

группы элементарная ячейка содержит 2 пятивалентных атома и 10 валентных электронов).

Чистые As, Sb, Bi имеют полуметаллический спектр. Сплавы Bi и Sb ($Bi_{1-x}Sb_x$) в интервале составов $0,065 \leq x \leq 0,23$ являются полупроводниками с узкой запрещённой зоной $E_g \approx 0,025$ эВ.

Иную природу имеет происхождение полуметаллического состояния в графите. Атомы C в отдельном слое графита расположены в вершинах правильных шестиугольников и образуют структуру с полностью насыщенными связями. Электронный энергетический спектр такого слоя является спектром бесщелевого полупроводника. Слабое перекрытие волновых функций электронов в соседних слоях приводит к возникновению полуметаллического спектра трёхмерного графита с перекрытием зон $\sim 0,04$ эВ.

Анализ происхождения электронного энергетического спектра П. V позволяет понять, с чем связано наибольшее для всех П. V свойство — малое число носителей заряда на один атом вещества. Столь же типично для П. V малое значение эффективной массы m^* электронов и дырок в некристаллических направлениях в зоне Бриллюэна ($10^{-2} - 10^{-3}$ от массы m_0 свободного электрона).

Совокупность этих свойств обуславливает то, что целый ряд физических параметров П. V имеет аномальное значение. Вследствие малого числа носителей весьма малыми являются сечения поверхностей Ферми ($S \sim 10^{-40} - 10^{-42} \text{ см}^2/\text{с}^2$). Малость эффективных масс приводит к высокой подвижности и носителям заряда (при низких температурах $\mu \approx 10^6 - 10^7 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$), к большим значениям коэффициента магнетосопротивления ($\Delta\rho/\rho H^2 \sim 10^{-2} - 10^{-6} \text{ Э}^{-2}$), термоЭДС ($\alpha \sim 10^{-4} \text{ В/град}$), г-факторов ($\sim 10^2 - 10^3$), магнитной восприимчивости χ .

Диэлектрическая проницаемость ϵ у П. V группы велика ($\epsilon \geq 10^2$). Такая величина связана с тем, что при удалении по энергии от уровня Ферми E_F на величину $\sim 0,1$ эВ электронный энергетический спектр этих веществ мало отличается от спектра в кристалле, для которого характерна большая плотность электронных состояний. У графита подобная аномалия отсутствует ($\epsilon \sim 2,5$).

Полуметаллы V группы. Кристаллическая решётка имеет симметрию $R\bar{3}m$ ($D_{\infty h}^3$) (см. Симметрия кристаллов). Она отличается от простой кубической решётки ромбоэдрической деформацией (углы искажения $\sim 3^\circ - 5^\circ$) и сдвигом двух гранецентрированных подрешёток вдоль выделенной диагонали куба (относительный сдвиг 10%). Зона Бриллюэна близка по форме к зоне Бриллюэна для гранецентрированной кубической решётки. Выделенное направление — ось третьего порядка C_3 (рис. 1). Электронные

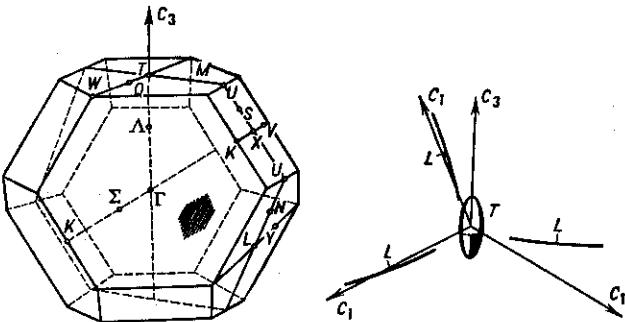


Рис. 1. Первая зона Бриллюэна полуметаллов V группы.

Рис. 2. Дырочные части поверхности Ферми Bi.

части поверхности Ферми у всех П. V группы представляют собой 3 вытянутые поверхности, близкие по форме к эллипсоидам (отношение максимума и минимума сечений $\sim 12 - 16$) с центрами в точках L зоны Бриллюэна (рис. 2). Направления вытянутости квазиэллипсоидов у As и Sb отклонены на малые углы ($2^\circ - 6^\circ$) от базисной плоскости и соответствующих биссекторных осей C_1 . Дырочные части поверхности Ферми у П. V группы

сильно отличаются между собой. У Bi поверхности Ферми дырок представляют собой эллипсоиды вращения, вытянутые вдоль оси C_3 с центром в точке T зоны Бриллюэна (рис. 2). Отношение экстремальных дырочных сечений в Bi близко к 3. У Sb бывшие экстремумы, расположенные в точках H зоны Бриллюэна (рис. 3).

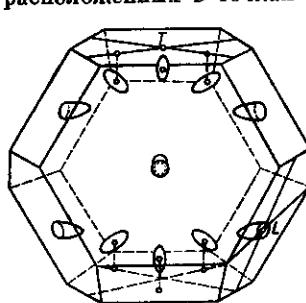


Рис. 3. Электронная и дырочная части поверхности Ферми Sb.

Поверхности Ферми дырок — эллипсоиды вращения, направления вытянутости которых составляют углы $\sim 37^\circ$ с осью C_3 , степень анизотропии экстремальных сечений близка к 3. Дырочные экстремумы в As находятся в тех же точках, что и в Sb, но поверхность Ферми дырок имеет значительно более сложную форму (рис. 4), что связано с большими размерами поверхности Ферми у As в зоне Бриллюэна по сравнению с соответствующими поверхностями у Sb и Bi.

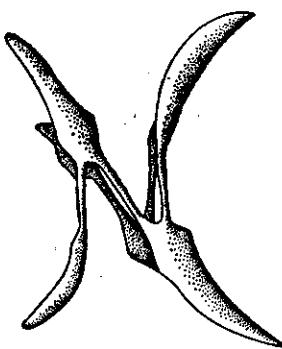


Рис. 4. Дырочная поверхность Ферми As.

Эффективные массы электронов в П. V группы анизотропны: они близки к m_0 в направлении вытянутости поверхности Ферми, тогда как в перпендикулярных направлениях $m = 10^{-2} m_0$. Эффективные массы дырок у Bi слабо анизотропны и составляют $\sim 10^{-1} m_0$. У As и Sb дырочные массы более анизотропны и составляют $\sim (10^{-1} - 10^{-2}) m_0$.

Графит. Кристаллическая решётка относится к гексагональной системе, описывается пространственной группой симметрии $P\bar{6}_3mc$ (C_{6v}^4). Выделенное направление (ось C) перпендикулярно слоям в решётке. Расстояние между атомами углерода в слое при $T = 300$ К $a = 1,415$ Å, межслоевое расстояние $c/2 = 3,5338$ Å. Зона Бриллюэна — гексагональная призма (рис. 5). Ось k_z совпадает с выделенным направлением

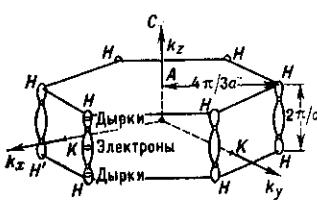


Рис. 5. Зона Бриллюэна графита.

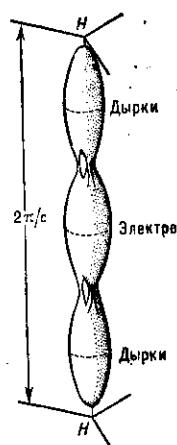


Рис. 6. Электронные и дырочные части поверхности Ферми графита.

иением C . Поверхность Ферми сильно анизотропна. Её электронные и дырочные части вытянуты вдоль боковых ребер HKH зоны Бриллюэна и близки по форме к гофрированным в базисной плоскости эллипсоидам (рис. 6). Отношение экстремальных сечений поверхности Ферми для электронов и дырок ~ 10 .