

этому каждый минимум принадлежит двум зонам Бриллюэна и их число вдвое меньше числа эквивалентных направлений, т. е. равно 4. Поверхности  $\mathcal{E}(p) = \text{const}$  имеют вид эллипсоидов с осями вращения вдоль диагоналей куба;  $m_1 = 1,58 m_0$ ,  $m_2 = 0,08 m_0$ .

Области энергии вблизи каждого минимума наз. долями, а II. с неск. эквивалентными минимумами наз. многодолинными (см. Многодолинные полупроводники).

**Вырожденные зоны.** Валентная зона типичных II. (Ge, Si, A<sup>III</sup>B<sup>V</sup>) в точке  $p = 0$  без учёта спин-орбитального взаимодействия шестикратно вырождена. Однако благодаря спин-орбитальному взаимодействию зона расщепляется в точке  $p = 0$  на двукратно и четырёхкратно вырожденные зоны (рис. 3). Энергетич. расстояние между ними  $\Delta$  наз. энергией спин-орбитального расщепления. При  $p \neq 0$  4-кратное вырождение снимается и возникают 2 двукратно вырожденные зоны, к-рые наз. зонами лёгких ( $\mathcal{E}^L$ ) и тяжёлых ( $\mathcal{E}^T$ ) дырок. Их энергии зависят от квазимпульса, определяемого выражением:

$$\mathcal{E}^{L,T} = -\frac{1}{2m_0} \left\{ \gamma_1 P^2 \pm \left[ 4\gamma_2^2 p^4 + 12 \left( \gamma_3^2 - \gamma_2^2 \right) \left( p_x^2 p_y^2 + p_y^2 p_z^2 + p_x^2 p_z^2 \right) \right]^{1/2} \right\}, \quad (3)$$

где знак плюс соответствует зоне лёгких дырок, знак минус — зоне тяжёлых дырок;  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\gamma_3$  — безразмерные параметры (параметры Латтингдера; табл. 3).

Таблица 3. — Параметры Латтингдера и энергия спин-орбитального расщепления  $\Delta$  (эВ) для Ge и Si

Полупроводник	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$\Delta$
Si	4,22	0,39	1,44	0,04
Ge	13,35	4,25	5,69	0,29

Поверхности  $\mathcal{E}(p) = \text{const}$ , описываемые выражением (3), не обладают сферич. симметрией. Это слегка «гофрированные» сферы. В ряде II. в т. ч. и в Ge, анизотропия изоэнергетич. поверхностей слабая. Поэтому зоны лёгких (L) и тяжёлых (T) дырок приближённо описываются ур-ниями

$$\mathcal{E}^L = -p^2/2m^L, \quad \mathcal{E}^T = -p^2/2m^T, \quad (4)$$

где  $m^L = m_0(\gamma_1 + 2\gamma)^{-1}$  — масса лёгкой дырки,  $m^T = m_0(\gamma_1 - 2\gamma)^{-1}$  — масса тяжёлой дырки,  $\gamma = (3\gamma_3 - 2\gamma_2)/5$ . Для Ge  $m^L = 0,04 m_0$ ,  $m^T = 0,3 m_0$ . Если пренебречь переходами между зонами лёгких и тяжёлых дырок, то  $m^L$  и  $m^T$  описывают динамику лёгких и тяжёлых дырок. Описанная картина валентных зон точна для кристаллов Ge и Si, обладающих центром инверсии. В кристаллах II. типа A<sup>III</sup>B<sup>V</sup> при малых  $p$  закон дисперсии имеет более сложный вид.

**Модель Кейна.** Кинетич. энергия  $\mathcal{E}$  электрона или дырки параболически (квадратично) зависит от их квазимпульса  $p$  при условии, что она мала по сравнению с  $\mathcal{E}_g$ . В узкоэзонных II. ( $\mathcal{E}_g$  мало) это условие нарушается. Однако для закона дисперсии и при  $\mathcal{E} > \mathcal{E}_g$  можно получить простые выражения, к-рые справедливы при условии, что длина волны электрона велика по сравнению с постоянной решётки  $a_0$ . При этом, как правило, энергетич. расстояние до следующих разрешённых зон остаётся всё ещё значительно больше, чем энергия электрона. В этом случае следует учитывать только перемещивание волновых ф-ций электронов зон проводимости и валентной зоны, взаимодействие же с др. зонами несущественно. Такое приближение наз. моделью Кейна. Кроме величин  $\mathcal{E}_g$  и  $\Delta$  в нём фигурирует лишь один параметр  $P$ , характеризующий перемещивание волновых ф-ций, к-рый выражается через эф. массу электрона на «дае» зоны проводи-

мости  $\mathcal{E}_c$ . При предельно малых импульсах  $p$ , когда  $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_g$ , модель Кейна даёт следующие параболич. выражения для энергии электронов  $\mathcal{E}^0(p)$ , лёгких дырок  $\mathcal{E}^L(p)$ , тяжёлых дырок  $\mathcal{E}^T(p)$  и дырок в спин-орбитально отщеплённой зоне  $\mathcal{E}^{CO}(p)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^0 &= \frac{p^2 P^2}{3\hbar^2} \left( \frac{2}{\mathcal{E}_g} + \frac{1}{\mathcal{E}_g + \Delta} \right); \\ \mathcal{E}^L &= -\frac{2p^2 P^2}{3\hbar^2 \mathcal{E}_g}; \quad \mathcal{E}^T = 0; \\ \mathcal{E}^{CO} &= -\Delta - \frac{p^2 P^2}{3\hbar^2 (\mathcal{E}_g + \Delta)}. \end{aligned} \quad (5)$$

Как видно из (5), это приближение не позволяет найти энергетич. спектр тяжёлых дырок. Если  $\mathcal{E}_g \ll \Delta$ , то, сопоставив (5) с (1) и (4), получим, что массы электрона и лёгкой дырки одинаковы и равны:

$$m = 3\hbar^2/4P^2 \mathcal{E}_g. \quad (6)$$

Если при этом  $p \ll \sqrt{2m\Delta}$ , то энергетич. спектры электронов и лёгких дырок описываются ф-лами

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^0 &= \frac{\mathcal{E}_g}{2} \left( 1 + 4 \frac{p^2}{2m\mathcal{E}_g} \right)^{1/2}, \\ \mathcal{E}^L &= \frac{\mathcal{E}_g}{2} \left( 1 + 4 \frac{p^2}{2m\mathcal{E}_g} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Ф-лы (7) показывают, что спектр электронов и лёгких дырок отклоняется от квадратичного, когда кинетич. энергия электрона или дырки порядка  $\mathcal{E}_g$ .

#### Примеси и дефекты в полупроводниках

Различают примеси электрически активные и неактивные. Первые способны приобретать в II. заряд того или др. знака, к-рый компенсируется появлением электрона в зоне проводимости или дырки в валентной зоне. Электрически неактивные примеси остаются нейтральными и сравнительно слабо влияют на электрич. свойства II. Как правило, электрич. активность связана с тем, что примесный атом имеет иную валентность, чем замещаемый атом, а кристаллич. решётка, в к-рую попадает примесь, «навязывает» ей свою координацию ближайших соседей. Так, напр., элемент V группы, попадая в решётку Si с тетраэдрич. координацией связи, «перестраивает» свои валентные электроны так, что 4 из них образуют устойчивую тетраэдрич. конфигурацию, а 5-й электрон связан с примесным атомом относительно слабо. В первом приближении можно считать, что на этот «лишний» электрон действует лишь сила электростатич. притяжения к примесному иону, уменьшенная в  $e$  раз ( $e$  — диэлектрич. проницаемость решётки).

В простейшем случае невырожденной (стандартной) зоны ур-ние движения для лишнего электрона оказывается таким же, как для электронов в атоме водорода. Энергия связи имеет вид

$$\mathcal{E}_0 = \frac{me^4}{2e^2 \hbar^2} = \frac{m_0 e^4}{2\hbar^2} \left( \frac{m}{m_0} \right) \frac{1}{e^2}, \quad (8)$$

где  $e$  — заряд электрона,  $e$  — диэлектрич. проницаемость решётки. Если  $m/m_0 = 10$ , а  $e = 12$ , то  $\mathcal{E}_0$  оказывается примерно в  $1,5 \cdot 10^3$  раз меньше, чем энергия связи атома водорода ( $13,6$  эВ). Тепловое движение легко отрывает электрон от примесного атома, после чего он может участвовать в переносе электрич. тока. Такие примесные атомы наз. донорами (донорная примесь).

Элементы III группы, попадая в тетраэдрич. решётку, захватывают электрон из валентной зоны и с его помощью образуют устойчивую тетраэдрич. конфигурацию. Образовавшаяся в валентной зоне дырка притягивается к отрицательно заряженному примесному атому и при низких темп-рах находится в связанном (локализованном) состоянии. Энергия связи дырки