

кратно, будет иметь размер состояния $\sim \hbar/\sqrt{mE_n} \sim 30 \text{ \AA}$. Можно ожидать, что волновая функция такого состояния гофрирована с симметрией, соответствующей симметрии кристалла, и соответственно ее октупольный момент может существенно превысить оценку [2]. В работе [2] предполагается, что асимметрия рассеяния носителей обуславливается октупольным моментом примесного потенциала; дипольный же момент для атомов, расположенных в узлах кристаллической решетки, считается равным нулю. Тем не менее, как указали Ивченко, Пикус [6], для нецентрального иона в кубических кристаллах дипольный момент может быть отличным от нуля. Этот случай может реализоваться при условии образования комплексов в кристалле.

При рассеянии на оптических колебаниях решетки, согласно [3], для кристаллов *p*-типа InSb $j_{\perp}/j_{\parallel} \simeq d_0 e E / C \hbar T$, где d_0 — константа деформационного потенциала для оптических колебаний; C — постоянная, определяющая дальнедействующее полярное взаимодействие. Эта оценка дает $j_{\perp}/j_{\parallel} = 2 \cdot 10^{-5}$, тогда как для *p*- InSb экспериментальная величина $j_{\perp}/j_{\parallel} \simeq 10^{-2}$. Отличие экспериментальных и теоретических значений, по-видимому, можно объяснить рассеянием носителей на примесях с большим октупольным или дипольным моментом.

В заключение выражаю благодарность И. С. Шлимаку за руководство работой, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикусу, М. Д. Блоху, Л. И. Магариллу, И. В. Энтину за полезные дискуссии.

Л и т е р а т у р а

- [1] Казлаускас П. А. В., Левинсон И. Б. // ФТТ. 1964. Т. 10. С. 3192—3194.
 [2] Блох М. Д., Магарилл Л. И., Энтин М. В. // ФТП. 1978. Т. 12. № 2. С. 249—256.
 [3] Ивченко Е. Л., Пикус Е. Г. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 6. С. 268—270.
 [4] Ткаченко А. Ю., Иванов Ю. Л. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 6. С. 270—272.
 [5] Kravchenko A. F., Kuralkova S., Morosov B. V. et al. // Phys. St. Sol. (b). 1979. V. 72. P. 221—228.
 [6] Ивченко Е. Л., Пикус Г. Е. // Материалы XI Зимней школы по физике полупроводников. Л., 1984. С. 3—55.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

В окончательной редакции
21 сентября 1988 г.

САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ НИТРИДА ТАНТАЛА

Е. М. Гололобов, Н. Н. Дорожкин, Б. В. Новыш

Разработка линейных методов расчета энергетической зонной структуры (ЭЗС) кристаллов [1] позволила практически без потерь точности ускорить процесс расчета ЭЗС на два порядка по сравнению с ранее применяемыми методами. Это имеет чрезвычайно важное значение для проведения самосогласованных расчетов зонной структуры сплавов и соединений.

В данной работе мы приводим результаты самосогласованного расчета ЭЗС нитрида тантала (структура типа В1, постоянная решетки 8.18259 а. е.) линейным методом МТ орбиталей (ЛМТО метод [1]). Как известно, наряду с предположением о сферической симметрии потенциала в области определенных сфер, описанных вокруг узлов решетки (МТ сферы или атомные сферы), в ЛМТО методе используется также пред-

положение о линейной зависимости от энергии решения радиального, уравнения Шредингера в пределах некоторого энергетического интервала. Существенной особенностью данного метода является также перекрывание атомных сфер.

В процессе расчета учитывались релятивистские эффекты, за исключением спин-орбитального взаимодействия (СОВ). Известно [2, 3], что «скалярные» варианты релятивистских расчетов ЭЗС дают достаточно надежные результаты (особенно при использовании релятивистских волновых функций остова) для немагнитных систем, включающих компоненты с зарядами ядер $Z \leq 75$. СОВ не приводит к большим изменениям волновых функций электронов проводимости, лишь несколько модифицируя дисперсионные кривые $E(k)$ (главным образом вблизи высокосимметричных точек и линий), что в большинстве случаев несущественно сказывается на плотности состояний и радиальной электронной плотности.

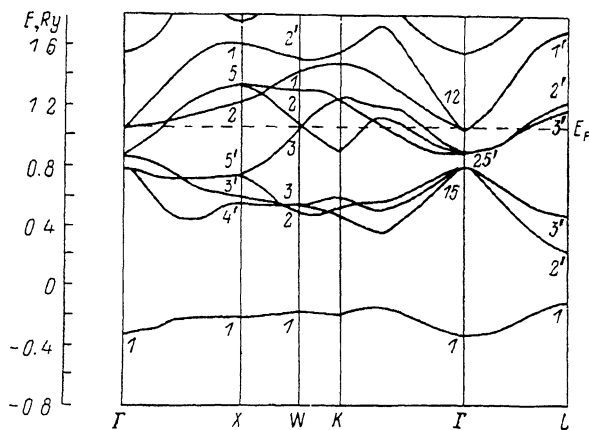


Рис. 1. Зонная структура нитрида тантала.

Расчет проводился по версии ЛМТО метода, приведенной в [2]. Обменно-корреляционный потенциал использовался в приближении Барта—Хедина [4]. Радиусы атомных сфер тантала и азота были выбраны равными 2.82328 и 2.16828 а. е. соответственно. Расчет осуществлялся на 89 точках в неприводимой части зоны Бриллюэна, полная и парциальные плотности состояний рассчитывались методом тетраэдров (шаг по энергии составлял 2.9 mRy). Использовалось приближение «замороженного остова». При этом полагалось, что зоны проводимости формируются из $6s$ - и $5d$ -электронов тантала и $2s$ - и $2p$ -электронов азота, в то время как остальные электроны (которым в соответствующих свободных атомах присущи значительно большие энергии связи) считались остовными и не вовлекались в итерационный процесс. В разложении волновых функций электронов по орбитальному квантовому числу мы ограничивались членами до $l=2$ включительно. В качестве критерия оценки самосогласования использовалось изменение вклада электронов в полное давление при очередной итерации. Самосогласование считалось достигнутым, если при очередной итерации давление изменялось не более чем на 0.002 Мб (постоянная решетки фиксировалась заранее). Процесс самосогласования занял 6 итераций.

Расчитанная ЭЗС нитрида тантала приводится на рис. 1. В качестве нуля энергетической шкалы принимается среднее значение потенциалов на поверхностях атомных сфер тантала и азота $\frac{1}{2} [V(R_{Ta}) + V(R_N)]$. Первая зона образована преимущественно s -состояниями азота с примесью s -состояний тантала, вклад других состояний в данную зону мал. За ней следуют 3 зоны, образованные главным образом p -состояниями азота с незначительной примесью p - и d -состояний тантала. В следующих трех зонах, образованных p -состояниями азота и d -состояниями тантала, наблюдается сильная $p-d$ -гибридизация, типичная для нитридов, карбидов и

оксидов переходных металлов и ответственная в основном за ковалентную составляющую химической связи этих соединений.

На рис. 2 приведены полная и парциальные плотности электронных состояний нитрида тантала. Низкоэнергетический пик вблизи $E = -0.2$ Ry обусловлен в основном s -состояниями азота и в меньшей степени s -, p - и d -состояниями тантала (вклад s -состояний азота составляет около 75 %, s -, p - и d -состояний тантала соответственно 5.7 и 13 %). Далее следует

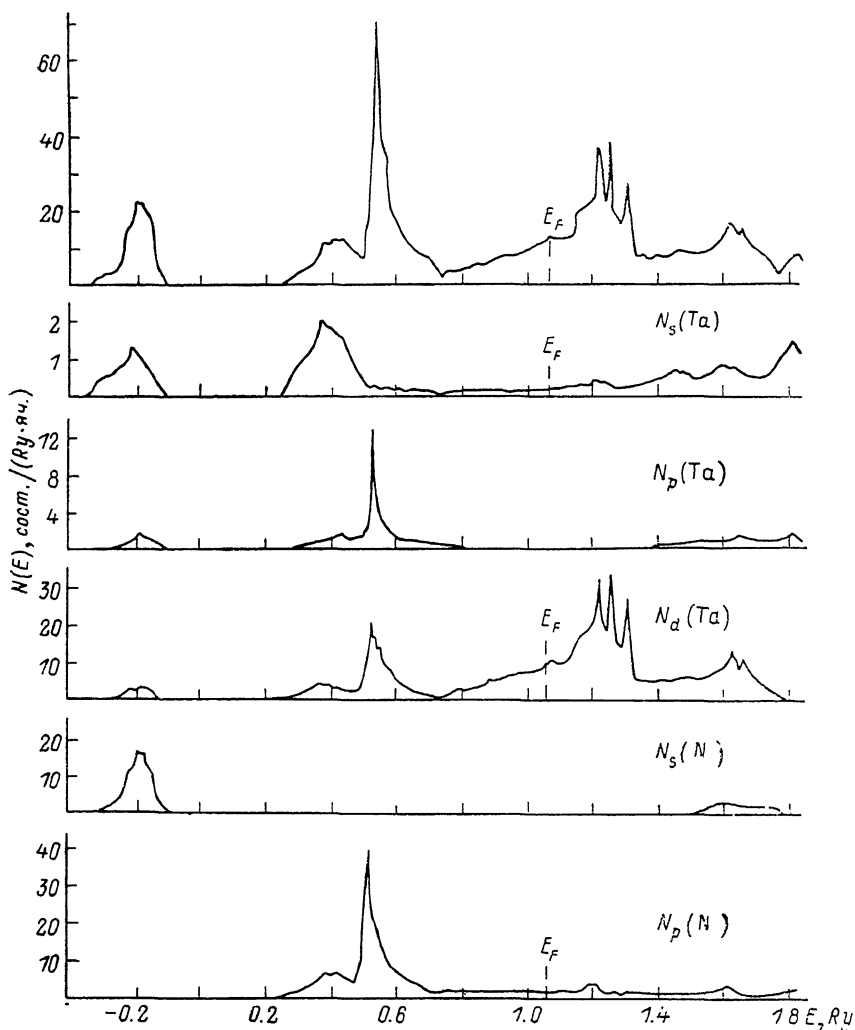


Рис. 2. Полная плотность состояний $N(E)$ (вверху) и парциальные плотности состояний нитрида тантала в расчете на атом.

энергетическая щель шириной примерно 0.33 Ry, за которой в свою очередь следуют два подпика различной интенсивности. Первый (при $E = 0.42$ Ry) образован в основном p -электронами N (53 %) и s -, p -, d -электронами Ta (12, 9, 24 % соответственно), второй, более высокий, — также p -электронами N (54 %) и p -, d -электронами Ta (17 и 27 %). Здесь p - d -гибридизация максимальна.

Положение уровня Ферми определяется условием, согласно которому общее число занятых состояний должно равняться числу валентных электронов. Для нитрида тантала это дает $\int_{-\infty}^{E_F} N(E) dE = 10$, и рассчитан-

ное таким образом значение энергии Ферми составило 1.06 Ry. Плотность состояний на уровне Ферми составляет 10.77 сост./Ry·яч.

Как известно, для теоретического расчета параметра электрон-фонового взаимодействия необходима информация о парциальных вкладах в полную плотность состояний на уровне Ферми. Согласно нашим расчетам, данные вклады распределяются следующим образом: *s*-, *p*-, *d*-электроны тантала 1, 0.5 и 76 % соответственно, *s*- и *p*-электроны азота менее 0.5 и 17 %. Таким образом, *p*-электроны азота и *d*-электроны тантала и здесь играют определяющую роль.

По известным радиальным функциям распределения заряда нами были определены также направление и величина переноса заряда в данном соединении. Как и следовало ожидать из сравнения электроотрицательностей компонент, перенос заряда в нитриде тантала осуществляется от атома металла к атому неметалла. Количественно он составляет около 0.5 электрона, что говорит о заметной ионной составляющей химической связи в данном соединении.

Л и т е р а т у р а

- [1] Andersen O. K. // Phys. Rev. 1975. V. B12. N 8. P. 3060—3083.
- [2] Skriver H. L. The LMTO Method. Berlin, 1984. 380 p.
- [3] Koelling D. D. // Rep. Progr. Phys. 1981. V. 44. P. 139—212.
- [4] Barth V., Hedin L. // J. Phys. 1972. V. C5. P. 1629—1642.

Институт физики твердого тела
и полупроводников АН БССР
Минск

Поступило в Редакцию
22 февраля 1988 г.
В окончательной редакции
29 сентября 1988 г.

УДК 621.315.592

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И ТЕРМОЭДС ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_xHg_{1-x}Te$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

С. А. Алиев, Т. Г. Гаджиев, Р. И. Селим-заде

В настоящей работе приводятся результаты исследования теплопроводности κ и термоэдс α $HgTe$ и $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x=0.05, 0.1, 0.14, 0.2$) в интервале температур $2 \leq T \leq 100$ К. Экспериментальные результаты о $\kappa(T)$ представлены на рис. 1. Для всех исследованных образцов κ проходит через максимум при ~ 8 К, в области 20—80 К зависимость $\kappa(T)$ для $HgTe$ соответствует $\kappa \sim T^{-n}$ ($n=1, 2$); с переходом к $Cd_xHg_{1-x}Te$ уменьшаются значения κ и n . Экспериментальные результаты сопоставлены с общепринятыми теоретическими представлениями о $\kappa(T)$. Общее согласие эксперимента с теорией имеется. Значительное отклонение теории от эксперимента наблюдается в области 4—20 К. Оценки показывают, что согласия эксперимента с теорией можно добиться, если допустить, что в $HgTe$ имеют место собственные дефекты, аналогичные содержанию ~ 0.01 ат. % Cd. Из рис. 1 также видно, что наклон кривых $\kappa(T)$ при $T < T_{max}$ убывает с содержанием Cd, что связано в основном с влиянием точечных дефектов. В то же время обнаружено, что значение κ зависит от типа и концентрации носителей заряда. Это можно связать с рассеянием фононов на носителях заряда, где прослеживается индивидуальность поведения электронов и дырок в рассеянии фононов, т. е. фононы на дырках рассеиваются наиболее эффективно. Эти эксперименты подтверждают выводы работы [1].