

Л. А. Фальковский. Происхождение электронных спектров полуметаллов V группы. Хорошо известно, что пространственная решетка полуметаллов группы V может быть получена из простой кубической путем малого смещения атомов. Этот факт уже был использован¹ для расчета спектра носителей висмута, в котором носители занимают малые окрестности симметричных точек зоны Бриллюэна.

Теперь предлагается рассматривать полупроводники типа $A^{IV}B^{VI}$ ² и полуметаллы группы V³ в рамках единой теории, позволяющей определять электронную структуру во всей зоне Бриллюэна и рассчитывать другие разнообразные свойства. Схема метода может быть изложена следующим образом. Из пяти валентных электронов металла группы V два находятся в глубоких s-, а три — в более высоких p-состояниях. Перекрывание волновых функций ближайших соседей превращает эти p-состояния в зоны типа

$$\xi = \xi_0 \cos k_x a + \xi_1 (\cos k_y a + \cos k_z a), \quad (1)$$

где $\xi_0 \approx 3,5$ эВ, $\xi_1 \approx -1,1$ эВ, a — период простого куба. Две другие зоны получаются отсюда циклической перестановкой индексов $x \rightarrow y \rightarrow z$. Важно, что гибридизация этих трех зон происходит лишь в результате перекрывания волновых функций более далеких соседей и описывается величинами порядка $\eta \approx 0,2$ эВ в энергетическом масштабе. Таким образом, p-зоны оказываются квазиодномерными. Если принять во внимание, что три валентных p-электрона могут занять эти зоны лишь наполовину, то рассматриваемое состояние

окажется неустойчивым по отношению к такому малому сдвигу атомов, при котором зона Бриллюэна уменьшится вдвое и будет полностью заполненной. Произойдет так называемый пайерлсовский переход с удвоением периода. В полуметаллах это реально случается в результате малого сдвига u чередующихся атомных слоев в направлении, перпендикулярном оси третьего порядка C_3 . В полупроводниках $A^{IV}B^{VI}$ роль сдвига выполняет химическое различие атомов металла и халькогена, стабилизирующее кубическую решетку. Фактором, препятствующим пайерлсовскому переходу, наряду с гибридизацией η является спин-орбитальное взаимодействие Δ . Наиболее велико оно у тяжелых атомов. Так, у висмута интенсивность этого взаимодействия характеризуется согласно атомным расчетам величиной $\Delta/3 = 0,53$ эВ, а у его соседа по периодической системе полония — единственного в природе металла с простой кубической решеткой $\Delta/3 = 0,7$ эВ. Не удивительно, что сдвиг u , как оказалось, составляет в полуметаллах величину $u \lesssim 0,5$ эВ в энергетических единицах.

Наряду со сдвигом надо учесть и ромбоэдрическую деформацию, которая сопровождает пайерлсовский переход. Вычисляя электронный вклад в полную энергию и минимизируя его, можно найти, что величина тензора деформации ϵ_{ij} связана с вектором сдвига: $\epsilon_{ij} \sim u_i u_j / \ln(\xi_0/u)$. Эта оценка согласуется с кристаллографическими данными и в энергетических единицах дает $\epsilon_{xy} \xi_0 \approx 0,15$ эВ.

Для определения точных значений параметров спектра, оцененных выше, сравнивались измеренные и вычисленные характеристики носителей, такие, как циклотронные массы, экстремальные сечения ферми-поверхности и фактор спинового расщепления γ (отношение спинового расщепления уровней в магнитном поле к циклотронному).

В случае висмута известно, что дырки и электроны занимают малые окрестности точек T и L в зоне Бриллюэна. Поэтому для дырок здесь было использовано квадратичное разложение вблизи экстремума в общих теоретических формулах, а для электронов учтена близко расположенная валентная зона. Определив таким образом параметры, входящие в теорию, мы построили ⁴ электронные дисперсионные кривые для ряда симметричных направлений (рис. 1). О согласии вычисленных и измеренных характеристик носителей можно судить с помощью таблиц. Кроме того, согласуются с данными

Характеристики носителей в висмуте

Носители		Эксперимент	Теоретические работы		
			4	5	6
Дырки	m_z	$0,0639 \pm 0,0003$	0,0655	0,17	0,10
	$m_{1,2}$	$0,212 \pm 0,0005$	0,225	0,65	0,38
	S_z	$6,76 \pm 0,01$	6,42	18,4	7,66
	$S_{1,2}$	$22,49 \pm 0,02$	22,05	65,2	28,9
	γ	1,87 или 2,13	1,74	1,9	—
Электроны	ϵ_F	11,5	10,7	11,6	8
	m_x	$0,119 \pm 0,0005$	0,115	0,11	0,161
	m_y	$0,088 \pm 0,002$	0,100	0,091	0,148
	m_z	$0,0082 \pm 0,00005$	0,0087	0,018	0,015
	S_x	$19,23 \pm 0,05$	16,76	17,29	18,0
	S_y	$14,48 \pm 0,04$	14,79	14,6	14,4
	S_z	$1,300 \pm 0,003$	1,33	2,88	1,27
	θ	96,38	96,74	100	98,2
	ϵ_g	11,2	11,4	5,4	16

Значения циклотронных масс m приведены в единицах m_0 ; единицы измерения сечений $S - 10^{-42}$ г² см²/с², энергий Ферми ϵ_F , отсчитанной от экстремума, и запрещенной щели ϵ_g — мэВ; угла θ между осью C_3 и нормалью к минимальному сечению — град.

вытянутости ферми-поверхности и осью C_3 составляет $53,0^\circ$ для дырок и $87,7^\circ$ для электронов. Вычисляя с помощью (4) угол между кривой c и осью C_3 , находим, что он равен $\theta_H = \arccos(1/\sqrt{3}) = 54,7^\circ$ в точке H ($k_z = 0$) и $\theta_L = 54,7^\circ - \arctg[\sqrt{2}\xi_1/(\xi_0 + \xi_1)] = 86,6^\circ$ в точке L ($k_z = -\pi/2a$). Таким образом, наше внимание оказывается привлеченным к кривой c . Учитывая,

