

Б. А. Волков, О. А. Панкратов. Электронное строение квазикубических кристаллов: зоны, диэлектрические свойства, дефекты в узкощелевых полупроводниках. Совершенно различные, на первый взгляд, кристаллические вещества — полуметаллы V группы, полупроводники-халькогены VI группы, полупроводниковые соединения элементов IV и VI групп, ряд сложных тройных и четверных соединений — аналогичны по происхождению их электронных и кристаллических структур¹⁻³. Пространственные решетки этих веществ — квазикубических кристаллов — близки к простой кубической, отличаясь от нее либо небольшим структурным искажением, либо слабой неэквивалентностью атомов компонентов. Ближайшие к ферми-границе заполнения зоны формируются, в основном, из атомных состояний р-симметрии. Поэтому электронные спектры квазикубических кристаллов могут быть получены из универсального спектра прафазы — гипотетического металла с простой кубической решеткой и тремя перекрывающимися р-зонами. Заполнение этих зон определяется средним числом валентных р-электронов на атом в конкретном рассматриваемом веществе. Возмущения, характеризующие отличие кристаллической решетки от простой кубической, трансформируют затравочный спектр в реальный.

Хотя прафаза является металлом, все квазикубические кристаллы — диэлектрики (либо полуметаллы). Это означает, что искажение простой кубической структуры всегда таково, что исходная поверхность Ферми закрывается диэлектрической щелью. Единственное исключение — металлический полоний — подтверждает это правило, поскольку полоний устойчив в простой кубической модификации.

Представление о прафазе впервые было использовано Абрикосовым и Фальковским⁴ в 1962 г. при построении теории электронных спектров полуметаллов группы висмута. Но тогда не был известен спектр самой пра-

ный L^{+} - и нечетный L^{-} -термы (рис. 2). Последующее расщепление (см. рис. 2) обусловлено перемешиванием зон кристаллическим полем и спин-орбитальным взаимодействием. Детальная теория, развитая в ², позволила описать дисперсию шести близких зон всего лишь пятью параметрами, тогда как стандартный симметричный подход, основанный на k_p -методе, приводит в этом случае к 18 независимым параметрам ⁷.

Сформулированная модель не только позволяет описать вид спектра вблизи симметричных точек в бинарных соединениях $Al^{IV}V^{VI}$ и сплавах на их основе ⁸ и вычислить g -факторы ⁹, но дает качественно правильную картину зон в широком интервале энергий (формула (1)). Поэтому стало возможным аналитически исследовать глубокие локализованные состояния, обусловленные примесями и дефектами ¹⁰, понять явление долговременной релаксации ¹¹, диэлектрические свойства ¹²⁻¹⁴, структурные фазовые переходы.

Таким образом, построена единая теория, дающая практически полное описание физических свойств широкой группы реальных веществ — квазикубических кристаллов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Волков Б. А., Панкратов О. А. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 1362.
2. Волков Б. А., Панкратов О. А., Сазонов А. В. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 1395.
3. Волков Б. А., Панкратов О. А., Пахомов С. В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. С. 2293.
4. Абрикосов А. А., Фальковский Л. А. // ЖЭТФ. 1962. Т. 43, С. 1089.
5. Гордюнин С. А., Горьков Л. П. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63, С. 1922.
6. Абрикосов А. А. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 2063.
7. Dimmock J. O., Wright G. B. // Phys. Rev. Ser. A. 1964. V. 135, P. 821.
8. Волков Б. А., Панкратов О. А., Сазонов А. В. // ФТТ. 1984. Т. 26. С. 430.
9. Панкратов О. А., Сазонов А. В. // ФТТ. 1984, Т. 26, С. 2254.
10. Волков Б. А., Панкратов О. А. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 280.
11. Волков Б. А., Панкратов О. А. // ДАН СССР. 1980. Т. 255. С. 93.
12. Волков Б. А., Кушнир В. П., Панкратов О. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. С. 415.
13. Волков Б. А., Кушнир В. П. // Ibidem С. 3293.
14. Волков Б. А., Кушнир В. П. // ФТТ. 1983. Т. 25. С. 1803.