

ФТТ

А К А Д Е М И Я   Н А У К   С С С Р

# ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

ТОМ

18

*ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК*



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»  
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
ЛЕНИНГРАД 1976

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ УЗКОЗОННЫХ  
КУБИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛОВ

Д. И. Шека, В. И. Шека, А. Н. Король

В схеме взаимодействующих электронной и дырочной зон рассчитана электронная составляющая диэлектрической проницаемости  $\epsilon$  полупроводников типа InSb. Показано, что учет в гамильтониане дырок различных сортов, когда оператор кинетической энергии перестает быть дираковским, является определяющим в формировании величины  $\epsilon$  ( $q \rightarrow 0$ ). Получена формула, связывающая  $\epsilon$  ( $q \rightarrow 0$ ) с параметрами полупроводника: постоянной решетки, эффективной массой и энергетическими щелями. При малой ширине запрещенной зоны  $E_g$  диэлектрическая проницаемость  $\epsilon \sim \ln E_g^{-1}$ . Рассчитаны значения  $\epsilon$  ( $q \rightarrow 0$ ) для ряда узкозонных полупроводников.

1. Вычисление безынерционной части диэлектрической проницаемости полупроводников обычно основывается на приближении случайных фаз, совпадающем по результату с методом самосогласованного поля [1]

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{4\pi}{q^2} \sum_{\substack{n, n' \\ k, k'}} |\langle n, \mathbf{k} | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | n', \mathbf{k}' \rangle|^2 (N_{n, \mathbf{k}} - N_{n', \mathbf{k}'}) \quad (1)$$

В (1) приняты атомные единицы, а собственные функции нормированы на единичный объем. Для реализации вычислений по (1) требуется знание хода энергетических зон  $E_n(\mathbf{k})$ , соответствующих блоховских функций  $|n, \mathbf{k}\rangle$  и чисел заполнения  $N_{n, \mathbf{k}}$ . В последнее время был проделан ряд численных расчетов, использующих многозонные (до 10–15 зон) законы дисперсии и волновые функции, найденные методом псевдопотенциала [2–4]. В этих работах имеется определенная свобода в выборе параметров зонной структуры, что несколько ограничивает самостоятельность расчета диэлектрической проницаемости. Существуют также работы, в которых сделаны попытки получить пространственную и частотную дисперсии  $\epsilon$  на основании весьма упрощенной модели зонной структуры, не прибегая к сложному численному расчету [5–8]. В указанных работах для получения правдоподобных результатов необходимо использовать в качестве зонных параметров значения, отождествление которых с экспериментальными затруднительно. Например, в цитируемых работах ширине запрещенной зоны следует придавать смысл некоторой средней величины, сильно отличающейся от ее экспериментально наблюдаемого минимального значения (см., например, [7]).

Значительно более реалистичной является популярная схема Кейна [9], описывающая взаимодействие электронной и трех дырочных зон с учетом спин-орбитального расщепления; это приближение и используется в настоящей работе. Отметим, что такая модель в существенно упрощенной форме была применена к бесщелевым полупроводникам [10, 11].

2. Для записи гамильтониана в  $k\mathbf{r}$ -методе выберем базисные собственные функции в центре зоны Бриллюэна в виде

$$\varphi_{\alpha m_a} = Y_{j_a m_a} R_{\alpha} \quad (2)$$

Здесь  $Y$  и  $R$  — угловые и радиальные функции, индекс  $\alpha = -1, 0, 1$  нумерует, зоны соответственно электронную, легких и тяжелых дырок, спиново-отщепленную,  $j_\alpha = 3/2 - |\alpha|$ ,  $-j_\alpha \leq m_\alpha \leq j_\alpha$ . В дальнейшем будем пренебрегать релятивистски малыми поправками в членах  $\sim k$  и в соответствии с этим примем  $R_0 = R_1$ . В этом приближении, как известно, гамильтониан оказывается сферически симметричным, что позволяет представить его и его собственные функции в компактном виде.

Введем обозначения

$$E_{-1} = 0, E_0 = E_g, E_1 = E_g + \Delta, \quad (3)$$

$$k = \mp \frac{i}{\sqrt{2}} (k_x \pm ik_y), k_0 = ik_z, \quad (4)$$

где  $E_g$  и  $\Delta$  — ширина запрещенной зоны и величина спин-орбитального расщепления валентных зон при  $k = 0$ . В этих обозначениях элементы матричного гамильтониана, записанные с помощью коэффициентов Клебша—Гордана [12], равны

$$H_{m_\alpha m_\beta}^{j_\alpha j_\beta}(k) = p k_{\mu_\beta - m_\alpha} (j_\alpha 1 m_\alpha m_\beta - m_\alpha | j_\beta m_\beta \delta_{-1\alpha} (\delta_{0\beta} + \delta_{1\beta}) - (a_\alpha k^2 + E_\alpha) \delta_{\alpha\beta} \delta_{m_\alpha m_\beta}; \alpha \leq \beta). \quad (5)$$

Матричный элемент импульса  $p$  совпадает по определению с общепринятым [9], а слагаемые  $a_\alpha k^2$  учитывают по теории возмущений вклад от отброшенных верхних зон [9].

Решение секулярного уравнения с гамильтонианом (5) дает четыре двукратно-вырожденных (по спину) корни

$$\lambda_\pm = -E_g - a_0 k^2 \text{ (тяжелые дырки)}, \quad (6)$$

а остальные определяются из уравнения

$$p^2 k^2 [2\varepsilon_1(\lambda) + \varepsilon_0(\lambda)] = 3(\lambda + a_{-1} k^2) \varepsilon_0(\lambda) \varepsilon_1(\lambda), \quad (7)$$

где  $\varepsilon_\alpha = E_\alpha + a_\alpha k^2 + \lambda$ . Три корня  $\lambda$  этого уравнения с  $i = c, v, s$  описывают соответственно зоны электронную, легких дырок и спиново-отщепленную.

Собственные функции гамильтониана удобно выразить через четыре вектора с компонентами

$$c_{m_\alpha m_\beta}^\beta = H_{m_\alpha m_\beta}^{j_\alpha j_\beta}; \beta = 0, 1, m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}. \quad (8)$$

Два вектора с  $\beta = 0$  — четырехмерные, остальные — двухмерные. Собственные функции, соответствующие корням уравнения (7), равны

$$\psi_i^m(k) = \sqrt{C_i(k)} \left[ 1 + \sum_{\beta=0,1} \frac{(c_{m_\alpha m_\beta}^\beta)}{\varepsilon_\beta(\lambda_i)} \right], \quad i = c, v, s. \quad (9)$$

В (9) компоненты вектора  $\varphi_\beta$  определяются формулой (2),  $C_i(k)$  — константа нормировки, равная

$$C_i(k) = \left\{ 1 + \frac{p^2 k^2}{3} \left[ \frac{2}{\varepsilon_0^2(\lambda_i)} + \frac{1}{\varepsilon_1^2(\lambda_i)} \right] \right\}^{-1} \quad (10)$$

Две волновые функции зоны тяжелых дырок, как легко показать, могут быть представлены в виде

$$\psi_\pm^m = (h_m(k) \varphi_0), \quad (11)$$

причем четверка векторов  $h_m(k)$  и  $\frac{e_m(k)}{e_m^0(k)}$  образует полную систему ортонормированных векторов в четырехмерном пространстве. Рассмотрим беспримесный полупроводник в случае предельно низких температур. Тогда в силу полного заполнения дырочных зон, возможны виртуальные переходы только из валентных зон в зону проводимости.

С учетом (9) матричный элемент, содержащийся в формуле (1), для переходов  $v \rightarrow c$ ,  $s \rightarrow c$  равен

$$M_{ac} = \sum_{m, \mu} |\langle \psi_a^m(\mathbf{k}) | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \psi_c^\mu(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \rangle|^2 = C_a C_c \sum_{m, \mu} \left| 1 + \sum_{\beta=0,1} \frac{e_m^\beta(\mathbf{k}) e_\mu^\beta(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\varepsilon_\beta(\lambda_a) \varepsilon_\beta(\lambda_c)} \right|^2. \quad (12)$$

Здесь и далее  $\lambda_c$  и  $C_c$  вычисляются в точке  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ , а все остальные подобные величины в точке  $\mathbf{k}$ . Воспользовавшись формулами (8) и (5), а также явным видом коэффициентов Клебша—Гордана [12], после несложных вычислений получим

$$M_{ac} = 2C_a C_c \left\langle \left\{ 1 + \frac{p^2(k^2 + \mathbf{k}\mathbf{q})}{3} \left[ \frac{2}{\varepsilon_0(\lambda_a) \varepsilon_0(\lambda_c)} + \frac{1}{\varepsilon_1(\lambda_a) \varepsilon_1(\lambda_c)} \right] \right\}^2 + \frac{p^2(\mathbf{k} \times \mathbf{q})^2}{3} \left[ \frac{1}{\varepsilon_0(\lambda_a) \varepsilon_0(\lambda_c)} - \frac{1}{\varepsilon_1(\lambda_a) \varepsilon_1(\lambda_c)} \right]^2 \right\rangle. \quad (13)$$

Матричный элемент для перехода из зоны тяжелых дырок в зону проводимости с учетом (11) может быть представлен формулой

$$M_{hc} = \frac{C_c}{\varepsilon_0^2(\lambda_c)} \sum_{m, \mu} |h_m(\mathbf{k}) e_\mu^0(\mathbf{k} + \mathbf{q})|^2. \quad (14)$$

Воспользуемся условием нормировки коэффициентов разложения вектора  $e_\mu^0(\mathbf{q})$  по полной системе из векторов  $e_m^0(\mathbf{k})$  и  $h_m(\mathbf{k})$  ( $m = -1/2, 1/2$ ); тогда

$$\sum_m (h_m(\mathbf{k}) e_\mu^0(\mathbf{q}))^2 = e_\mu^2(\mathbf{q}) - \sum_m \frac{(e_m(\mathbf{k}) e_\mu(\mathbf{q}))^2}{e_m^2(\mathbf{k})}. \quad (15)$$

Учтем теперь линейную зависимость векторов  $e_\mu^0(\mathbf{k})$  от аргумента и используем их явный вид (8); при этом выражение (14) переходит в следующее

$$M_{hc} = \frac{C_c p^2}{\varepsilon_0^2(\lambda_c)} q^2 \sin^2 \theta, \quad \cos \theta = \frac{(\mathbf{k}\mathbf{p})}{kq}. \quad (16)$$

3. В выбранном приближении все величины, необходимые для вычисления  $\varepsilon(\mathbf{q})$  по (1), определены. Переходя от суммирования по  $\mathbf{k}$  к интегрированию, получим

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 + \frac{1}{\pi^2 q^2} \int \sum_{\alpha=h, s, c} \frac{M_{\alpha c}}{\lambda_c(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \lambda_\alpha(\mathbf{k})} d\mathbf{k}, \quad (17)$$

здесь область интегрирования охватывает все заполненные состояния первой зоны Бриллюэна.

В настоящей работе мы ограничимся случаем предельно длинных волн, когда  $q \rightarrow 0$ . В этом варианте диэлектрическая проницаемость равна

$$\begin{aligned} \varepsilon(q \rightarrow 0) = & 1 + \frac{8}{3\pi} \int_0^x C_c \left\langle \frac{p^2 k^2}{\varepsilon_0^2(\lambda_c) (\lambda_c - \lambda_h)} + \sum_{\alpha=s, c} \frac{C_\alpha}{\lambda_\alpha - \lambda_h} \times \right. \\ & \times \left\{ \left[ 1 + \frac{2}{3} k^2 p^2 C_c (\lambda_c + a_0 k^2 - a_1 k^2) \sum_{\beta=0,1} \frac{2 - \beta}{\varepsilon_\beta(\lambda_a) \varepsilon_\beta^2(\lambda_c)} \right]^2 + \right. \\ & \left. \left. + \frac{2}{9} p^4 k^4 \left[ \sum_{\beta=0,1} \frac{(-1)^\beta}{\varepsilon_\beta(\lambda_a) \varepsilon_\beta(\lambda_c)} \right]^2 \right\} \right\rangle dk. \quad (18) \end{aligned}$$

При выводе формулы (18) мы предполагали, что вклад от верхних зон для всех дырок одинаков ( $a_0 = a_1$ ). Верхний предел интегрирования  $x$ , как обычно, совпадает с радиусом сферы, равной по объему первой зоне Бриллюэна

$$x = \left( \frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \frac{2\pi}{a}. \quad (19)$$

Воспользовавшись уравнением (7), можно показать, что  $\epsilon_\infty(\lambda)$  зависит только от разности  $a = a_{-1} - a_0$  и, следовательно, в  $\epsilon(0)$  (как видно из (18)) параметры  $a_0$  и  $a_{-1}$  входят в этой же комбинации.

Значительно дальше в аналитических вычислениях можно продвинуться в предельных случаях нулевой и бесконечной величины спин-орбитальной щели  $\Delta$ . Как будет видно из дальнейшего,  $\epsilon(0)$  слабо зависит от  $\Delta$ , что повышает интерес к этим предельным случаям. Пользуясь формулами (7), (10), (18), получим выражение для диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_j(0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^x \left\{ \frac{1 - \delta_{j0} \eta^2 - c^2}{6 \eta^3} + \left( 2 + \frac{2}{3} \delta_{j0} \right) \frac{\eta - c}{\eta(\eta + c)} + \frac{\eta^2 - c^2}{3\eta^6} (E_g + ak^2)^2 \right\} dk, \quad (20)$$

где  $j=0, \infty$

$$\left. \begin{aligned} c &= E_g - ak^2, \\ \eta &= (c^2 + 4k^2)^{1/2}, \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

а  $p_j = p$  и  $\sqrt{\frac{2}{3}} p$  для  $j=0$  и  $\infty$  соответственно. Входящие в (20) слагаемые выражаются через эллиптические интегралы I и II рода. Как следует из (21), величина  $\eta$  при  $E_g \rightarrow 0$  пропорциональна  $k$ , что в конечном счете приводит к логарифмической зависимости  $\epsilon_j(0)$  от ширины запрещенной зоны  $E_g$ . Можно убедиться, что последнее слагаемое под знаком интеграла, определяющее вклад от спиново-отщепленной зоны, регулярно при  $E_g \rightarrow 0$ . Видимо, проще всего это сделать, мажорируя это слагаемое аналогичным с отброшенным  $k^4$  в знаменателе. Вычисление расходящихся интегралов требует определенной осторожности и при малых  $E_g$  приводит к формуле

$$(2p_j)^n \int_0^x \frac{k^{n-1}}{\eta^n} dk = \ln \frac{8p_j x}{E_g [1 + (1 + u^2)^{1/2}]} - 2 \sum_{k=1}^{\frac{n+1}{2}} \left[ \frac{1}{2k-1} + \left( \frac{1}{2k-1} - \frac{1}{2} \right) (1 + u^2)^{1/2-k} \right] + O\left(\frac{E_g}{p_j}\right), \quad (22)$$

$$u = \frac{ax}{2p_j}. \quad (23)$$

Отсюда следует, что начало разложения  $\epsilon_j(0)$  по  $E_g$  имеет вид

$$\epsilon_j(0) = 1 + \frac{13 + 3\delta_{j0}}{6\pi p_j} \ln \frac{4\pi x}{E_g} + \frac{1}{\pi p_j} \left\{ \frac{1}{9} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + u^2)^{3/2}} \right] + 4 \left( 1 + \frac{\delta_{j0}}{3} \right) \times \right. \\ \left. \times [u + (1 + u^2)^{1/2} - 2] + \frac{\delta_{j0}}{3} \left[ \frac{1}{2(1 + u^2)^{1/2}} - 1 \right] + \right. \\ \left. + \frac{13 + 3\delta_{j0}}{6} \ln \frac{2 \left( 1 - \frac{1}{3} \delta_{j0} \right)^{1/2}}{1 + (1 + u^2)^{1/2}} \right\} + O\left(\frac{E_g}{p_j}\right). \quad (24)$$

Несмотря на кажущееся сильное отличие  $\epsilon_j(0)$  при  $j=0$  и  $j=\infty$ , численно  $\epsilon_0(0)$  и  $\epsilon_\infty(0)$  весьма близки. Действительно, коэффициент при логарифме с  $E_g$  в этих крайних случаях изменяется всего лишь на 0.5%; остальная же часть  $\epsilon_j(0)$  в актуальной области отличается примерно на 15%. Отметим, что в полупроводниках с очень малой запрещенной зоной  $\Delta \gg E_g$ , и для них справедливой является формула (24) с  $j = \infty$ .

Итак, для  $E_g \rightarrow 0$  мы можем считать, что

$$\epsilon(0) \approx \frac{8}{3\pi p} \ln \frac{4\pi x}{E_g}. \quad (25)$$

Этот характер особенности отличен от описанной в литературе зависимости типа  $1/E_g^2$  [5, 7].

Как уже отмечалось, вклад в логарифмическое слагаемое спиновотщепленная зона не вносит. Отсюда следует, что в часто применяемой упрощенной модели двух взаимодействующих зон (электронов и легких дырок) с гамильтонианом типа дираковского,  $\epsilon(0)$ , как функция от  $E_g$ , регулярна при малых  $E_g$ .

При численных расчетах мы приняли во внимание, что в интерметаллических соединениях  $a_1 \gg a_0$ , а параметры  $p$  и  $a$  были подобраны так, чтобы сохранились экспериментально наблюдаемые значения эффективной массы электронов  $m_e$  и энергетической щели на границе зоны Бриллюэна  $E_x = \epsilon_0(\lambda_c(x))$ . Эти два условия приводят к соотношениям

$$\left. \begin{aligned} p^2 &= \left( \frac{1}{2m_e} - \frac{E_x - E_g}{x^2} \right) \left[ \frac{E_g + 2/3\Delta}{E_g(E_g + \Delta)} - \frac{E_x + 2/3\Delta}{E_x(E_x + \Delta)} \right]^{-1}, \\ a &= p^2 \frac{E_x + 2/3\Delta}{E_x(E_x + \Delta)} - \frac{E_x - E_g}{x^2}. \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

Экспериментальные значения параметров, входящих в (18) и (21) приведены, например, в [13, 14]. (К сожалению, измеренные энергетические щели  $E_x$  приведены в пересчитанном на случай  $\Delta = 0$  виде. Нам пришлось выполнить обратную работу).

Результаты численных расчетов по формуле (18) для ряда полупроводников со сходной зонной структурой (типа InSb) приведены в таблице. Заметим, что для этих полупроводников параметр разложения  $E_g/p_x$  в формулах (22) и (24) мал. В связи с этим расчет по (24) приводит к числам весьма близким к указанным в таблице.

Результаты численных расчетов  $\epsilon$  по формуле (18) для ряда полупроводников

	$m$	$E_g$	$\Delta$	$d$	$E_L$	$E_X$	$\epsilon_L$	$\epsilon_X$	$\epsilon$
InSb	0.0138	0.235	0.8	6.479	1.63	4.00	13.50	7.28	15.68
InAs	0.024	0.44	0.38	6.058	2.17	4.50	11.40	6.66	11.8
InP	0.073	1.42	0.1	5.869	3.07	4.80	9.04	5.32	9.61
GaSb	0.045	0.813	0.75	6.095	1.45	4.30	14.26	5.91	14.44
GaAs	0.066	1.52	0.34	5.653	2.39	4.60	10.36	5.69	11.1

Примечание. Все приведенные в таблице энергии измерены в электронвольтах,  $m$  — в массах свободного электрона,  $a$  — постоянная решетки  $d$  — в ангстремах.

Поскольку мы ограничились сферически симметричной моделью, то определенные трудности возникают при выборе параметра  $E_x$ . Мы ограничились двумя крайними значениями энергетической щели  $E_x$ : минимальным  $E_L$  (направление  $k$  вдоль (111)) и максимальным  $E_X$  ( $k$  — вдоль (100)). Обращаем внимание на близость вычисленных значений диэлектрической проницаемости к экспериментальным для всех кристаллов при  $E_x = E_L$ . Отметим также, что актуальной при малых  $E_g$  областью является окрестность центра зоны Бриллюэна и следовательно, анизотропия  $E$  не так существенна. Последнее обстоятельство повышает достоверность нашей модели для полупроводников с очень малой щелью  $E_g$ .

Как выяснилось в процессе расчета по формуле (18), учет в гамильтониане зоны тяжелых дырок (даже в отсутствие влияния верхних зон), когда оператор кинетической энергии перестает быть дираковским, является определяющим в формировании величины  $\epsilon(0)$ . В наших расчетах примени-

тельно к InSb вклад в  $\epsilon(0)$  от  $h$ ,  $l$  и  $s$  — дырочных зон оказался равным 9.14, 3.26, 0.095 соответственно. Зависимость от величины спин-орбитального расщепления зон оказалась слабой (например, для InSb  $\epsilon(0) = 15.4$  при  $\Delta = 0$  и  $E_c = E_L$ ).

#### Л и т е р а т у р а

- [1] H. Ehrenreich, M. H. Cohen. Phys. Rev., *115*, 786, 1959.
- [2] P. K. Vinsome, D. Richardson. J. Phys., *C4*, 2650, 1971.
- [3] H. Naga. J. Phys. Soc. Japan, *20*, 778, 1965.
- [4] J. P. Walter, M. L. Cohen. Phys. Rev., *B2*, 1821, 1970.
- [5] D. R. Penn. Phys. Rev., *128*, 2093, 1962.
- [6] G. Srinivasan. Phys. Rev., *178*, 1244, 1969.
- [7] V. K. Bashenov, M. G. Foigel, R. A. Alarashi. Phys. St. Sol., (*B*)*54*, 355, 1972.
- [8] A. Bardasis, D. Hone. Phys. Rev., *153*, 849, 1967.
- [9] E. O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., *1*, 249, 1957.
- [10] L. Liu, D. Brust. Phys. Rev., *173*, 777, 1968.
- [11] J. G. Broerman. Phys. Rev., *B5*, 397, 1972.
- [12] Г. Я. Любарский. Теория групп и ее применение в физике. Физматгиз, М., 1958.
- [13] О. Маделунг. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. «Мир», М., 1967.
- [14] И. М. Цидильковский. Электроны и дырки в полупроводниках. «Наука», М., 1972.
- [15] T. S. Moss. Optical Properties of Semiconductors. London, 1959.

Киевский государственный  
университет им. Т. Г. Шевченко,  
Институт полупроводников  
АН УССР

Поступило в Редакцию  
29 марта 1976 г.