

УСТОЙЧИВОСТЬ КРИСТАЛЛОВ И ЗОННАЯ СТРУКТУРА

А.Альтшулер, Ю.Х.Векилов, Г.Р.Умаров

Обсуждается локальный критерий структурной устойчивости. Для ряда кристаллов рассчитаны РТ-диаграммы. Рассмотрена возможность определения областей устойчивости (по параметрам псевдопотенциала) и предсказания изменения типа симметрии при переходе, кристаллов в структуре цинковой обманки.

Общепринятый подход к определению устойчивых кристаллических структур сводится к расчету и сравнению величин свободной энергии. Как правило, точность таких расчетов не позволяет выделить устойчивую структуру. Представляет интерес рассмотреть иной подход, основанный на локальном критерии. В работах [1, 2] по фазовому переходу полуметалл-диэлектрик, анализировалась фононная неустойчивость, возникающая при перекрытии запрещенной зоны по прямой или непрямоугольной щели. В настоящей работе границы устойчивости полупроводниковых кристаллов со структурой цинковой обманки определяются по моменту захлопывания не прямых щелей реальной зонной структуры. Проведены расчеты энергетического спектра электронов при непрерывном изменении параметров псевдопотенциала, температуры и давления. С помощью соотношений, связывающих величины энергий одноэлектронных состояний в точках высокой симметрии X , Γ , L зоны Дженса с факторами псевдопотенциала, были построены РТ-диаграммы Si , $InSb$, $CdTe$. Линия равновесия определялась по моменту перекрытия не прямых

щелей Γ -X и L - Γ . Зависимость формфакторов псевдопотенциала от температуры учтена фактором Дебая - Уоллера. Изменение периода решетки с давлением и температурой также изменяет величины формфакторов - это может быть выражено через изменение приведенного радиуса кора (ионного остова) и нормировочного множителя. Диаграммы приведены на рис. 1, 2, 3 - там же экспериментальные данные и результаты работы [3], в которой диаграммы для Si и InSb строились по минимуму свободной энергии. Наблюдаемое, существенно лучшее соответствие эксперименту результатов этих расчетов по сравнению с результатами обычного энергетического расчета, при сравнительной простоте методики, можно считать предварительным обоснованием применимости локального критерия устойчивости наряду с обычным - интегральным. Аналогичная методика была применена для анализа тенденций в зонной структуре по ряду соединений типа $A_N B_8 - N$ в структуре цинковой обманки. Тенденция в зонной структуре по параметрам псевдопотенциала такова, что по мере возрастания ионности - при переходе к соединениям со структурой каменной соли - происходит захлопывание не прямых щелей L - Γ .

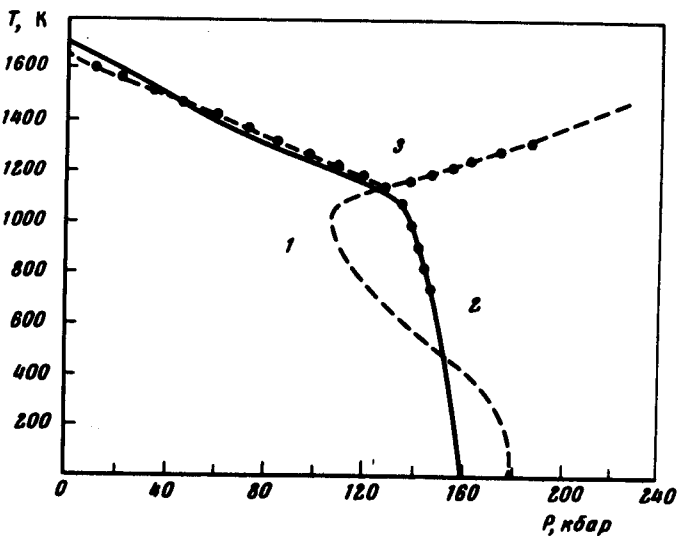


Рис. 1. Si; точками показаны данные эксперимента, приведенные в работе [3], пунктиром - теоретические расчеты работы [3], сплошной линией - расчеты данной работы

Описанная методика не предназначена для анализа механизма структурных переходов, однако из сопоставления типа перекрытия запрещенной зоны с характером перестройки структуры можно предсказать образование определенной структурной модификации. Так у $A_N B_8 - N$ от ковалентных до $A_2 B_6$ переход по давлению и температуре происходит с перекрытием щели Γ -X (соответствует изменению знака формфактора

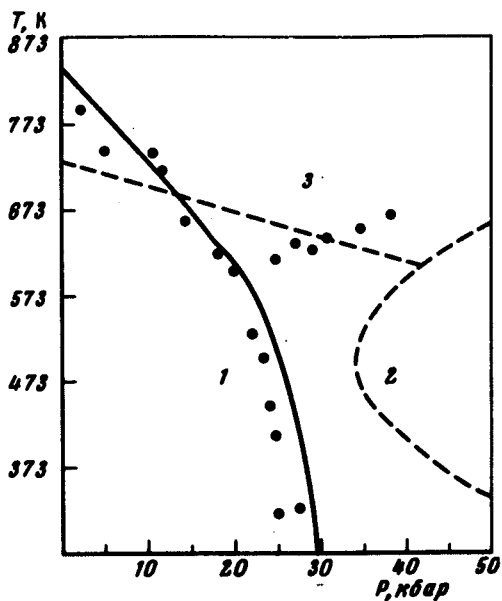


Рис. 2. InSb; точками показаны экспериментальные данные работы [4], пунктиром – расчеты работы [3], сплошная линия – расчеты данной работы

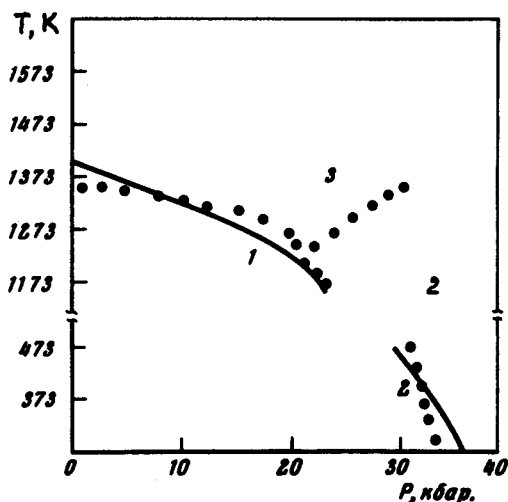


Рис. 3. CdTe; точками показан эксперимент [5], сплошная линия – расчеты данной работы, 1 – фаза низкого давления, 2 – фаза высокого давления, 3 – жидкая фаза

близкого к первому нулю $V(220)$ и завершается образованием структур типа серого олова, в то время как перекрытие щели $L-\Gamma$ (соответствует изменению знака первого структурного формфактора катиона $V(111)$) влечет переход в структуру хлористого натрия. Одновременное перекрытие не прямой щели и прямой щели (например, в точке P) может привести к изменению типа симметрии или незаконченному переходу типа тетраэдрических искажений (InV).

Институт стали и сплавов
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
2 декабря 1974 г.

Литература

- [1] Л.В.Келдыш, Ю.В.Копаев. ФТТ, 6, 2791, 1964:
[2] Ю.В.Копаев. ФТТ. 8, 229, 1966.

[3] J.A. Van Vechten. *Phys. Rev.*, B7, 1479, 1973.

[4] R.E. Hanneman, H.D. Banus. H.C. Gatos. *Phys. Chem. Sol.*, 25, 2931, 1964.

[5] A. Jayaraman. W. Klement, J.C. Kennedy. *J. Phys. Chem.*, 66, 9210, 1962.
