

УДК 621.315.592

Н.И.Подольская (4 курс, каф. КИ), С.Ю.Карпов, к.ф.-м.н.

ЭФФЕКТЫ ПРОТЕКАНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ ТРОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ A^3B^5

Знание микроскопической структуры многокомпонентных твердых растворов типа $A_x^3B_{1-x}^3C^5$ принципиально важно для анализа из первых принципов электронных, оптических и вибрационных свойств этих кристаллов. Кроме того, структура твердых растворов во многом определяет их термодинамические свойства, необходимые, в частности, для построения фазовых диаграмм соединений.

В результате многих экспериментальных и теоретических исследований (см., например, [1-3]) к настоящему времени сложилось следующее представление о структуре тройных соединений A^3B^5 . Длины связей между ближайшими соседями (анионами и катионами) не могут быть описаны в приближении виртуального кристалла, предполагающего пропорциональное изменение размеров всех элементов кристалла в соответствии с законом Vegarda. В то же время, расстояния между вторыми ближайшими соседями в подрешетке, в которой происходит смешение атомов (в анионной подрешетке соединений $A_x^3B_{1-x}^3C^5$), укладываются в концепцию виртуального кристалла, а атомы в катионной подрешетке релаксируют, обеспечивая минимальную энергию упругой дисторсии кристаллической решетки. Последний вывод не является непосредственно следующим из эксперимента и скорее основан на модельных предположениях.

В данной работе с помощью прямого моделирования методом поля валентных сил [4] мы покажем, что микроскопическая структура соединений типа $A_x^3B_{1-x}^3C^5$ далека от предсказываемой на основе концепции виртуального кристалла также и для случая вторых ближайших соседей. Более того, мы продемонстрируем существенность дальнедействующих кооперативных эффектов (эффектов протекания) для предсказания структуры этих соединений.

Мы рассматриваем кристалл кубической формы $In_xGa_{1-x}As$ с размерами граней $14 \times 14 \times 14$ атомов. Для повышения точности расчетов используется статистическая обработка нескольких (20) численных экспериментов, различающихся первоначальным случайным разбрасыванием атомов Ga и In по катионной подрешетке. Кроме того, вводятся периодические граничные условия так, чтобы граничные атомы оказывались связаны с атомами противоположных граней. Первоначально атомы размещаются в узлах нерелаксированной решетки с постоянной d_{InGaAs} , подчиняющейся закону Vegarda: $d_{InGaAs} = x \cdot d_{In-As} + (1-x) \cdot d_{Ga-As}$. Далее, все атомы циклически перемещаются в направлении действующих на них сил, вызванных различием длин связей между анионами и катионами данного твердого раствора, а также отклонением углов между связями от идеальных тетраэдрических. Перемещение происходит до тех пор, пока силы эти не станут достаточно малыми одновременно с достижением упругой энергией дисторсии постоянного значения. После каждого обхода атомов полный размер "кристалла" подстраивается под изменившиеся условия: ребра рассматриваемого куба сдвигаются так, чтобы средняя длина связей, проходящих через грани, совпадала со средней длиной внутренних связей. Упругость связей при их растяжении и изгибе описывается на основе модели поля валентных сил (VFF), требующего лишь знания упругих свойств бинарных кристаллов, содержащих эти анионы и катионы.

После достижения “кристаллом” состояния равновесия мы осуществляли статистическую обработку длин связей первых и вторых ближайших соседей. В докладе обсуждается сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными данными.

В результате обработки данных численных экспериментов было обнаружено, сильное проявление эффектов протекания в микроскопической структуре InGaAs. Наиболее явственно эти эффекты видны в распределении длин вторых ближайших соседей в катионной подрешетке (см. рис.1). Как видно, в распределении наблюдаются три пика, но только один из них существует во всем диапазоне изменения концентрации твердого

раствора. Пики 1 и 3 исчезают при приближении к порогам протекания $x = 0,39$ и $0,61$ для кристаллической решетки цинковой обманки. В области $0 < x < 0,39$ кластер InAs конечных размеров оказывается встроенным в матрицу бесконечного GaAs кластера, часть которого не деформирована, что видно из наличия пика 1, соответствующего постоянной решетки чистого GaAs. В области $x > 0,61$ ситуация инвертируется, и конечные кластеры GaAs оказывается встроенным в матрицу бесконечного InAs кластера (пик 3), что приводит к образованию областей с недеформированными связями InAs. Формирование двух взаимопроникающих кластеров InAs и GaAs приводит к исчезновению релаксированных областей, и при $0,39 < x < 0,61$ среднее расстояние между катионами зависит от состава примерно линейно. Полученные результаты показывают, что упругие взаимодействия в решетке $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ носит дальнедействующий характер с явно выраженными кооперативными явлениями.

На основании проведенного исследования мы можем ожидать, что, поведение электронных, оптических и других свойств кристалла также может быть немонотонным в различных областях изменения концентрации. Это предположение было проверено при вычислении энтальпии смешения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ H_m , проведенное в рамках приближения регулярных растворов. В этом случае $H_m = W \cdot x \cdot (1-x)$, где x - состав соединения $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, W – так называемый параметр взаимодействия. Полученная зависимость $W(x)$ носит сильно нелинейный и немонотонный характер, особенно проявляющийся в области исчезновения бесконечного InAs кластера.

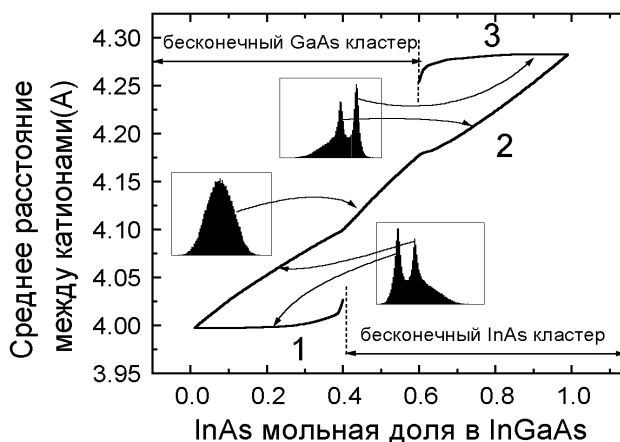


Рис.1. Распределение длин связей между ближайшими соседями в катионной подрешетке в зависимости от состава InGaAs

ЛИТЕРАТУРА:

1. J.C.MIKKELSEN, JR. AND J.B.BOYCE, PHYS.REV.B 28 (1983) 7130.
2. J.C.Martins and A.Zunger, Phys.Rev.B 30 (1984) 6217.
3. T.Fukui, J.Appl.Phys.,Pt.II,23 (1985) 5188.
4. R.M.Martin, Ohys.Rev.B 1 (1970) 4005.