

УДК 621.315.592

© 1990

СТРОЕНИЕ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ СОЕДИНЕНИЙ $A^{IV}B^{VI}$

О. Е. Квятковский

Для кубической фазы соединений $A^{IV}B^{VI}$ рассматриваются изменение топологии дырочной поверхности Ферми с ростом концентрации дырок и дырочный спектр во второй и третьей подзонах валентной зоны, связанных с Σ - и Δ -экстремумами. Найдено, что наличие тяжелой поперечной массы в Δ -экстремуме с учетом взаимного положения критических точек Δ , Σ и L в зоне Бриллюэна приводит к появлению двух групп седловых точек в направлениях $\Delta\Sigma$ и ΔL аналогично седловым точкам в направлениях ΣL , связанным с Σ -экстремумом. Предложены модели дырочного спектра в Σ - и Δ -подзонах, учитывающие сильную анизотропию и непараболичность спектров и описывающие области энергий, включающие как экстремумы, так и седловые точки. Получены выражения для соответствующих вкладов в плотность состояний в области энергий, включающей как экстремумы, так и седловые точки. Обсуждаются экспериментальные данные для теллуридов свинца, олова и германия с точки зрения наличия критических точек спектра в области достижимых концентраций дырок. Высказано предположение о возможности наблюдения седловой точки ΣL и Δ -экстремума в теллуриде олова.

1. Пять соединений из группы $A^{IV}B^{VI}$ (PbS , $PbSe$, $PbTe$, $SnTe$ и $GeTe$), кристаллизующихся в структуре $NaCl$, имеет близкие физико-химические свойства [1]. Особенностью этих соединений является наличие механизмов легирования, с помощью которых можно в широких пределах изменять концентрацию зонных носителей тока, не вымораживающихся при $T=0$ [1, 2]. Наблюдаемые в соединениях $A^{IV}B^{VI}$ p -типа аномальные концентрационные и температурные зависимости кинетических коэффициентов [1, 3, 4] указывают на сложную структуру валентной зоны в этих соединениях. Во многих работах [1, 3, 4] объяснение наблюдаемых зависимостей основано на предположении о наличии второго экстремума валентной зоны (второго минимума в спектре дырок) и использовании параболического закона дисперсии для дырок во второй валентной подзоне. В действительности ситуация является более сложной.

Расчеты зонной структуры кубической фазы соединений $A^{IV}B^{VI}$ показывают [5-8], что в валентной зоне имеются две группы критических точек спектра, близких по энергии к краю валентной зоны и расположенных в точках Σ и Δ соответственно на осях 2-го и 4-го порядка зоны Бриллюэна, для которых характерно наличие больших эффективных масс дырок ($|m| > m_0$) в определенных направлениях. В зависимости от знака тяжелых масс эти критические точки могут быть либо точками экстремума (соответственно 2-ой и 3-й экстремумы валентной зоны), либо седловыми точками [5, 6].

Из расчетов зонной структуры [5-8] и топологических соображений следует, что если в точках Σ находятся экстремумы валентной зоны, то возникает еще группа седловых точек в направлениях ΣL [4, 9]. Аналогичные соображения приводят к выводу, что если в точках Δ находятся экстремумы валентной зоны, то возникают еще две группы седловых точек в направлениях $\Delta\Sigma$ и ΔL .

Таким образом, теория предсказывает сложное строение валентной зоны в кубической фазе соединений $A^{IV}B^{VI}$, однако остается неопределен-

ность в числе критических точек, которые в принципе могут наблюдаться, в их типе и положении относительно края зоны.

Тем не менее ясно, что модель с двумя экстремумами валентной зоны с параболическим законом дисперсии во второй подзоне может оказаться полностью непригодной для описания экспериментальных результатов во всей области концентраций дырок. Возможен целый ряд ситуаций — от сильной непараболичности дырочного спектра (более сильной, чем при кейновском законе дисперсии), связанной с близостью седловой точки Σ , до наличия всех перечисленных выше пяти групп критических точек с соответствующими изменениями топологии поверхности Ферми (при достижении седловых точек ΣL поверхность Ферми становится открытой). При этом возникают естественные ограничения на применимость параболического закона дисперсии во второй и третьей валентных подзонах, связанные с наличием тяжелых масс в Σ - и Δ -экстремумах, и на применимость модели двух или трех валентных подзон из-за наличия седловых точек ΣL , $\Delta \Sigma$ и ΔL .

В данной работе предложены модели дырочного спектра в окрестности Σ - и Δ -экстремумов в кубической фазе соединений $A^{IV}B^{VI}$, позволяющие выйти за рамки этих ограничений. В соответствующие законы дисперсии включены непараболические слагаемые, учитывающие сильную анизотропию спектров и позволяющие получить единое описание области энергий, включающей экстремум и связанные с ним седловые точки. Получены выражения для соответствующих вкладов в плотность состояний дырок $\delta_{\nu\Sigma}(\epsilon)$ и $\delta_{\nu\Delta}(\epsilon)$ в области энергий, включающей экстремум и связанные с ним седловые точки.

Во второй части работы кратко обсуждаются результаты измерений низкотемпературной теплоемкости в соединениях $A^{IV}B^{VI}$, которые дают непосредственную информацию о поведении плотности состояний как функции концентрации дырок и критических точках спектра при $T=0$. Обсуждается также влияние структуры низкотемпературной фазы в SnTe и GeTe на дырочный спектр.

2. Используя развитый в работах [10, 11] для соединений $A^{IV}B^{VI}$ вариант метода ЛКАО, можно показать, что наличие больших эффективных масс в Σ - и Δ -экстремумах не случайно, а является следствием генезиса электронного спектра этих соединений. Для Σ -экстремума это было показано в [12]; аналогичный результат оказывается справедливым и для Δ -экстремума. Для определенности будем рассматривать точку Σ на луче $[1, 1, 0]$ и точку Δ на луче $[1, 0, 0]$. Главные оси (оси 1, 2, 3) в точке Σ направим соответственно вдоль $[1, 1, 0]$, $[-1, 1, 0]$ и $[0, 0, 1]$, а в точке Δ — вдоль $[1, 0, 0]$, $[0, 1, 0]$ и $[0, 0, 1]$. Используя метод работы [12], можно получить явные выражения для коэффициентов $a_i = \hbar^2/m_i$ (где m_i^{-1} — главные значения тензора обратных эффективных масс) через интегралы взаимодействия в первых двух координационных сферах. В приближении интегралов взаимодействия в первой координационной сфере $a_3(\Sigma) = a_1(\Delta) = 0$, в то время как $a_1(\Sigma) \sim a_2(\Sigma) \sim a_1(\Delta) > 0$. В результате $a_3(\Sigma)$ и $a_1(\Delta)$ определяются интегралами взаимодействия во второй координационной сфере и чувствительны к слабым изменениям в свойствах материалов.

Таким образом, $a_3(\Sigma)$ и $a_1(\Delta)$ малы по сравнению с $a_1(\Sigma)$, $a_2(\Sigma)$ и $a_1(\Delta)$.¹ Следствием этого является сильная анизотропия изоэнергетических поверхностей в Σ - и Δ -экстремумах;² кроме того, малость $a_3(\Sigma)$ и $a_1(\Delta)$ должна приводить к сильной непараболичности спектра в соответствующих направлениях. Характер этой непараболичности можно понять, используя топологические соображения о строении поверхности Ферми при различной концентрации дырок.

¹ Согласно расчетам [7], в SnTe $m_1(\Sigma) = 0.112m_0$, $m_2(\Sigma) = 0.066m_0$, $m_3(\Sigma) = 2.04m_0$ и $m_1(\Delta) = 0.07m_0$, $m_1(\Delta) = 6.0m_0$.

² Сильная анизотропия изоэнергетических поверхностей в точке Σ — вытянутость вдоль оси 4-го порядка — установлена экспериментально для SnTe в [8] и для PbTe в [3].

Если учесть взаимное положение точек Σ ($\Gamma\Sigma \approx (1/2)\Gamma K$) и точек L , в которых находятся главные экстремумы валентной зоны в кубической фазе $A^{IV}B^{VI,3}$ и форму изоэнергетических поверхностей в окрестности Σ -экстремума, а также оценки [4], то можно убедиться, что при концентрации дырок $p \sim 10^{20} \div 10^{21} \text{ см}^{-3}$ должны возникать перемычки между соседними Σ - и L -экстремумами (или между ближайшими L -экстремумами, если точки Σ являются седловыми). Это означает, что при наличии экстремумов в точках Σ в дырочном спектре возникают 24 эквивалентные седловые точки 1-го типа (типа M_1) в направлениях ΣL (по две на каждый Σ -экстремум), при достижении которых поверхность Ферми дырок становится открытой. При этом все пять точек (точка Σ , две ближайшие точки L и две седловые точки ΣL) лежат в плоскости (1, 3) в главных осях для точки Σ .

Аналогично, учитывая взаимное положение точек L , Σ и Δ ($\Gamma\Delta \approx (1/3)\Gamma X$) и форму изоэнергетических поверхностей в окрестности Δ -экстремума, можно предполагать, что имеются 24 эквивалентные седловые точки типа M_1 в направлениях $\Delta\Sigma$ и 24 эквивалентные седловые точки 2-го типа (типа M_2) в направлениях ΔL — по четыре точки каждого типа на каждый Δ -экстремум.⁴

Седловые точки ΣL возникают в направлениях с большой эффективной массой m_3 (Σ), а возможные седловые точки $\Delta\Sigma$ и ΔL — в направлениях, лежащих в плоскости с большой эффективной массой m_\perp (Δ).⁵ Это позволяет построить простую, содержащую минимальное число параметров непараболическую, модель спектра в Σ -экстремуме, описывающую обе седловые точки ΣL , и аналогичную модель для Δ -экстремума.

Учитывая сильную анизотропию масс в Σ -экстремуме ($m_3 \gg m_1, m_2$) и соображения симметрии, запишем закон дисперсии в следующем виде ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_\Sigma$, $a_i = \hbar^2/m_i$):⁶

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{q}) &= E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_\Sigma) = \frac{1}{2} \sum_i a_i q_i^2 - \frac{1}{2} c q_1 q_3^2 + \frac{1}{4} b q_3^4 = \\ &= \frac{1}{2} a_1 \left(q_1 - \frac{c}{2a_1} q_3^2 \right)^2 + \frac{1}{2} a_2 q_2^2 + \frac{1}{2} a_3 q_3^2 - \frac{1}{4} \left(\frac{c^2}{2a_1} - b \right) q_3^4. \end{aligned} \quad (1)$$

При выполнении условия $c^2/2a_1 - b > 0$ выражение (1) имеет две седловые точки типа M_1 , расположенные по энергии от Σ -экстремума (выше в спектре дырок) на величину

$$\Delta = 1/4 a_3 q_{03}^2 = a_3^2/4 (c^2/2a_1 - b) \sim m_3^{-2} \quad (2)$$

в точках с координатами

$$q_{01} = \frac{c}{2a_1} q_{03}^2, \quad q_{02} = 0, \quad q_{03}^2 = \frac{a_3}{c^2/2a_1 - b}. \quad (3)$$

³ В SnTe главные экстремумы валентной зоны слегка смещены из точек L [7, 13].

⁴ Взаимное расположение точек L , Σ и Δ в зоне Бриллюэна приближенно можно представить следующим образом. Рассмотрим внутри зоны Бриллюэна куб с вершинами в точках Δ на осях 3-го порядка, отстоящих от точек L на $(1/4)\Gamma L$. Тогда, согласно расчетам зонной структуры [6-8], точки Σ расположены в серединах ребер куба (изоэнергетические поверхности вытянуты вдоль ребер куба), а точки Δ расположены в центрах граней куба (изоэнергетические поверхности имеют вид блинов, заполняющих грань с ростом энергии дырок). При $p \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ изоэнергетические поверхности в окрестности точек L достигают точек Δ , выпуская три отростка в стороны ближайших точек Σ [9, 14].

⁵ Строго говоря, для Σ -экстремума ситуация не является одномерной, а для Δ -экстремума двумерной, однако смещения седловых точек ΣL с оси 3 и точек $\Delta\Sigma$ и ΔL из плоскости (2, 3) малы по сравнению с расстояниями от седловых точек до экстремумов.

⁶ Учет членов разложения типа $c'q_1^3$ и $b'q_1^2q_3^2$ эквивалентен учету членов порядка q_3^4 .

⁷ Используя метод ЛКАО, предложенный в [10, 11], можно получить явные выражения для коэффициентов b и c через интегралы взаимодействия. В приближении интегралов взаимодействия в первой координационной сфере $b > 0$ и $c > 0$, причем $c^2/2a_1 = b$, так что $c^2/2a_1 - b$ определяется интегралами взаимодействия во второй координационной сфере. Подобное сокращение главных вкладов происходит во всех порядках разложения по степеням q_3^2 .

Если обозначить эффективные массы в седловой точке ΣL через m'_i , то имеют место равенства

$$m'_1 m'_3 = -\frac{1}{2} m_1 m_3, \quad m'_2 = m_2, \quad (4)$$

откуда следует, что седловая точка ΣL относится к типу M_1 , а масса плотности состояний в ней не зависит от параметров b и c .

Рассмотрим вклад в плотность состояний $\delta v_\Sigma(\varepsilon)$, соответствующую спектру (1). Используя известное выражение

$$\delta v(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^3} \int d^3q \delta(\varepsilon(q) - \varepsilon), \quad (5)$$

получаем в результате вычисления интеграла (при условии $\delta v(0) = 0$)

$$\delta v_\Sigma(\varepsilon) = 2v_0 \begin{cases} 0, & \varepsilon < 0, \\ 1 - \sqrt{1 - \sqrt{\varepsilon/\Delta}}, & 0 \leq \varepsilon \leq \Delta, \\ 1, & \varepsilon > \Delta, \end{cases} \quad (6)$$

где

$$v_0 = [(2m_1 m_2 m_3)^{1/2} / \pi^2 \hbar^3] \sqrt{\Delta} \quad (7)$$

— плотность состояний при $\varepsilon = \Delta$, которая была бы при параболическом законе дисперсии в Σ -экстремуме. Соответствующее выражению (6) изменение концентрации дырок для $0 \leq \varepsilon \leq \Delta$ имеет вид

$$\delta p_\Sigma(\varepsilon) = 2[\varepsilon/\Delta - (8/15) \varphi(\sqrt{\varepsilon/\Delta})] v_0 \Delta, \quad \varphi(x) = 1 - (1 + 3/2x)(1-x)^{3/2}. \quad (8)$$

Изменение плотности состояний и вклад в изменение концентрации дырок для $\varepsilon = \Delta$ при учете непараболичности спектра (1) и, следовательно, при учете седловых точек ΣL равны соответственно

$$\Delta v_\Sigma = \delta v_\Sigma(\Delta) = 2v_0, \quad \Delta p_\Sigma = \delta p_\Sigma(\Delta) = (7/15) \Delta v_\Sigma \Delta. \quad (9)$$

Аналогично, учитывая сильную анизотропию масс в Δ -экстремуме и соображения симметрии, запишем закон дисперсии для Δ -экстремума в следующем виде:

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}_\Delta) = 1/2 \sum_i a_i q_i^2 - 1/2 c q_1 q_2^2 + 1/4 b_1 (q_2^4 + q_3^4) + 1/2 b_2 q_2^2 q_3^2. \quad (10)$$

При выполнении условия⁸

$$c^2/2a_1 - b_1 > 0 \quad (11)$$

выражение (10) имеет четыре седловых точки на осях 2 и 3 (t -точки) при $\varepsilon = \Delta_t$ с координатами $q_{02}^2 = q_t^2$, $q_{03} = 0$ и $q_{03}^2 = q_t^2$, $q_{02} = 0$, $q_{01} = (c/2a_1) q_t^2$, а при выполнении условия

$$c^2/2a_1 - (b_1 + b_2)/2 > 0 \quad (12)$$

имеются еще четыре седловые точки при $\varepsilon_r = \Delta_r$ с координатами $q_{02}^2 = q_{03}^2 = q_r^2$, $q_{01} = (c/2a_1) q_r^2$ (r -точки). Здесь Δ_t , Δ_r и q_t^2 , q_r^2 определяются выражением (2) и выражением для q_{03}^2 в (3) с заменой a_3 на a_1 , b на b_1 для t -точек и на $(b_1 + b_2)/2$ для r -точек. Для эффективных масс в седловых точках m'_i получаются следующие выражения:

$$m'_1 m'_2 = -\frac{1}{2} m_1 m_2, \quad \left(\frac{1}{m'_3}\right)_t = \frac{b_2 - b_1}{\hbar^2} q_t^2, \quad \left(\frac{1}{m'_3}\right)_r = \frac{b_1 - b_2}{\hbar^2} q_r^2. \quad (13)$$

При $b_2 > b_1$ t -точки относятся к типу M_1 , а r -точки — к типу M_2 , при этом $\Delta_r > \Delta_t$ и $q_r^2 > q_t^2$. При $b_1 > b_2$ наоборот.

⁸ Используя метод ЛКАО, предложенный в [10, 11], можно показать, что в приближении интегралов взаимодействия в первой координационной сфере $b_1 = b_2 = b > 0$ и $c > 0$, причем $c^2/2a_1 - b = 0$.

Для вклада в плотность состояний, соответствующего спектру (10), используя (5), получаем при условии $\delta\nu(0)=0$

$$\delta\nu_{\Delta}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi^3 |c|} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{v|1-\beta|} \left\{ \begin{array}{l} \arctg \sqrt{(\beta-1)\varepsilon}, \quad \beta(\varphi) > 1, \\ \ln \left| \frac{1 + \sqrt{(1-\beta)\varepsilon}}{1 - \sqrt{(1-\beta)\varepsilon}} \right|, \quad \beta(\varphi) < 1, \end{array} \right\} \quad (14)$$

где

$$\varepsilon = \frac{2c^2}{a_1 a_1^2} \varepsilon, \quad \beta(\varphi) = \beta_1 + \frac{\beta_1 - \beta_2}{2} \sin^2 \varphi, \quad \beta_i = 2a_1 b_i / c^2. \quad (15)$$

Особенностью спектра (10) является то, что при $\varepsilon \geq \Delta_r$, Δ_r плотность состояний (14) перестает зависеть от тяжелой массы m_{\perp} и может как количественно, так и качественно значительно отличаться от результатов для параболического закона дисперсии. В принципе возможна ситуация, когда неравенства (11) и(или) (12) не выполняются и седловые точки появляются в более высоком порядке в разложении (10) по степеням q_2, q_3 . В этом случае непараболичность за счет членов 4-го порядка также приводит к ограничению роста $\delta\nu_{\Delta}(\varepsilon)$: при $\varepsilon^2 \gg \Delta^2$

$$\delta\nu_{\Delta}(\varepsilon) \rightarrow \frac{1}{\pi^2 |c|} \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{\beta(\varphi) - 1}}, \quad (16)$$

$$\Delta = \max_{\varphi} \frac{2a_1 a_1^2}{c^2 (\beta(\varphi) - 1)}. \quad (17)$$

3. Обсудим кратко имеющиеся для рассматриваемых соединений экспериментальные данные с точки зрения наличия критических точек в области достижимых концентраций дырок и возможности их обнаружения.

В RbTe, легированном Na, концентрационная зависимость плотности состояний на уровне Ферми (по данным измерений низкотемпературной теплоемкости) [15], показывает, что в области концентраций $p \leq 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ критические точки отсутствуют. Вид кривой $\nu_f(p)$ указывает на близость седловой точки 1-го типа в дырочном спектре. Таким образом, при низких температурах в RbTe точка Σ является седловой, а 2-й экстремум валентной зоны отсутствует. Это, однако, не исключает возможности того, что при повышении температуры точка Σ смещается к краю валентной зоны в область более низких концентраций дырок и даже меняет свой тип — становится экстремумом. Это означало бы, что $a_3(\Sigma)$ с ростом температуры растет, проходя через нуль при некоторой температуре T_0 , а тяжелая масса $m_3(\Sigma)$ имеет бесконечный разрыв в T_0 , убывая выше T_0 .

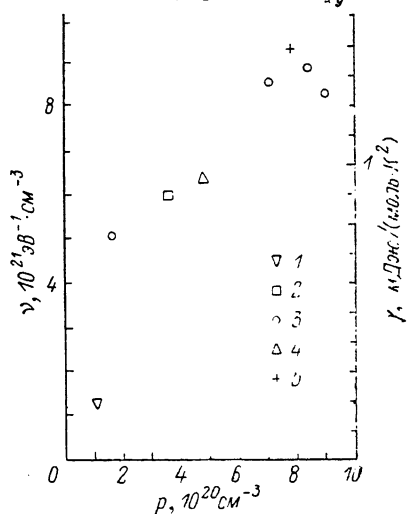
В SnTe и GeTe за счет отклонения равновесного состава в области гомогенности от стехиометрического в сторону избытка теллура удается достичь концентрации дырок $p \geq 10^{21} \text{ см}^{-3}$ [1].

Концентрационная зависимость плотности состояний дырок в GeTe (по данным измерений низкотемпературной теплоемкости) [16] имеет при $p = p_c \approx (7-8) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ особенность (излом), при интерпретации которой следует учитывать, что при $T < 630 \text{ К}$ кристаллическая структура GeTe не является кубической и симметрия низкотемпературной фазы зависит от состава [17]: при содержании Te меньше 50.4 ат. % ($p < 6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) равновесной является ромбоэдрическая α -фаза (фаза низкой плотности), а при содержании Te больше 50.6 ат. % ($p > 9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$) равновесной является орторомбическая γ -фаза (фаза высокой плотности). Наблюдавшаяся в работе [16] особенность $\nu_f(p)$, как и наблюдавшиеся ранее [1] особенности кинетических коэффициентов, находится в области $\alpha \rightarrow \gamma$ перехода (по составу) и, по-видимому, связана с перестройкой спектра при $\alpha \rightarrow \gamma$ переходе. Более точное определение характера особенности $\nu_f(p)$ затруднено тем, что детальные расчеты зонной структуры GeTe

⁹ Здесь p — так называемая истинная концентрация дырок из расчета двух дырок на каждую вакансию олова или германия.

в α - и γ -фазах отсутствуют, а использование результатов расчетов для кубической фазы [5] осложняется относительно большим расщеплением экстремумов кубической фазы (~ 0.3 эВ в α -фазе при $T < 300$ К [18]), сравнимым по величине с энергией Ферми и предполагаемым расстоянием между Σ - и L -экстремумами.

В SnTe симметрия низкотемпературной фазы также зависит от состава (концентрации вакансий олова), однако ситуация существенно отличается от GeTe. При $p \geq 5 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$ структура NaCl остается стабильной вплоть до $T=0$, а при $p < 5 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$ SnTe является низкотемпературным сегнетоэлектриком с температурой фазового перехода T_c , растущей с понижением концентрации дырок и достигающей ~ 150 К при $p = 4 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$ [19]. Сдвиг подрешеток η и сдвиговая компонента тензора деформации U_{xy} малы во всей области изменения p и T , достигая максимума при $p=0$, $T=0$. При $p = 8.8 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$ ($T_c = 98$ К) $\eta(0) = 1.4 \times 10^{-2} a_0$ (a_0 — межатомное расстояние), $U_{xy}(0) = 5 \cdot 10^{-4}$ [20]. При сдвиговой константе деформационного потенциала ~ 10 эВ расщепление экстремумов кубической фазы составляет ~ 5 мэВ, т. е. мало по сравнению с энергией Ферми (при $p = 1.0 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$ $E_f = 0.1$ эВ [14]), и соответствующее энер-



Поведение концентрационной зависимости плотности состояний $\nu(p)$ в Sn_{1-x}Te по результатам работ [14] (1), [21] (2), [22] (3), [23] (4), [24] (5).

γ — коэффициент в низкотемпературной зависимости теплоемкости дырок ($C = \gamma T$).

гии расщепления изменение концентрации дырок $\Delta p \leq 10^{19}$ см $^{-3}$ (при $p = 1.0 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$ $\nu_f = 1.3 \cdot 10^{21}$ эВ $^{-1}$ см $^{-3}$ [14]), т. е. не превышает погрешности определения концентрации дырок. Таким образом, при изучении различных концентрационных зависимостей в SnTe можно пренебречь ромбоэдрическим искажением решетки, поскольку его учет был бы фактически превышением точности определения концентрации дырок.

Результаты многочисленных экспериментальных исследований кинетических и оптических эффектов (обзор работ содержится в [9]), а также эффектов Де Гааза—Ван Альфена и Шубникова—Де Гааза [21] указывают на наличие критической точки в спектре дырок в SnTe при $p = p_{c1} = (1.1 \div 1.3) \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$. Учитывая характер анизотропии спектра в точках Σ и Δ (см. выше) и результаты работы [9], можно думать, что наблюдаемая критическая точка расположена в точке Σ .

На рисунке представлена концентрационная зависимость плотности состояний дырок в SnTe по результатам расчета спектра в окрестности точки L [14] и измерений низкотемпературной теплоемкости [22–24] (при вычислении ν_f по данным [22–24] использовалось приближение невзаимодействующих блоховских электронов). Обращает на себя внимание резкий рост плотности состояний в области концентраций между p_{c1} и $p = 1.5 \times 10^{20}$ см $^{-3}$. Возможное объяснение такого поведения $\nu(p)$ заключается в том, что наблюдаемая при $p = p_{c1}$ критическая точка является вторым экстремумом валентной зоны в точке Σ и, следовательно, быстрый рост плотности состояний при $p > p_{c1}$ связан с наличием при $p = p_{c2} \geq 1.5 \times 10^{20}$ см $^{-3}$ седловой точки 1-го типа в направлении ΣL и описывается выражением (6) данной работы. Более точную оценку p_{c2} можно получить с помощью соотношений (9), (7) и

$$\Delta p = p_{c2} - p_{c1} = \Delta p_L + \Delta p_{\Sigma}, \quad \Delta p_L \approx \nu_{c1} \Delta, \quad (18)$$

используя $m_i(\Sigma)$ из [7], результаты расчета дырочного спектра в окрестности точки L в [14], значение p_{c1} из [21] и данные для $\nu(p)$ на рисунке. Принимая $p_{c1} = 1.1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ [21], $\nu_{c1} = 1.3 \cdot 10^{21} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$ [14] и $5 \times 10^{21} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3} \leq \nu_{c2} \leq 6 \cdot 10^{21} \text{ эВ}^{-1} \cdot \text{см}^{-3}$ (см. рисунок), получаем, что $1.0 \times 10^{20} \text{ см}^{-3} \leq \Delta p \leq 1.7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и соответственно $2.0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3} \leq p_{c2} \leq 3.0 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Одновременно получаем оценку для Δ : $0.033 \text{ эВ} \leq \Delta \leq 0.05 \text{ эВ}$.

Можно предположить также, что наблюдаемый на рисунке рост плотности состояний между $p = 4.8 \cdot 10^{20}$ и $7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ связан с тем, что при некотором p_{c3} из этого интервала концентраций уровень Ферми проходит через Δ -экстремум валентной зоны, однако имеющихся данных недостаточно для более определенного утверждения.

В заключение считаю своим приятным долгом поблагодарить Ю. И. Равича и А. К. Таганцева за обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Абрикосов Н. Х., Шелимова Л. Е. Полупроводниковые материалы на основе соединений A^IVB^VI . М.: Наука, 1975. 195 с.
- [2] Pratt G. W. // J. Nonmetals. 1973. V. 1. N 1. P. 103—109.
- [3] Sitter H., Lischka K., Heinrich H. // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. N 2. P. 680—687.
- [4] Грузинов Б. Ф., Драбкин И. А., Равич Ю. И. // ФТП. 1979. Т. 13. № 3. С. 535—541.
- [5] Herman F., Cortum R. L., Ortenburger I. B., Van Dyke J. P. // J. de Physique. 1968. V. 29. N 11—12. Suppl. P. 63—77.
- [6] Tung Y. W., Cohen M. L. // Phys. Rev. 1969. V. 180. N 3. P. 823—826.
- [7] Melvin J. S., Hendry D. C. // J. Phys. C. 1979. V. 12. P. 3003—3012.
- [8] Rabe K. M., Joannopoulos J. D. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 4. P. 2302—2314.
- [9] Allgaier R. S., Houston B. // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 6. P. 2186—2197.
- [10] Волков Б. А., Панкратов О. А. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 4. С. 1362—1379.
- [11] Волков Б. А., Панкратов О. А., Сазонов А. В. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 4. С. 1395—1408.
- [12] Панкратов О. А., Сазонов А. В. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 11. С. 3506—3508.
- [13] Tung Y. W., Cohen M. L. // Phys. Lett. 1969. V. 29A. N 5. P. 236—237.
- [14] Cohen M. L., Tsang Y. W. // The Physics of Semimetals and Narrow-gap Semiconductors / Ed. D. L. Carter and R. T. Bate. Pergamon, 1971. P. 303—317.
- [15] Черник И. А., Лыков С. Н. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 10. С. 2956—2963; Константинов П. П., Лыков С. Н., Равич Ю. И., Черник И. А. // ФТТ. 1982. Т. 24. № 12. С. 3530—3534.
- [16] Черник И. А., Константинов П. П., Вышинский А. Г., Березин А. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 6. С. 1939—1941.
- [17] Карбанов С. Г., Зломанов В. П., Новоселова А. В. // ДАН СССР. 1968. Т. 182. № 4. С. 832—833.
- [18] Грузинов Б. Ф., Константинов П. П., Мойжес Б. Я., Равич Ю. И., Сысоева Л. М. // ФТП. 1976. Т. 10. № 3. С. 497—503.
- [19] Квятковский О. Е., Максимов Е. Г. // УФН. 1988. Т. 154. № 1. С. 3—48.
- [20] Iizumi M., Hamaguchi Y., Komatsubara K., Kato Y. // J. Phys. Soc. Jap. 1975. V. 38. N 2. P. 443—449.
- [21] Savage H. T., Houston B., Burke J. R. // Phys. Rev. B. 1972. V. 6. N 6. P. 2292—2304.
- [22] Phillips N. E., Triplett B. B., Clear R. D., Simon H. E., Hulm J. K., Jones C. K., Mazelsky R. // Physika. 1971. V. 55. N 10. P. 571—576.
- [23] Bevolo A. J., Shanks H. R., Eckels D. E. // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. N 8. P. 3523—3533.
- [24] Finegold L., Hulm J. K., Mazelsky R., Phillips N. E., Triplett B. B. // Ann. Acad. Sci. Fennicae. Ser. A. 1966. V. 210. P. 129—134.