

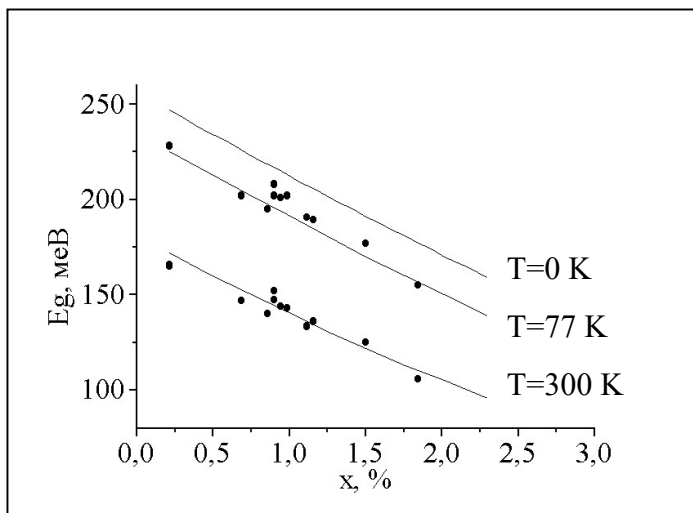
ЗОННА СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОННА ГУСТИНА ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$.

Я.І. Виклюк

Наукові керівники — професор С.В. Мельничук, доцент В.Г. Дейбук

Вузькощілинні тверді розчини заміщення на основі сполук $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ є перспективними матеріалами для твердотільної електроніки: створення інфрачервоних детекторів, низькошумних фільтрів систем зв'язку та лазерів з плавною перебудовою довжини хвилі. Традиційні сплави на основі сполук $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ не дають можливості розширити хвильовий діапазон більш за 7,5 мкм. Створення фотоелектронних приладів далекої ІЧ області вимагає синтезу нових сплавів, або створення напружених гетероструктур. Одним з таких сплавів є $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ з кристалічною структурою сфалериту, властивості якого досліджуються в даній роботі.

Користуючись методом локального емпіричного псевдопотенціалу з врахуванням спіно-орбітальної взаємодії, розраховано електронний енергетичний спектр $\text{InSb}_{1-x}\text{Bi}_x$ в наближенні віртуального кристала. Для бінарних сполук InSb та InBi характерні відстані між енергетичними зонами в високосиметричних точках зони Брілюена задовільно співпадають з відомими експериментальними результатами. На малюнку показані експериментальні



результати залежності ширини забороненої зони сплаву від концентрації при різних значеннях температури [1]. Неперервні криві є результатом наших теоретичних розрахунків. Температурна залежність була розрахована з використанням методики Брукса-Ю. Знання псевдопотенціальних хвильових функцій дозволило

розрахувати просторовий розподіл електронної густини заряду в кристалі, що дає можливість провести подальші дослідження природи хімічного зв'язку в даному твердому розчині заміщення.

1. А.М. Jean-Louis, В. Ayrault, J. Vargas, Phys. Stat. Sol., v34, 241 (1969)