	7	34
InSb	86	29	16	3	37.5
InAs	84	31	15	7	31

иметься в виду и ее окрестность радиусом δ , если не уточняется иное ($\delta \approx 0.0434 \cdot 2\pi/\text{\AA}$).

3.1. Максимум E_1

Согласно расчетам, переходы в области длинноволнового максимума происходят лишь из двух ВВЗ в НЗП. При этом интенсивность перехода $V_1 \rightarrow C_1$ больше, чем перехода $V_2 \rightarrow C_1$, в 2–2.5 раза. Обе полосы сосредоточены в основном в отрезках оси Λ : AlSb — от L (0.5, 0.5, 0.5) до точки (0.15, 0.15, 0.15) и от L до точки (0.44, 0.44, 0.44), GaSb — от L до точки (0.24, 0.24, 0.24) и от точки (0.22, 0.22, 0.22) до точки (0.15, 0.15, 0.15), InSb — от точки (0.41, 0.41, 0.41) до точки (0.22, 0.22, 0.22) и от L до точки (0.26, 0.26, 0.26), InAs — от точки (0.43, 0.43, 0.43) до точки (0.26, 0.26, 0.26) и от L до точки (0.30, 0.30, 0.30) соответственно для полос $V_1 \rightarrow C_1$ и $V_2 \rightarrow C_1$. Часть их интенсивности приходится на очень небольшую δ - (AlSb) и 2δ -окрестность (GaSb, InSb, и InAs) оси Λ на плоскости ΓLK и небольшую область на пересечении плоскостей ΓKWX и ΓLW : около точек (0.14, 0.06, 0.0), (0.17, 0.09, 0.0), (0.20, 0.10, 0.0) и (0.23, 0.12, 0.0) для AlSb, GaSb, InSb и InAs соответственно.

В отличие от упрощенных результатов [8–13,17–19,21], по нашим данным, для всех четырех кристаллов локализация обеих полос переходов $V_1 \rightarrow C_1$ и $V_2 \rightarrow C_1$ вдоль направления $\Gamma-L$ имеет сложный и неоднородный характер: они происходят не только в непосредственной окрестности точки L , но и в конкретных участках на оси Λ (в отличие от [8–13,18]) и плоскости ΓLK (как в [10] для GaSb); переходы из V_1 и V_2 вдоль Λ сильно различаются по интенсивности, несмотря на вырождение данной пары по энергии; в окрестности пересечения плоскостей ΓKWX и ΓLW их интенсивности значительно возрастают.

3.2. Ступенька E'_0

В случае ступеньки E'_0 наши данные более детальны, чем результаты других расчетов. Наиболее важную роль для всех рассматриваемых соединений играют переходы $V_{1,2} \rightarrow C_2$ в окрестности в $\sim (3-4)\delta$ около центра ЗБ

(в AlSb переходы в среднем чуть ближе к точке Γ , в InSb — чуть дальше) и переходы $V_{1,2} \rightarrow C_1$ — вдоль отрезков на плоскости ΓKWX вблизи оси Δ . Для GaSb, InSb и InAs главную роль играют максимумы в спектрах парциальных вкладов переходов из двух ВВЗ во вторую НЗП, а для AlSb — переходы из второй ВВЗ в НЗП.

3.3. Максимум E_2

Максимум самой интенсивной полосы находится при ~ 4.05 (AlSb), 4.23 (GaSb), 3.83 (InSb) и 4.54 эВ (InAs) (табл. 1 и рис. 2). Он формируется на $\sim (88 \pm 4)\%$ переходами из ВВЗ в НЗП в большой области объема ЗБ (табл. 2). Весь этот набор k -точек можно разделить на следующие области: 1) окрестность плоскости ΓLUX (область I, рис. 3), 2) окрестность плоскости ΓLK

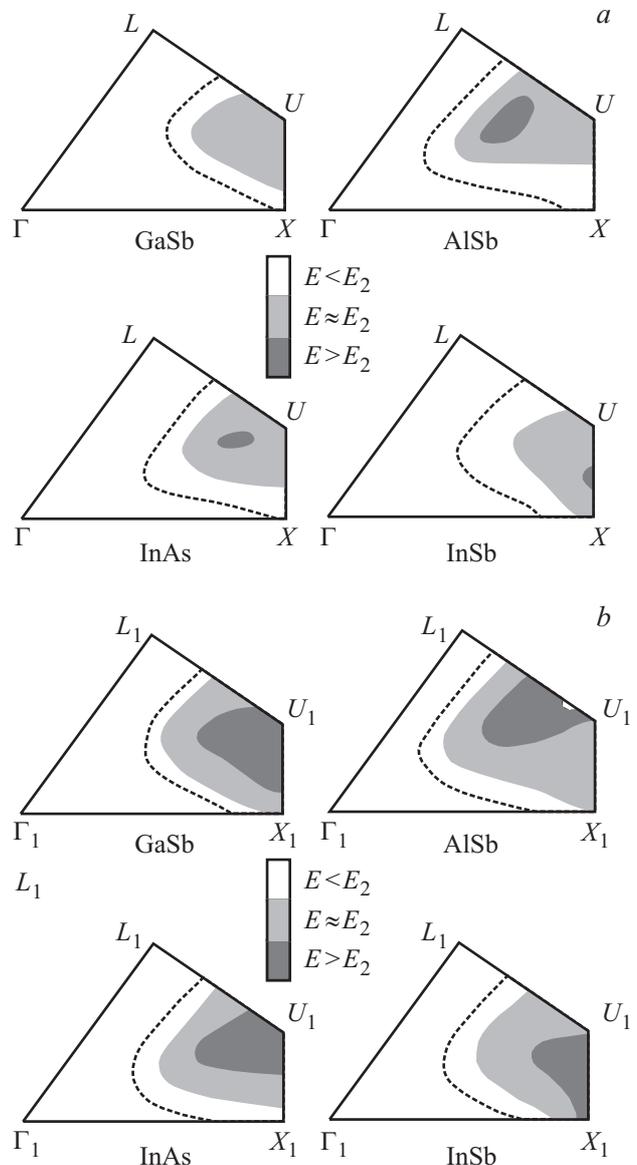


Рис. 3. Локализация межзонных переходов для основного максимума E_2 кристаллов AlSb, GaSb, InSb и InAs на плоскостях ΓLUX (a) и $\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$ (b) (область I).

(область II, рис. 4), 3) окрестность плоскости $\Gamma_2 L_2 U_2 X_2$ (область III, рис. 1). Так как полоса E_2 сравнительно широкая, то области I, II и III разделены еще на следующие три части, ответственные за: 1) длинноволновую (белая), 2) коротковолновую (темно-серая) части структуры E_2 и 3) непосредственную окрестность максимума (светло-серая). Длинноволновую сторону основного максимума ограничим энергиями в 3.90 (AlSb), 4.16 (GaSb), 3.64 (InSb) и 4.27 эВ (InAs), коротковолновую — 4.21 (AlSb), 4.30 (GaSb), 3.96 (InSb) и 4.76 эВ (InAs).

Переходы, сосредоточенные в области I, ответственны за $\sim (42-51)\%$ вклада в полосу E_2 и ограничены в ЗБ плоскостями ΓLUX и $\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$. Точки Γ_1 , L_1 , U_1 и X_1 имеют координаты $(\delta, \delta, 0.0)$, $(0.5 + \delta/3, 0.5 + \delta/3, 0.5 - 2\delta/3)$, $(1.0, 0.25 + 0.5\delta, 0.25 - 0.5\delta)$ и $(1.0, \delta, 0.0)$ соответственно. Таким образом, область I для всех кристаллов занимает значительную часть на грани ΓLUX ($\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$), и ограничена с одной стороны отрезками $\Gamma-X$ (Γ_1-X_1), $X-U$ (X_1-U_1) и $L-U$ (L_1-U_1), с другой — V-образной кривой, концы которой расположены на осях $\Gamma-X$ (Γ_1-X_1) и $L-U$ (L_1-U_1). Формирование длинноволновой стороны полосы E_2 происходит в основном около этой V-образной кривой. За коротковолновую сторону отвечает область, смещенная ближе к точке U (U_1) и оси $U-X$ (U_1-X_1). Несмотря на то что расстояние между внешней и внутренней границами области I крайне мало ($\sim \delta/\sqrt{2}$), конфигурация и интенсивность при переходе от первой ко второй сильно изменяются (табл. 2): сама область несколько увеличивается, зато интенсивность падает в 2–3 раза. Из этих данных явно следует, что точки X [8,9,17,21], $(0.75, 0.25, 0.25)$ [13] и оси Δ [11,19], $X-U$ [9] составляют лишь небольшую часть широкого спектра k -точек, ответственных за интенсивные переходы на ΓLUX и $\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$.

Описание области II аналогично описанию области I, если заменить плоскости ΓLUX на ΓLK и $\Gamma_1 L_1 U_1 X_1$ на $\Gamma_1 L_1 K_1$ (рис. 4). Точка K_1 имеет координаты $(0.75 + 0.5\delta, 0.75 - 0.5\delta, 0)$. На грани ΓLK наиболее важным для наших исследований является ось Σ (в особенности около вершины K): так, для InSb ее роль незначительна ($\sim 3\%$), для GaSb и InAs вклад составляет $\sim 7\%$, для AlSb — $\sim 13\%$. Таким образом, значение оси Σ при формировании полосы E_2 не столь внушительно, как это описывается в [8,11,12,18,19,21].

Область III расположена в δ -окрестности плоскости $\Gamma_2 L_2 U_2 X_2$, схематически ее расположение в неприводимой части ЗБ приведено на рис. 1 вдоль отрезков $B_1 B_2$ и $B_2 B_3$. Для всех четырех кристаллов точка B_1 имеет координаты $(0.85, 0.11, 0.0)$, B_2 — $(0.45, 0.225, 0.0)$ для AlSb и $(0.5, 0.25, 0.0)$ для остальных, B_3 — $(0.7, 0.5, 0.3)$ для InSb и $(0.67, 0.5, 0.33)$ для остальных. Наибольшая интенсивность переходов в области III сосредоточена в окрестности пересечения плоскостей ΓKWX и ΓLW , т.е. в окрестности точки B_2 .

Итак, полоса E_2 кристаллов AlSb, GaSb, InSb и InAs формируется не в узком интервале точек, а в широкой области k -точек, расположенных не только на гранях

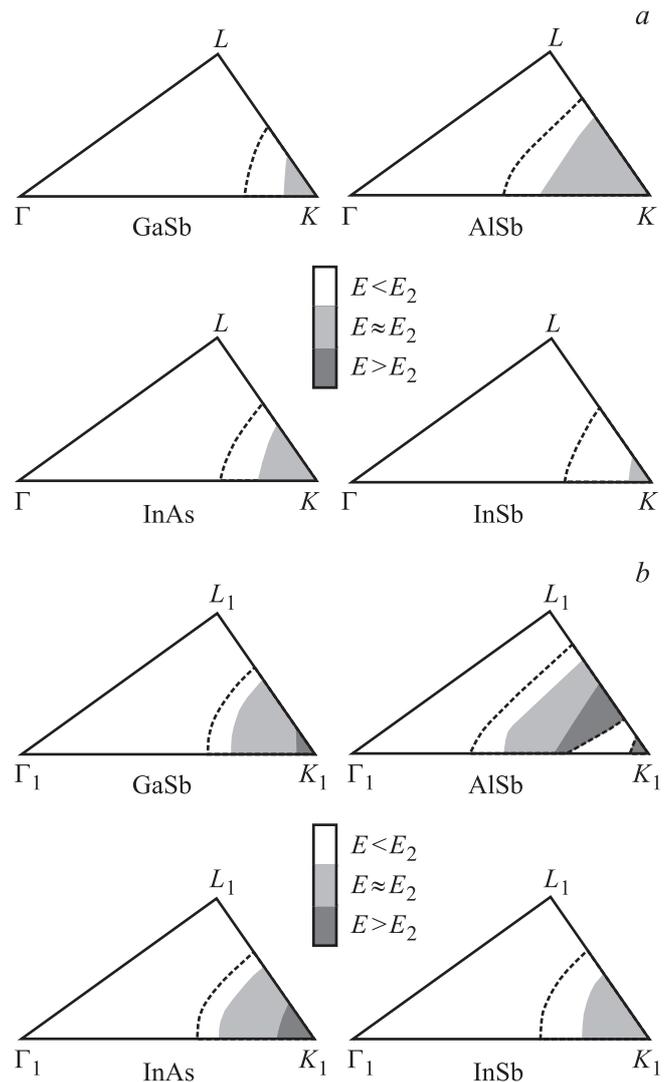


Рис. 4. Локализация межзонных переходов для основного максимума E_2 кристаллов AlSb, GaSb, InSb и InAs на плоскостях ΓLK (a) и $\Gamma_1 L_1 K_1$ (b) (область II).

ΓLUX и ΓLK , как отмечено в [10] для GaSb, но и в объеме ЗБ. При этом значимость осей Δ и Σ сильно зависит от рассматриваемого соединения.

3.4. Структура E_x

Проявление структуры E_x , следующей по энергии за E_2 в спектрах теоретических кривых $\varepsilon_2(E)$, связано с возникновением слабо выраженного небольшого максимума в переходах из ВВЗ во вторую НЗП при ~ 5.0 (AlSb, GaSb, InAs) и ~ 4.4 эВ (InSb) (табл. 1 и рис. 2). Наибольшей интенсивности они достигают вдоль оси Δ от точки $(0.43, 0.0, 0.0)$ до точки $(0.78, 0.0, 0.0)$. В [9,11,13,17] для GaSb, InSb и InAs эти переходы происходят от точки $(0.50, 0.0, 0.0)$ до точки $(0.7, 0.0, 0.0)$. Наиболее интересны переходы в объеме неприводимой части ЗБ, которые не описываются в других работах. Они менее интенсивны, чем расположенные вдоль оси

Δ , и сосредоточены вдоль кривой дугообразной формы. Один конец этой кривой расположен на оси Λ в точках (0.33, 0.33, 0.33) (AlSb), (0.30, 0.30, 0.30) (GaSb), (0.26, 0.26, 0.26) (InSb) и (0.19, 0.19, 0.19) (InAs), другой конец — в окрестности точки (0.50, 0.28, 0.0) в GaSb, InSb, InAs и точки (0.50, 0.25, 0.0) в AlSb.

3.5. Максимум E'_1

Максимум E'_1 формирует та же пара зон, что и E_x . Эта пара зон расположена в широком спектре \mathbf{k} -точек из окрестности вершины L , но, в отличие от [9,10,13,21] для GaSb, InSb и InAs, в самой точке L переходы отсутствуют. Часть переходов сосредоточена на осях высокой симметрии 3Б: на оси Λ в окрестности точек (0.45, 0.45, 0.45) (AlSb, GaSb), (0.43, 0.43, 0.43) (InSb) и (0.37, 0.37, 0.37) (InAs); на оси $L-U$ в окрестности точек (0.58, 0.46, 0.46) (AlSb), (0.56, 0.47, 0.47) (GaSb), (0.59, 0.455, 0.455) (InSb) и (0.61, 0.445, 0.445) (InAs), на оси $L-K$ в окрестности точек, расположенных на том же расстоянии от L , что и точки на оси $L-U$; на оси $L-W$ в окрестности точки (0.60, 0.50, 0.40) для всех четырех кристаллов. В других работах переходы на оси Λ для AlSb, InSb и InAs расположены в окрестности точки (0.375, 0.375, 0.375) [11,12]. Локализация переходов на оси $L-W$ описывается лишь в [18] для GaSb, но без уточнения конкретной области. Переходы на оси Δ , как и в [11,18] для GaSb, InSb и InAs, нами также выявлены, но их интенсивность крайне мала.

4. Заключение

Мнимая часть диэлектрических функций AlSb, GaSb, InSb и InAs рассчитана с использованием метода FP-LAPW в обобщенном градиентном приближении (GGA-PBE) до ~ 7 эВ. Новизна работы состоит в том, что для кристаллов группы III–V наиболее интенсивные переходы могут быть сосредоточены не только лишь в окрестности осей высокой симметрии зоны Бриллюэна, но и в ее объеме. В наибольшей степени это касается полосы E_2 , в формировании которой участвует значительная часть зоны Бриллюэна в окрестности плоскостей $GLUX$, GLK и в окрестности точки (0.45, 0.225, 0.0) (AlSb) или (0.5, 0.25, 0.0) (GaSb, InSb, InAs). Представлены детальные схемы локализации различных частей полос переходов в объеме зоны Бриллюэна.

Работа выполнена при поддержке программ РФФИ № 11-02-07038 и 12-02-07007.

Авторы благодарны А.И. Калугину за помощь в расчетах.

Список литературы

[1] O. Ueda, S.J. Pearton. *Materials and reliability handbook for semiconductor optical and electron devices* (New York, Springer, 2013); Ch. Liu, Y. Li, Y. Zeng. *Engineering*, **2**, 617 (2010).

[2] *Оптические свойства полупроводников (полупроводниковые соединения типа $A^{III}B^V$)*, под ред. Р. Уиллардсона, А. Бира (М., Мир, 1970).

[3] В.В. Соболев. *Оптические фундаментальные спектры соединений A^3B^3* (Кишинев, Штиинца, 1979).

[4] P. Yu, M. Cardona. *Fundamentals of semiconductors* (Berlin, Springer, 2005).

[5] В.В. Соболев. *Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. I. Введение в теорию* (Москва–Ижевск, Изд-во Ин-та компьютерных исследований, 2012).

[6] В.В. Соболев. *Оптические свойства и электронная структура неметаллов. Т. II. Моделирование интегральных спектров элементарными полосами* (Москва–Ижевск, Изд-во Ин-та компьютерных исследований, 2012).

[7] В.В. Соболев, В.В. Немошкаленко. *Электронная структура твердых тел в области фундаментального края поглощения. Т. I. Введение в теорию*. (Киев, Наукова думка, 1992).

[8] F.H. Pollak, C.W. Higginbotham, M. Cardona. *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond.* (Kyoto, Japan, 1966) v. 21, p. 20.

[9] C.W. Higginbotham, F.H. Pollak, M. Cardona. *Proc. 9 Int. Conf. Phys. Semicond.* (Moscow, 1968) v. 11, p. 57.

[10] R.N. Cahn, M. Cohen. *Phys. Rev. B*, **1**, 2569 (1970).

[11] V.C. De Alvarez, J.P. Walter, R.W. Boyd, M.L. Cohen. *J. Phys. Chem. Solids*, **34**, 337 (1973).

[12] I. Topol, H. Neumann, E. Hess. *Czech. J. Phys. B*, **24**, 107 (1974).

[13] J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **14**, 556 (1976).

[14] M. Alouani, L. Brey, N.E. Christensen. *Phys. Rev. B*, **37**, 1167 (1988).

[15] M.-Zh. Huang, W.Y. Ching. *Phys. Rev. B*, **47**, 9449 (1993).

[16] R. Asahi, W. Mannstadt, A.J. Freeman. *Phys. Rev. B*, **59**, 7486 (1999).

[17] S.H. Rhim, M. Kim, A.J. Freeman, R. Asahi. *Phys. Rev. B*, **71**, 045 202 (2005).

[18] A.H. Reshak. *Eur. Phys. J. B*, **47**, 503 (2005).

[19] Zh. Feng, H. Hu, Sh. Cui, W. Wang, C. Lu. *Cent. Eur. J. Phys.*, **7**, 786 (2009).

[20] N.N. Anua, R. Ahmed, A. Shaari, M.A. Saeed, B.U. Haq, S. Goumri-Said. *Semicond. Sci. Technol.*, **28**, 105 015 (2013).

[21] M.I. Ziane, Z. Bensaad, B. Labdelli, H. Bennacer. *Sensors & Transducers*, **27**, 374 (2014).

[22] Y. Wang, H. Yin, R. Cao, F. Zahid, Y. Zhu, L. Liu, J. Wang, H. Guo. *Phys. Rev. B*, **87**, 235 203 (2013).

[23] B.D. Malone, M.L. Cohen. *J. Phys.: Condens. Matter*, **25**, 105 503 (2013).

[24] S. Zollner, Ch. Lin, E. Schönherr, A. Böhringer, M. Cardona. *J. Appl. Phys.*, **66**, 383 (1989).

[25] S. Zollner, M. Garriga, J. Humlíček, S. Gopalan, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **43**, 4349 (1991).

[26] S. Logothetidis, L. Viña, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **31**, 947 (1985).

[27] T.J. Kim, J.J. Yoon, S.Y. Hwang, Y.W. Jung, T.H. Chong, Y.D. Kim, H. Kim, Y.-Ch. Chang. *Appl. Phys. Lett.*, **97**, 171 912 (2010).

[28] *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*, ed. by W. Martienssen, H. Warlimont (Berlin, Springer, 2005).

[29] А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова. *Изв. вузов. Физика*, **57**, 122 (2014).

- [30] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz. *WIEN2K* (Techn. Univ. Wien, Austria, 2001) ISBN 3-9501030-1-2.
- [31] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3865 (1996).
- [32] P.E. Blöchl, O. Jepsen, O.K. Andersen. *Phys. Rev. B*, **49**, 16223 (1994).
- [33] R. Markowski, M. Podgorny. *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, 9041 (1991).

Редактор Л.В. Шаронова

Localization of interband transitions in volume of Brillouin zone of III–V group crystals

V.V. Sobolev, D.A. Perevoshchikov

Udmurt State University,
426034 Izhevsk, Russia

Abstract Localization in volume of Brillouin zone of transitions which form the main structures of dielectric function spectra to ~ 7 eV for the semiconductors of III–V group (AlSb, GaSb, InSb and InAs) is obtained using the theory of the electron density functional. It was established that the intensive transitions are not only in the neighbourhood of high symmetry axes of the Brillouin zone but also in several concrete large volumes of the Brillouin zone.