

УДК 537.531.535.3

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

В. В. НЕМОШКАЛЕНКО, В. Г. АЛЕШИН, М. Т. ПАНЧЕНКО,
В. Я. НАГОРНЫЙ

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ КРЕМНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 24 VII 1972)

Плотность электронных состояний $N(E)$ является важной характеристикой кристаллических твердых тел, определяющей многие физические свойства: оптические, магнитные, фотоэмиссионные, тепловые. Рентгено-спектральный метод позволяет выполнять исследование электронных состояний в широкой области энергий, поэтому особый интерес представляет рассмотрение рентгеновских эмиссионных спектров.

Известно ⁽¹⁾, что интенсивность рентгеновского излучения описывается формулой

$$I(E) = \nu^2 \int_{S(E)} \frac{|M(\mathbf{k})|^2}{|\nabla E(\mathbf{k})|} dS,$$

где ν — частота испускаемого фотона, а интегрирование производится по изоэнергетической поверхности $S(E)$. Как было показано в работах ^(2, 3), квадрат модуля матричного элемента вероятности перехода валентная зона — остовные состояния $|M(\mathbf{k})|^2$ для диэлектриков сильно зависит от квазиимпульса электрона и различен для переходов на остовные уровни разного типа симметрии. На примере рассмотрения кристаллов BN, SiC, BP (с малыми ширинами внутренних уровней) в ^(4, 5) было высказано утверждение, что в рентгеновских эмиссионных спектрах отображаются особенности Ван-Хове хода плотности состояний. Необходимо отметить, что вследствие разной ширины внутренних уровней и действия вероятности перехода, сглаживающей отдельные участки спектра, не все особенности хода $N(E)$ можно проследить по одной эмиссионной полосе.

Благодаря отображению особенностей Ван-Хове рентгеновские эмиссионные спектры можно использовать для получения количественных данных о структуре энергетических зон и, следовательно, плотности состояний. Известны попытки ^(6, 7) получить представление о плотности состояний, непосредственно комбинируя в разных отношениях интенсивности K - и $L_{II, III}$ -эмиссионных полос. В этом случае коэффициенты, определяющие вклад каждой полосы, остаются неизвестными и нет каких-либо обоснованных соображений, позволяющих провести подобный выбор.

Как нам кажется, эти попытки лишь подтверждают выдвинутые в ^(4, 5) соображения об отображении в рентгеновских эмиссионных спектрах особенностей $N(E)$.

Для иллюстрации возможности получения из эмиссионных рентгеновских спектров полезной информации о структуре энергетических зон и плотности состояний нами был исследован эмиссионный K_β -спектр монокристалла кремния и проведен расчет методом псевдопотенциала структуры энергетических зон и плотности состояний, исходя из экспериментальных данных.

Рентгеновская K_β -эмиссионная полоса кремния была получена на рентгеновском спектрографе ДРС-2М с фотографической регистрацией спектра и фокусировкой по методу Иоганна. Спектр был снят в первом порядке отражения при углах порядка 53° с использованием электронного метода

возбуждения. В качестве кристалла анализатора использовался кристалл кварца с отражающей плоскостью (10 $\bar{1}$ 0). Разрешение прибора составляло 0,05 эв. Экспериментальный результат, представленный на рис. 1а, хорошо согласуется с данными Лойгера (⁸), но на рис. 1а наплыв В более четко выражен, чем в (⁸).

Данные по энергетическому положению наплывов B, C, D, E, F , так же как и точек A и G , определяющих длинно- и коротковолновую границу спектра, представленного на рис. 1а, были использованы при проведении

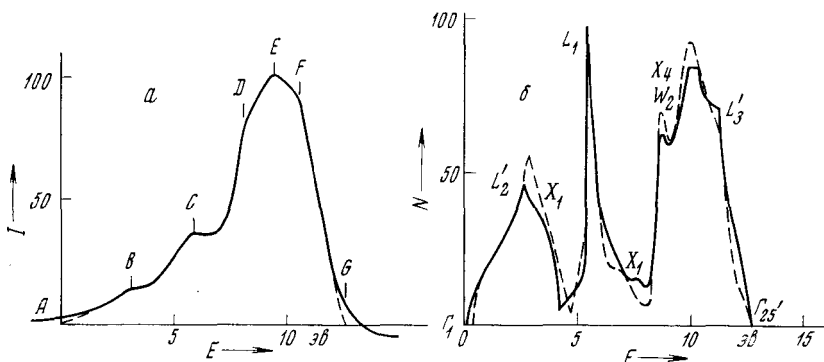


Рис. 1. *a* — K_{β} -спектр эмиссии монокристалла кремния; *b* — плотность состояний валентной зоны кремния, рассчитанная в данной работе (1), в работе (12) (2)

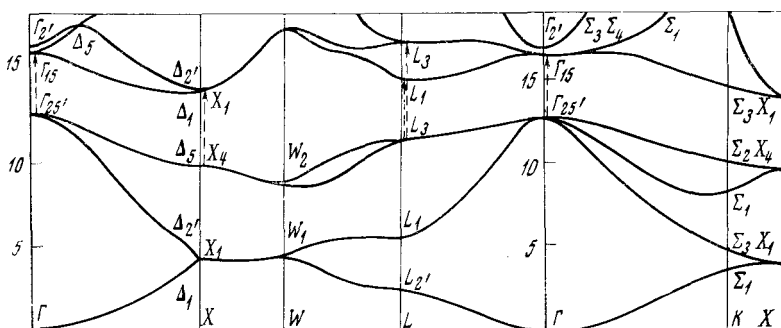


Рис. 2. Энергетические зоны в кремнии (пунктиром со стрелками обозначены оптические переходы, энергии которых использовались в расчете)

расчета структуры энергетических зон и плотности состояний. Положение точек A и G определялось прямолинейным отсеканием длинно- и коротковолнового хвостов.

$L_{II, III}$ -Спектры, как можно видеть из (7), не приводят к появлению дополнительной информации о структуре зон.

Найденные в K_p -спектре кремния особенности были интерпретированы с точки зрения зонной структуры. Дополнительно использованы сведения о энергиях нескольких оптических переходов ⁽⁹⁾:

$$E(\Gamma_{15c} - \Gamma_{25'v}) = 3, 4; \quad E(L_{1c} - L_{3'v}) = 3, 2; \quad E(X_{1c} - X_{4v}) = 4, 1;$$

$$E(L_{3c} - L_{3'v}) = 5, 3 \text{ э.в.}$$

Псевдопотенциальный метод был использован в параметрическом виде ⁽⁹⁾ с тремя форм-факторами эмпирического псевдопотенциала. В базис входило 100 плоских волн. Методом Лёвдина ⁽¹⁰⁾ матрицы порядка 100 сводились к матрицам порядка 23*. Ошибка, связанная с использованием

* Вычисления были проведены на машине БЭСМ-6 Вычислительного центра Института кибернетики АН УССР.

теории возмущения Лёвдина, составляет 0,1 эв. Найденные значения форм-факторов равны $V^{s1}(3) = -0,233$, $V^{s1}(8) = 0,045$, $V^{s1}(11) = 0,080$ ридберг.

В табл. 1 приведены значения энергий, взятые из рентгеновского и оптического экспериментов и использованные для нахождения псевдопотенциальных форм-факторов, значения энергии, найденные после подгонки форм-факторов, и результаты Стукеля ⁽¹¹⁾, полученные самосогласованным методом ортогональных плоских волн (о.п.в.). Из табл. 1 видно, что

Таблица 1

Сравнение теоретических и экспериментальных значений зонных состояний

Состояние	Эксперимент	Расчет	Данные ⁽¹¹⁾	Состояние	Эксперимент	Расчет	Данные ⁽¹¹⁾
Валентная зона				Зона проводимости			
A Γ_{1v}	0	0	0	X_{1c}	13,7	14,0	13,0
B $L_{2'v}$	3,2	2,3	2,2	L_{1c}	13,8	14,7	13,3
C L_{1v}	5,8	5,3	5,0	Γ_{15c}	16,0	16,3	14,5
D W_{2v}	8,5	8,6	8,2	L_{2c}	15,9	17,0	15,6
E X_{4v}	9,6	9,7	9,0				
F $L_{3'v}$	10,6	11,1	10,6				
G $\Gamma_{25'v}$	12,6	12,6	11,7				

наибольшее расхождение имеет место для валентной зоны для состояния $L_{2'}$.

Полученные энергетические зоны для основных направлений симметрии представлены на рис. 2. Для нахождения плотности состояний был выполнен расчет в 1638 точках в $1/48$ части зоны Бриллюэна, что приводит к 61776 точкам во всей зоне. Вычисленная плотность состояний представлена на рис. 16. Шаг гистограммы 0,25 эв. Значение плотности на каждом участке 0,25 эв откладывалось на правом конце отрезка. Этим объясняется небольшое смещение положения особых точек на кривой $N(E)$ по отношению к зонной схеме.

В ⁽¹²⁾ Кэйн вычислил методом псевдопотенциала плотность состояний кремния. Он исходил из псевдопотенциальных форм-факторов по Анималу — Хейне ⁽¹³⁾, которые исправлялись таким образом, чтобы получить экспериментальные значения электронных эффективных масс и экспериментальное значение 1,1 эв для ширины запрещенной зоны. Результат Кэйн так же представлен на рис. 16.

Следует отметить, что привлечение рентгеновских данных как раз и позволяет уточнить зонную структуру по всей ширине валентной зоны и особенно для глубоко лежащих состояний, тогда как оптические спектры зондируют верх валентной зоны и зону проводимости.

Институт металлофизики
Академии наук СССР
Киев

Поступило
20 VII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Г. Бете, А. Зоммерфельд, Электронная теория металлов, ИЛ, 1938, стр. 130.
- ² В. Г. Алешин, В. П. Смирнов, ФТТ, 11, 2010 (1969).
- ³ J. Klima, J. Phys., Ser. C, 3, 70 (1970).
- ⁴ В. Г. Алешин, В. П. Смирнов, В сборн. Рентгеновские спектры и электронная структура вещества, Киев, 1969, стр. 314.
- ⁵ В. В. Немошкаленко, В. Г. Алешин, ФТТ, 12, 59 (1970).
- ⁶ Гусатинский, В сборн. Рентгеновские спектры и электронная структура вещества, Киев, 1969, стр. 328.
- ⁷ G. Wiech, E. Zörf, J. Phys., 32, Suppl., № 10 (1971).
- ⁸ K. Länger, Thesis, University München, 1968.
- ⁹ M. L. Cohen, T. K. Bergstresser, Phys. Rev., 141, 789 (1966).
- ¹⁰ P. O. Löwdin, J. Chem. Phys., 19, 1396 (1951).
- ¹¹ D. J. Stukel, R. N. Euwema, Phys. Rev. B, 1, 1635 (1970).
- ¹² E. O. Kane, Phys. Rev., 146, 558 (1966).
- ¹³ У. Харрисон, Псевдопотенциалы в теории металлов, М., 1968.