

- [2] Абдусаттаров А. Г., Емцев В. В., Ломасов В. Н., Машовец Т. В. Скорость образования А-центров в кремнии при электронном импульсном облучении. — ФТП, 1986, т. 20, в. 1, с. 164—167.
- [3] Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках. М., 1964. 450 с.
- [4] Watkins G. D. — In: Rad. Dam. Semicond. Paris—Rayamont, 1965, p. 97—113.
- [5] Stein H. I. — In: Rad. Eff. Semicond. London—N. Y.—Paris, 1971, p. 125—139.
- [6] Almeleh N. — Phys. Rev., 1966, v. 149, N 2, p. 687—692.
- [7] Витовский Н. А., Емцев В. В., Машовец Т. В. О распределении пар Френкеля, возникающих в германии при облучении, по расстояниям между их компонентами. — ФТП, 1983, т. 17, в. 11, с. 1985—1990.

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

Получено 12.02.1987
Принято к печати 21.07.1987

ФТП, том 22, вып. 3, 1988

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ЗОННЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЫРОК В ТЕЛЛУРЕ

Горлей П. Н.

Наинизшая среди элементарных полупроводников симметрия кристаллической решетки и отсутствие в ней центра инверсии приводят к целому ряду уникальных особенностей физических свойств теллура. Например, достоверно установлено [1, 2], что энергетический спектр дырок в этом материале имеет необычный для полупроводников вид и при малых уровнях заполнения описывается соотношением

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -Ak_x^2 - Bk_y^2 \pm \sqrt{E_1^2 + S^2k_z^2} - \Delta', \quad (1)$$

где $\Delta' = E_1 - \varepsilon_{op}$, $\varepsilon_{op} = (E_2 - 2E_1)^2 / (4E_2)$, $E_2 = S^2/A$. Нижний знак в (1) соответствует валентной зоне H_5 , верхний — зоне H_4 , от максимумов которой ведется отсчет энергии. Структура энергетических зон теллура схематично представлена на вставке к рисунку. Из опытных данных [3-8] следует также аномальное изменение с температурой (см. рисунок) ширины запрещенной зоны E_g и величины расщепления $2E_1$ зон H_4 и H_5 теллура. Столь необычное изменение с ростом температуры E_g и E_1 должно привести и к нелинейной температурной зависимости зонных параметров дырок в теллуре. Знание последней весьма актуально, поскольку позволит более точно найти константы вещества, определяемые на основе сопоставления теоретических и экспериментальных данных.

Прежде всего отметим, что параметры A и B в (1) определяются следующим образом [9, 10]:

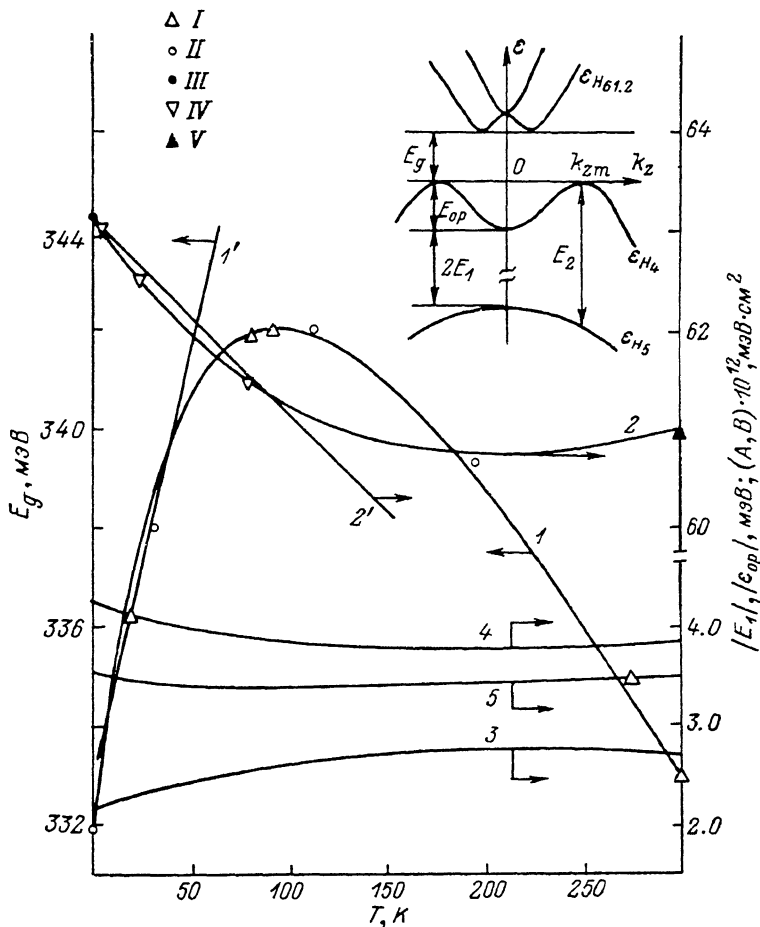
$$A = \hbar^2 / [2m_{\parallel} (1 - 4E_1^2/E_2^2)], \quad (2)$$

$$B = \hbar^2 / 2m_{\perp} = L^2/E_g - \hbar^2/2m_0, \quad (3)$$

где m_{\parallel} и m_{\perp} — соответственно продольная и поперечная компоненты тензора эффективной массы дырок вблизи экстремума зоны, L — матричный элемент оператора импульса, \hbar — постоянная Планка, m_0 — масса свободного электрона.

Из (2), (3) следует, что $A = f[m_{\parallel}(T), E_1(T), E_2(T)]$, $B = \varphi[m_{\perp}(T)] = \varphi[L(T), E_g(T)]$. Однако, согласно опытным данным [8, 11], величина E_2 с точностью до ошибок эксперимента не зависит от температуры и давления. Компонента тензора эффективной массы дырок m_{\perp} пропорциональна энергии

тическому расстоянию от исходной зоны до более далеких зон, имеющих симметрию H_3 , и от температуры, по-видимому, не зависит [12]. Предположим, что L также не изменяется с температурой или, по крайней мере, что это изменение значительно слабее, чем $E_g(T)$ [12]. Тогда температурная зависимость параметров A (следовательно, и S^2 , поскольку $S^2 = AE_2$) и B полностью определяется



Зависимость от температуры зонных параметров дырок в теллуре.

1, 2 — эксперимент; 1 — $E_g(T)$, 2 — $E_1(T)$. I — [°], II — [°], III — [°], IV — [°], V — [°]. 1', 2' — расчет по формулам: 1' — $E_g(T)$, $\text{мэВ} = E_g(4.2) + 0.16 T$ [°], 2' — $E_1(T)$, $\text{мэВ} = E_1(0) - 0.02 T$ [°], 3 — $E_{op}(T)$, 4 — $A(T)$, 5 — $B(T)$. На вставке — схема энергетических зон теллурa.

зависимостями $E_1(T)$ и $E_g(T)$. Заметим, что для многих кристаллов $E_g(T)$ удовлетворительно описывается выражением [13]

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (T + \beta), \quad (4)$$

где α и β — константы. Однако для теллурa формула (4) неприемлема.

Проведенные нами расчеты показали, что опытные данные для $E_g(T)$ и $E_1(T)$ теллурa наилучшим образом описываются следующей формулой:

$$E_i(T) = E_i(0) - \alpha_i T (T - \gamma_i) / (T + \beta_i), \quad (5)$$

где $i = g, 1$. Значения коэффициентов, входящих в (5), даны в таблице. Рассчитанные по (5) зависимости $E_g(T)$ и $E_1(T)$ представлены на рисунке соответственно кривыми 1 и 2. Видно, что расчетные значения хорошо согласуются с экспериментальными результатами и в области низких температур незначительно отличаются от данных, полученных для линейных зависимостей $E_g(T)$ (прямая 1') [7] и $E_1(T)$ (прямая 2') [8]. Экстремальные значения $E_g(T)$ и $E_1(T)$ реализу-

ются при различных температурах ($E_{g \max} = 342.1$ мэВ и достигается при $T \approx 95$ К, $|E_1|_{\min} = 60.78$ мэВ — при $T \approx 207$ К), что свидетельствует о различном характере смещения зон H_4 и H_5 с ростом температуры. Температурное изменение энергии «седловой» точки ϵ_{op} , рассчитанное при $E_2 = 164.45$ мэВ, представлено на рисунке кривой 3. Важно, что если максимальное изменение $E_1(T)$ составляет около 4 %, то максимальное изменение $\epsilon_{op}(T)$ — 26 %. Поскольку многие параметры вещества, например эффективная масса плотности состояний, являются интегральными величинами, зависящими, в частности, от ϵ_{op} , то столь сильное изменение последней должно привести к существенной зависимости этих параметров от температуры.

Зависимости $A(T)$ и $B(T)$, рассчитанные по (2), (3), (5) при $m_{\parallel} = 0.22 m_0$ [14], представлены на рисунке соответственно кривыми 4 и 5. При этом для матричного элемента оператора импульса принималось $L^2 = 12.975 \cdot 10^{-16}$ эВ $^2 \cdot \text{см}^2$ с тем, чтобы, согласно (3), в точке $T = 0$ К значение $m_{\perp}(T)$ совпадало с экспериментальными данными, т. е. $m_{\perp}(0) = 0.108 m_0$ [14]. Характерно, что вплоть до температуры плавления теллура выполняется отношение $A(T)/B(T) > 1$, причем с ростом температуры оно сначала уменьшается от 1.197 при $T = 0$ К до 1.095 при $T = 350$ К, а затем медленно увеличивается до 1.154 при $T = 700$ К. Следовательно, при сделанных предположениях во всем интервале температур существования кристаллического теллура изоэнергетические поверхности дырок являются вытянутыми вдоль оси k_z .

Таким образом, в работе предложена новая эмпирическая формула для $E_g(T)$ и $E_1(T)$, а также изучены зависимости от температуры зонных параметров дырок в теллуре, что создает основу для дальнейших исследований по корректному определению других параметров этого интересного в научном и важного в практическом аспектах полупроводникового материала.

Л и т е р а т у р а

- [1] Фарбштейн И. И. Исследования энергетического спектра носителей тока и кинетических явлений в теллуре. — Автореф. докт. дис. Л., 1974.
- [2] Бреслер М. С. Особенности энергетических спектров и рассеяния электронов проводимости в полупроводниках в квантующих магнитных полях. — Автореф. докт. дис. Л., 1983.
- [3] Grosse P. Springer Tracts in Modern Physics, v. 48. Berlin, 1969. 208 p.
- [4] Косичкин Ю. В., Мазур Ю. И., Надеждинский А. И. Обнаружение сильно локализованных состояний вблизи дна зоны проводимости теллура. — ФТТ, 1982, т. 24, в. 5, с. 1346—1351.
- [5] Hardy D., Rigaux C. — Phys. St. Sol., 1970, v. 38, N 2, p. 799—808.
- [6] Дубинская Л. С., Фарбштейн И. И. Естественная оптическая активность и особенности структуры электронного энергетического спектра теллура. — ФТТ, 1978, т. 20, в. 3, с. 753—760.
- [7] Lutz M., Stolze H., Grosse P. — Phys. St. Sol. (b), 1974, N 2, p. 665—675.
- [8] Fisher D., Bangert E., Grosse P. — Phys. St. Sol. (b), 1973, v. 55, N 2, p. 527—535.
- [9] Аверкиев Н. С., Аснин В. М., Бакун А. А., Данишевский А. М., Ивченко Е. Л., Пшкус Г. Е., Рогачев А. А. Циркулярный фотогальванический эффект в теллуре. — ФТП, 1984, т. 18, в. 4, с. 639—647.
- [10] Narao K., Doi T., Kamimura H. — J. Phys. Soc. Japan, 1971, v. 30, N 5, p. 1400—1413.
- [11] Enderlein R., Hach A. — Phys. St. Sol. (b), 1973, v. 60, N 2, p. 739—749.
- [12] Цидильковский И. М. Зонная структура полупроводников. М., 1978. 328 с.
- [13] Панков Ж. Оптические процессы в полупроводниках. М., 1973. 456 с.
- [14] Couder Y., Hulin M., Thome H. — Phys. Rev. B, 1973, v. 7, N 10, p. 4373—4385.

Черновицкий государственный университет

Получено 20.02.1987
Принято к печати 21.07.1987