

PACS NUMBER: 71.18.+Y  
УДК 548.73/.75+621.315.592

ISSN 1729-4428

Г.П.Чуйко, Н.М. Чуйко, О.В.Дворник

## Густини станів та ефективні маси в межах узагальненої моделі Кілдал (на прикладі $Cd_3P_2$ )

*Херсонський державний технічний університет, факультет кібернетики,  
лабораторія теорії твердого тіла, Бериславське шосе, 24, 73008, Херсон, Україна,  
тел. +380-0552-326922, e-mail: olga\_dvortnik@mail.ru*

У межах узагальненої моделі Кілдал для кристалів з центром симетрії вперше формалізуються залежності густини станів та ефективних мас носіїв від енергії для актуальних зон (зона провідності s-типу та три валентні зони р-типу). Отримані замкнені алгоритми та вирази для розрахунків зазначених залежностей, в яких фігурують лише параметри узагальненої моделі Кілдал. Числові розрахунки густин станів виконані для фосфіду кадмію ( $Cd_3P_2$ ), перспективного лазерного матеріалу, для якого також вперше розраховані значення ефективних мас електронів, а також важких, легких та спин-відщеплених дірок ( $m^*/m_0 = 0,048$  та  $0,664, 0,155, 0,169$  відповідно). Розрахункова енергетична залежність ефективної маси електронів добре співпадає з експериментальними оцінками.

**Ключові слова:** зонна структура, густини станів, ефективні маси, сполуки  $A_3^{II}B_2^V$ , фосфід кадмію.

*Стаття постуила до редакції 19.05.2003; прийнята до друку 23.10.2003.*

### I. Вступ

Зонна модель Кілдал [1] спершу була розроблена для халькопїритів загальної хїмічної формули  $A_3^{II}B_2^VC_2^V$ . Пізніше вона застосовувалася для різноманїтних одновісних кристалів, зокрема і для сполук типу  $A_3^{II}B_2^V$  [2,3], які є об'єктом нашої уваги. Якщо автор [2] вживав відправний варіант моделі Кілдал, то далі у роботі [3] була запропонована узагальнена модель, яка враховує також і тетрагональну деформацію ґратки.

Серед поліморфних модифікацій сполук  $A_3^{II}B_2^V$  спостерігаються як фази з центром симетрії так і без центру симетрії. Легкість перебудови кристалїчної структури цих матеріалів пов'язана з наявністю в катїонній підґратці стехїометричних вакансій (рівно чверть всіх вузлів). Центр симетрії мають невпорядковані кубїчні фази, та частина упорядкованих тетрагональних. [3-6].

Сполуки типу  $A_3^{II}B_2^V$  отримали різноманїтне застосування в сучасній електронїці. Зокрема фосфід кадмію ( $Cd_3P_2$ ) віддавна знаний як перспективний лазерний матеріал з довжиною хвилі у межах одного з інфрачервоних „вікон прозорості” повітря [4,5], останнім часом був описаний як ефективний квантовий підсилювач світла для оптичних

волоконних лїній (або у вигляді імплементованих квантових точок, або у вигляді нанесеного на оптичне волокно плівкового покриття [7,8]).

Проте, у більшості випадків властивості цих матеріалів, і зокрема фосфіду кадмію, намагалися пояснювати, або у межах моделі Кейна [4,5,9], яка є коректною лише для кубїчних модифікацій, або у термінах спрощеної моделі Кілдал [1,2] без урахування суттєвої тетрагональної деформації ґратки. Зокрема, лазерний ефект у фосфїді кадмію виявилось неможливо пояснити у межах цих підходів без досить штучних припущень про обов'язкове існування та участь в процесах індукованого випромїнювання гіпотетичних домішкових (або дефектних) рівнів, близьких до вершини валентної зони [4,5].

Для інтерпретації широкого комплексу електричних, оптичних, фотоелектричних та деяких інших властивостей матеріалів критично важливим є знання енергетичних залежностей густини станів у актуальних зонах, а також ефективних мас носіїв заряду. Причому, відомо, що фундаментальні залежності густини станів від енергії лишаяються коректною характеристикою матеріалу навіть тоді, коли він втрачає дальній порядок і перестає бути кристалїчним [10].

З огляду на вищевикладене головним завданням нашого дослідження є формалїзація розрахунків

енергетичних залежностей густини станів та ефективних мас носіїв в межах узагальненої моделі Кілдал. Запропонований метод ілюструється на прикладі фосфіду кадмію тетрагональної модифікації з центром симетрії (просторова група симетрії  $P4_2/nmc$ ) аж до порівняння з експериментальними даними включно.

Результати, викладені у презентованій роботі, є частиною досліджень лабораторії теорії твердого тіла при кафедрі загальної та прикладної фізики Херсонського державного технічного університету з тематики «Спектри одночастинкових збуджень одновісних кристалів» (номер державної реєстрації – 0102U006721).

## II. Теорія

Узагальнене дисперсійне рівняння для тетрагональних модифікацій з центром симетрії зручно записати у сферичній системі координат  $(k, \theta, \varphi)$  - з полярною віссю, що співпадає за напрямом з головною віссю симетрії кристалу, у вигляді [3]:

$$k_{\varepsilon, \theta}^2 = \frac{\gamma(\varepsilon)}{f_1(\varepsilon) \sin^2 \theta + f_2(\varepsilon) \cos^2 \theta} \quad (1)$$

або у дещо іншій формі:

$$k_{\varepsilon, u}^2 = \frac{\gamma(\varepsilon)}{f_1(\varepsilon) + (f_2(\varepsilon) - f_1(\varepsilon)) u^2}, \quad (2)$$

де  $u = \cos \theta$ , а фактори з правих частин рівнянь (1,2) залежать від енергії носіїв  $\varepsilon$  (її відлік ведеться від вершини зони важких дірок) та параметрів моделі таким чином:

$$f_1(\varepsilon) = P^2 ((\varepsilon + \Delta/3)(\varepsilon + \delta + \Delta/3) - \eta^2 \Delta^2 / 9), \quad (3)$$

$$f_2(\varepsilon) = \eta^4 P^2 \varepsilon (\varepsilon + 2\Delta/3), \quad (4)$$

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon(\varepsilon - \varepsilon_g) \times \left[ (\varepsilon + 2\Delta/3)(\varepsilon + \delta + \Delta/3) - 2\eta^2 \Delta^2 / 9 \right]. \quad (5)$$

Де параметри  $\varepsilon_g, P, \Delta$  - відомі з класичної моделі Кейна [9],  $\delta$  - знаний з роботи Кілдал [1] параметр кристалічного поля, а параметр Полуботка [11] (показник тетрагональної дисторсії ґратки -  $\eta$ ) для тих поліморфних модифікацій кристалів  $A_3^{II}B_2^V$ , які належать до кристалічного класу  $4/mmm$ , має наступний вираз через сталі тетрагональної ґратки  $a, c$ :

$$\eta = \frac{c}{a\sqrt{2}}. \quad (6)$$

Якщо покласти в рівняннях (2-4)  $\eta = 1$ , то отримаємо рівняння дисперсії звичної моделі Кілдал [1], а при додатковому припущенні  $\delta = 0$ , рівняння (1,2) спрощуються до моделі Кейна [9]. Зауважимо, що поміж параметрами  $\delta$  та  $\eta$  існує

функціональний зв'язок, наведений у [3] і використаний у подальших розрахунках.

Оскільки рівняння (1,2) записані в сферичній системі координат  $(k, \theta, \varphi)$ , то зрозуміло, що  $0 \leq k \leq \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , тобто стандартно для цієї системи. Більше того, умова невиходу модуля хвильового вектору  $k$  поза межі першої зони Бріллюена накладає навіть жорсткіше обмеження на цю змінну:  $0 \leq k \leq \frac{\pi}{a\sqrt{2}}$ , яке ми використаємо далі.

Незалежність дисперсійних рівнянь від кута  $\varphi$  означає, що поверхні рівної енергії є поверхнями обертання навколо полярної осі, котра співпадає з віссю четвертого порядку та напрямом  $\theta = 0$  (або  $u = 1$ ).

Кількість квантових станів  $dN$ , що містяться в інтервалі енергії від  $\varepsilon$  до  $\varepsilon + d\varepsilon$ , у розрахунку на одиницю об'єму, можна записати у такому вигляді [12]:

$$dN = \frac{s d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad (7)$$

де  $s$  - кратність виродження станів в актуальній енергетичній зоні,  $d^3 k = dk_x dk_y dk_z$  - елемент об'єму в  $k$ -просторі, котрий у сферичній системі координат є таким:

$$d^3 k = k^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (8)$$

Підставимо рівняння (8) у (7) і, користуючись незалежністю закону дисперсії (1), тобто величини  $k_{\varepsilon, \theta}^2$  від сферичного кута  $\varphi$ , візьмемо інтеграл від (7) по цьому куту. Таке інтегрування дає множник  $2\pi$  у чисельнику (7). У підсумку матимемо наступний вираз для інтегрованої по куту  $\varphi$  кількості квантових станів, якщо додатково врахуємо, що  $\sin \theta d\theta = -du$ :

$$dN(\varepsilon, u) = - \frac{sk^2(\varepsilon, u) \left( \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon du}{(2\pi)^2}. \quad (9)$$

Далі маємо з (9) після інтегрування по змінній  $1 \geq u \geq -1$  наступний вираз:

$$dN(\varepsilon) = \frac{s d\varepsilon}{(2\pi^2)} \int_{-1}^1 k^2(\varepsilon, u) \left( \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} \right) du. \quad (10)$$

Враховуючи той факт, що підінтегральний виразу (10) залежить від квадрату змінної інтегрування, тобто  $u^2$ , отже, підінтегральна функція є парною і симетричною відносно точки  $u = 0$ , а також те, що густина станів дорівнює  $g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ , останню формулу можна переписати у дещо більш компактному вигляді:

$$g(\varepsilon) = \left( \frac{s}{6\pi^2} \right) \int_0^1 \frac{\partial k^3(\varepsilon, u)}{\partial \varepsilon} du. \quad (11)$$

Нарешті, змінюючи місцями інтегрування та

диференціювання підінтегрального виразу, а також враховуючи те, що  $s=2$  у випадку кристалів з центром симетрії, отримуємо вираз для густини станів у наступному вигляді:

$$g(\epsilon) = \left( \frac{1}{3\pi^2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial \epsilon} \int_0^1 k^3(\epsilon, u) du \right). \quad (12)$$

Формула (12) є досить загальною, вона має місце незалежно від конкретного вигляду функції  $k^3(\epsilon, u)$ , при умові, що на інтервалі інтегрування ( $0 \leq u \leq 1$ ), функція під інтегралом не потерпає розриву.

В конкретній ситуації закону дисперсії, що заданий рівнянням (2), це еквівалентно припущенню, що знаменник (2) не обертається в нуль у якійсь точці саме на цьому інтервалі. Припустимо спочатку, що ми знаходимо густину станів саме на такому інтервалі. Тоді, підставляючи (2) у вираз (12), після простих перетворень та взяття інтегралу, який у цьому випадку можна отримати через елементарні функції стандартними методами математичного аналізу, можна записати наступний вираз для густини станів:

$$g_1(\epsilon) = \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left( \left( \frac{\gamma(\epsilon)}{3\pi^2 f_1(\epsilon)} \right) \sqrt{\frac{\gamma(\epsilon)}{f_2(\epsilon)}} \right). \quad (13)$$

Якщо ж на інтервалі інтегрування знаменник у виразі (2) обертається в нуль в певній точці інтервалу, то формально в такій точці  $k^2 \rightarrow \infty$ , а інтеграл, котрий фігурує в (12), розходиться на верхній межі.

Проте, вище ми обмежили модуль хвильового вектора розмірами першої зони Брілюена. Тому інтегрування у виразі (12) в такому разі слід проводити лише у межах  $0 \leq u \leq u_m$ , причому верхня межа інтегралу з (12), із урахуванням обмеження на модуль хвильового вектору, визначена наступним виразом:

$$u_m(\epsilon) = \sqrt{\frac{f_1(\epsilon) - 2\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \gamma(\epsilon)}{f(\epsilon)_1 - f_2(\epsilon)}}, \quad (14)$$

причому користуватися формулою (13) не можна лише на тих інтервалах енергій, де виконуються умови:

$$0 \leq u_m(\epsilon) \leq 1. \quad (15)$$

Проте, і у межах  $0 \leq u \leq u_m$  інтеграл у формулі (12) все ще можна виразити через елементарні функції. Вираз для густини станів в такому випадку є дещо інакшим:

$$g_2(\epsilon) = \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left( \left( \frac{\gamma(\epsilon)}{3\pi a f_1(\epsilon)} \right) \sqrt{\frac{f_1(\epsilon) - 2\left(\frac{a}{\pi}\right)^2 \gamma(\epsilon)}{f_1(\epsilon) - f_2(\epsilon)}} \right). \quad (16)$$

Зрозуміло, що у (13) та (16) зовнішнє диференціювання можна в принципі виконати до кінця, і таким шляхом отримати вирази для густин станів у розгорнутому вигляді. Втім формули стають при цьому надзвичайно громіздкими та незручними для користування, і тому вони тут не наводяться.

Ефективні маси густини станів в актуальних зонах можна отримати, виходячи з двох відомих виразів:

$$m(\epsilon) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{dk^2(\epsilon)}{d\epsilon} \right), \quad (17)$$

$$3\pi^2 g(\epsilon) = \frac{dk^3(\epsilon)}{d\epsilon}. \quad (18)$$

Нехай  $\epsilon_m$  – екстремум актуальної зони, а  $\epsilon$  – енергетичний рівень в цій зоні. Тоді кількість квантових станів у цьому інтервалі енергій є:

$$N(\epsilon) = \int_{\epsilon_m}^{\epsilon} g(\epsilon) d\epsilon. \quad (19)$$

Комбінуючи (17-19) неважко отримати простий вираз для ефективної маси густини станів на певному енергетичному рівні в актуальній зоні:

$$m(\epsilon) = \frac{2\pi^2 \hbar^2 g(\epsilon)}{(3\pi^2 N(\epsilon))^{2/3}}. \quad (20)$$

Причому, в залежності від виконання (чи невиконання) нерівностей (15) у вирази (19,20) треба підставляти або функцію  $g_1(\epsilon)$  з рівняння (13), або функцію  $g_2(\epsilon)$  з рівняння (16).

### III. Результати розрахунків та їх обговорення

Параметри дисперсійного рівняння (2) для фосфіду кадмію, використані у наших обчисленнях наведені у таблиці 1.

Величини, наведені у таблиці, зокрема і величина  $\delta(\eta)$ , були наведені у [3].

Насамперед варто розглянути розподіл дозволених та заборонених станів на фазовій

Таблиця 1

Параметр, одиниці виміру	$\epsilon_g$ , eV	$\Delta$ , eV	P, eVm	$\eta$	$\delta(\eta)$ , eV
Числове значення	0,59	0,15	$7,2 \cdot 10^{-10}$	0,9909	0,023

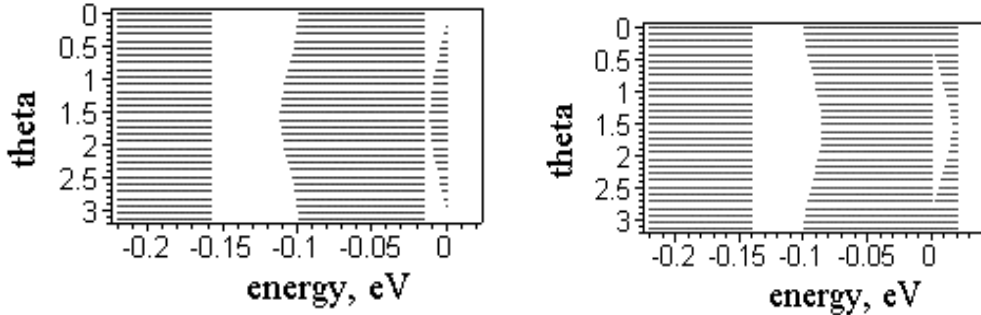


Рис. 1. Розподіл дозволених та заборонених станів у валентних зонах: ліва частина для  $\delta > 0$ , права –  $\delta < 0$ .

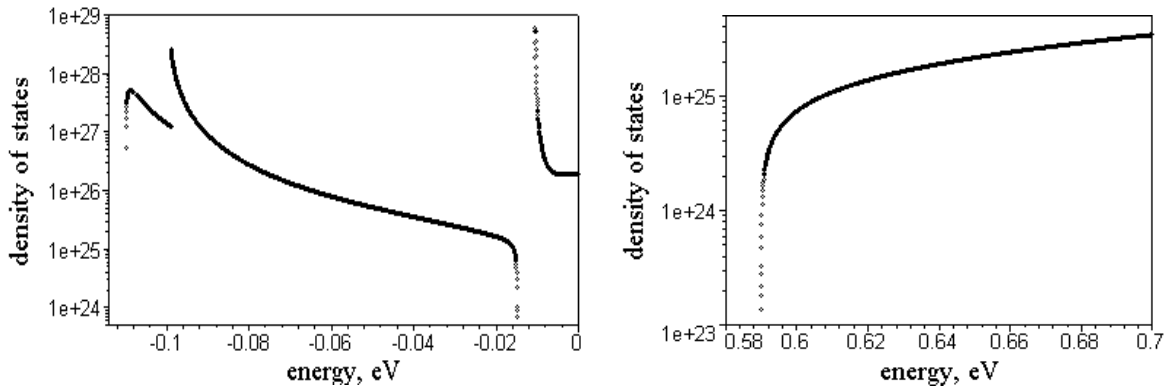


Рис. 2. Густини станів: зліва – для важких та легких дірок, справа – для зони провідності.

площині „енергія-напрямок” (площина  $(\epsilon, \theta)$ ), який є просто проекцією на відповідну площину поверхні, що задається функцією (1) та додатковими нерівностями:

$$0 \leq k^2(\epsilon, \theta) \leq \frac{\pi^2}{2a}. \quad (21)$$

На рис. 1 (ліва частина) показаний розподіл дозволених (заштриховані) та заборонених станів для трьох валентних зон фосфіду кадмію з використанням параметрів табл. 1. Як видно з малюнку, з трьох валентних зон р-типу дві зони мають обмежену ширину (надзвичайно вузька зона важких дірок та трохи ширша зона легких дірок), тоді як зона спін-орбітально відщеплених дірок необмежена за енергією у лівий бік шкали. Максимальні ширини зон важких дірок та легких дірок спостерігаються у напрямі  $\theta = \frac{\pi}{2}$  (тобто перпендикулярно до головної осі кристалу) і складають відповідно 0,0105 еВ. та 0,0972 еВ.. Зона спін-орбітально відщеплених дірок (як і зона провідності) є ізотропними з цієї точки зору, іншими словами положення їх екстремумів не залежить від напрямку (від сферичного кута  $\theta$ ).

Рис. 1 (права частина) показує вплив на розподіл дозволених станів та на анізотропію країв зон такого важливого параметру розрахунку як параметр Кілдал –  $\delta(\eta)$ . На рис. 1(права частина) показаний розподіл станів, отриманий у припущенні, що

$\delta = -0,023$  еВ., інакше кажучи відрізняється від параметру Кілдал рис. 1 (ліва частина) лише знаком. Як видно з рис. 1 найбільш серйозний вплив зміни знаку параметру Кілдал спостерігається на анізотропію країв, їх положення на шкалі енергій та на ширину зон саме для важких та легких дірок, тоді як зона провідності та зона спін-орбітально відщеплених дірок виявилися практично нечутливими до такої зміни.

Варто зауважити, що у моделі Кейна ( $\delta = 0, \eta = 1$ ) зона важких дірок вироджена із вершиною зони легких дірок і має нульову ширину. Неважко переконатися також, що жодної анізотропії країв діркових зон у межах цієї моделі не існує, хоча зона легких дірок також має обмежену ширину на шкалі енергій.

На рис. 2 наведені залежності густини станів у діркових зонах (важких та легких дірок, рис. 2 – ліва частина) та у зоні провідності (рис. 2 – права частина). Криві розраховувалися за наведеним вище алгоритмом (тобто в залежності від виконання нерівностей (15), або за виразом (13), або за виразом (16)).

Як видно з рис. 2 функція густини станів зони провідності має одну єдину особливість точно на дні (на краю) зони, де ця функція має мінімум (за класифікацією Ван-Хова це сингулярна точка типу  $M_0$ ).

Густина станів у двох майже вироджених діркових зонах має два розриви різного типу, помітні з рис. 2 (ліва частина). Перший з них, типовий розрив

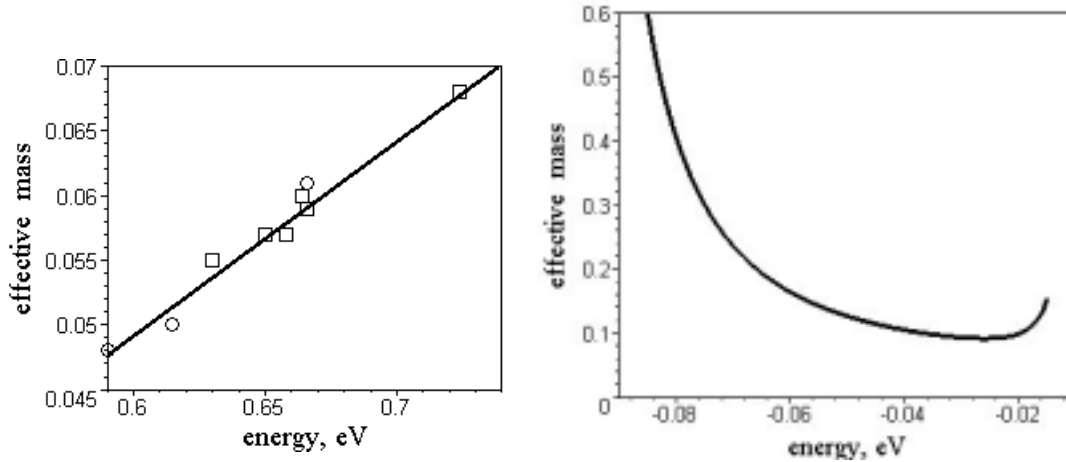


Рис. 3. Залежність ефективної маси електронів (зліва) та легких дірок (справа) від енергії.

Таблиця 2

$m_e$	$m_{hh}$	$m_{lh}$	$m_{so}$
$0,048m_0$	$0,664m_0$	$0,155m_0$	$0,169m_0$

другого роду, пов'язаний з існуванням надвужкої забороненої смужки енергій поміж двома зонами, існування якої видно також з рис. 1. Відмітимо також незвичний вигляд функції густини станів у довкіллі вершини зони важких дірок: ця функція не падає до нуля, а має певну ненульову межу. Дно зони важких дірок, як показує аналіз, є одночасно як точкою розриву функції густини станів так і точкою її сингулярності, а втім не точкою екстремуму. Зауважимо також досить високі значення густини станів у вузькій зоні важких дірок, яка приблизно на порядок вища від типових значень густини станів для зони провідності, наприклад.

Другий розрив функції густини станів, виглядає як типовий стрибок (розрив першого роду) і пов'язаний з топологічним переходом від поверхонь рівної енергії у вигляді еліпсоїду обертання до поверхонь типу однопорожнинного гіперболоїду обертання (такі ж поверхні рівної енергії характерні і для зони важких дірок). Цей топологічний перехід відбувається поблизу дна зони легких дірок і у точці топологічного переходу відбувається також перехід типу  $g_1(\epsilon) \leftrightarrow g_2(\epsilon)$ , описаний вище і пов'язаний з виконанням нерівностей (15).

Вузький пік густини станів, пов'язаний з цим переходом у певних випадках може виглядати як потужний дискретний рівень на фоні станів діркової зони, так само як, до речі, і надзвичайно вузька зона важких дірок. Особливо, якщо взяти до уваги теплове розмиття рівнів енергії, яке при достатньо високих температурах практично знищує надто вузьку заборонену зону поміж важкими та легкими дірками.

На рис. 3 (ліва частина) показані експериментальні (запозичені з [4]) оцінки та теоретичні (лінія) залежності ефективної маси

електронів зони провідності від енергії, які, як видно, добре узгоджуються поміж собою. Згідно до моделі Кейна залежність  $m^*(\epsilon)$  в зоні провідності повинна бути практично лінійною. Проте, наші розрахунки для зони легких дірок (рис. 3 – права частина) не підтверджують такої залежності для діркових зон. На рисунку 3 (права частина) помітна явна не лінійність, і навіть немонотонність залежності ефективної маси легких дірок від енергії, відрахованої вглиб зони. Отже, майже лінійна залежності  $m^*(\epsilon)$  спостерігається тільки для електронів зони провідності. Діркові зони, принаймні в нашому варіанті узагальноної моделі Кілдал, демонструють нелінійні та немонотонні залежності ефективних мас густини станів від енергії дірок.

Значення ефективних мас електронів та дірок у довкіллі екстремумів зон наведено у таблиці 2. Зазначимо, що ефективні маси для діркових зон розраховані нами вперше, і відповідних експериментальних даних для порівняння нам, на жаль, знайти не вдалося.

З наведених вище міркувань можна зробити наступний головний висновок: запропонована узагальнена модель Кілдал точніше і детальніше описує саме діркові зони досліджених матеріалів. Тоді як параметри зони провідності менш чутливі до вибору моделі. Отже, узагальнена модель Кілдал повинна бути більш адекватною для матеріалів р-типу провідності, наприклад,  $Zn_3P_2$  або  $Zn_3As_2$ .

Окрім того, результати наших розрахунків дозволяють природним шляхом описати лазерний ефект виродженому фосфіду кадмію n-типу. Рівень Фермі у зоні провідності, вузька зона важких дірок та трохи ширша зона легких дірок разом формують

класичну трирівневу схему індукованого випромінювання, незалежну від наявності, чи відсутності домішкових, чи то дефектних рівнів. Експериментальна ширина піків стимульованої люмінесценції у цьому матеріалі при низьких температурах (яка дорівнює приблизно 0,01 еВ [4,5]) добре співпадає з максимальною шириною зони важких дірок – 0,0105 еВ., яка отримана нами вище.

**Чуйко Г.П.** – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної та прикладної фізики;

**Чуйко Н.М.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри вищої математики;

**Дворник О.В.** – магістр фізики, асистент кафедри загальної та прикладної фізики.

- [1] H.Kildal. Band structure of CdGeAs<sub>2</sub> near  $\mathbf{k} = 0$ . // *Phys. Rev.*, **B10**(12), pp.5082-5087 (1974).
- [2] J. Cisowski. Level ordering in  $II_3V_2$  semiconducting compounds // *Phys. Stat. Sol.*, **B111**(1), pp. 289-293 (1982).
- [3] Г.П. Чуйко, О.В. Дворник. Зв'язок поміж кристалічним розщепленням валентних зон та тетрагональною деформацією ґратки для сполук  $A_3^{II}B_2^V$  // Фізика і хімія твердого тіла, 2002, **3**, №4, 682-686.
- [4] С.И.Радауцан, Э.К.Арушанов, А.Н.Натепров, Г.П.Чуйко. *Арсенид и фосфид кадмия*. Штиница, Кишинев. 112 с. (1976).
- [5] В.Б.Лазарев, В.Я.Шевченко, Я.Х.Гринберг, В.В. Соболев. *Полупроводниковые соединения группы  $A^{II}B^V$* . Наука, М. 256 с. (1978).
- [6] E.K.Arushanov. Crystal Growth & Characterization of II-V Compounds. // *Progr Prog.Cryst.Growth Charact.*, **25**, pp.131-201 (1992).
- [7] R.Eichberger, A.Eychmuller, M.Giersig, A.Kornowski, H.Weller. Preparation and photophysics of strongly luminescing Cd3P2 quantum dots // *Journal of physical chemistry*, **100** (30), p. 12467-12471 (1996).
- [8] Dove, John F.; Russell, Harry; Kim, Jin-Sung; Nivartvong, Nitipun; Flattery, James; Keller, Douglas; Kornreich, Philipp G. Affiliation. Light amplification by a Cd<sub>3</sub>P<sub>2</sub> cylinder fiber // *Proc. SPIE*, **4216**, p. 62-66 (2001).
- [9] E.O.Kane. Band structure of Ibdium Antimonide // *Journ.Phys.Chem.Solids*, **1**, pp.249-261 (1957).
- [10] П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов, Физика твердого тела, ВШ, М., 477 с., (2000)
- [11] А.М.Полуботко. Зависимость параметров закона дисперсии Килдал-Боднара от величины тетрагонального сжатия в халькопиритах. // *ФТП*, **19**(4), с. 772-774 (1983).
- [12] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. М: Наука, 1976.-639 с.

G.P. Chuiko, N.M. Chuiko, O.V. Dvornik

## Densities of States and Effective Masses within Generalized Kildal Model (CD<sub>3</sub>P<sub>2</sub> AS an Example)

*Kherson State Technical University, Department of Cybernetics, Laboratory of solid state theory, Berislavske shosse, 24, 73008, Kherson, Ukraine, phone: +380-0552-326922, e-mail: olga\_dvornik@mail.ru*

The dependences of densities of states and effective masses on energy within the generalized Kildal's model have been formalized first time. It was performed for crystals with symmetry centre and for actual bands especially for the s-type conductivity band as well as for three p-type valence bands. The closed algorithms and the expressions for the calculations of mentioned above dependences have been obtained. Only the parameters of generalized Kildal-model contain in these expressions. The numerical calculations of the densities of states for the cadmium phosphide (Cd<sub>3</sub>P<sub>2</sub>) as a promising laser material and the calculations of the values of the electrons effective masses as well as of the heavy, light and spin-splitted holes ( $m^*/m_0 = 0.048$  and 0.664, 0.155, 0.169 respectively) has been performed at first time. The calculated energy dependence of electrons effective mass is well agreed with experimental examinations.