

ТЕРМОЭДС И ЭНЕРГИЯ АКТИВАЦИИ ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТИ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Pb_{0.78}Sn_{0.22}Te$ С БОЛЬШИМ СОДЕРЖАНИЕМ In

© С.А.Немов, В.И.Прошин, Ю.И.Равич

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 22 марта 1996 г. Принята к печати 1 апреля 1996 г.)

Температурная зависимость термоэдс в четверных твердых растворах $(Pb_{0.78}Sn_{0.22})_{1-y}In_yTe$ объясняется прыжковой проводимостью на основе формул, полученных методом эффективной среды. Произведенная оценка энергии активации прыжковой проводимости согласуется по порядку величины с полученной ранее путем анализа электропроводности на основе результатов теории протекания. Обсуждаются условия применимости использованных формул.

В работе [1] были получены экспериментальные температурные зависимости ряда кинетических коэффициентов в четверных твердых растворах $(Pb_{0.78}Sn_{0.22})_{1-y}In_yTe$ с содержанием индия y от 2 до 20 ат%. Анализ этих результатов привел к выводу о сложном характере энергетического спектра в исследуемых материалах вблизи края зоны проводимости, с которым перекрываются как делокализованные, так и локализованные электронные состояния. Для интерпретации полученных данных был привлечен прыжковый механизм проводимости по сильно локализованным состояниям индия.

Далее, нами было показано [2], что в диапазоне температур $100 \div 300$ К при концентрации индия $y = 0.03 \div 0.15$ электропроводность может быть количественно описана на основе предположения, что основной вклад в проводимость вносит прыжковая проводимость с перескоками между соседними примесными атомами (с постоянной энергией активации) [3,4]. Зависимости проводимости от температуры T и содержания индия N_{In} соответствовали формулам, полученным методами теории протекания [3]. Анализ концентрационной зависимости прыжковой проводимости позволил наиболее прямым образом найти радиус сильно локализованных примесных состояний In .

Между тем, хотя представления о сложной немонотонной зависимости плотности состояний от энергии вблизи края зоны проводимости позволили качественно объяснить наблюдаемую смену знака термоэдс

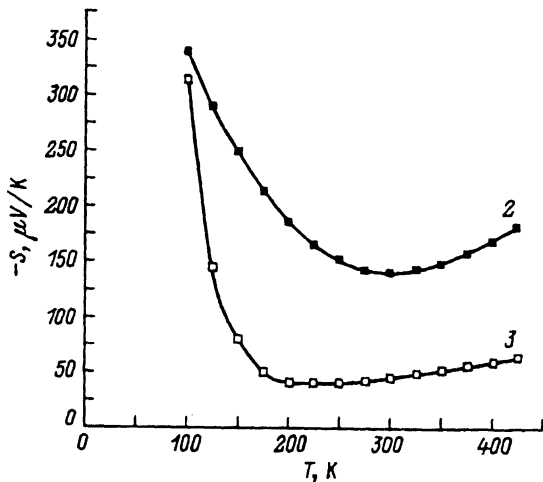


Рис. 1. Температурные зависимости коэффициента термоэдс S в образцах $(\text{Pb}_{0.78}\text{Sn}_{0.22})_{1-y}\text{In}_y\text{Te}$. Номера у кривых соответствуют содержанию индия y в ат. %.

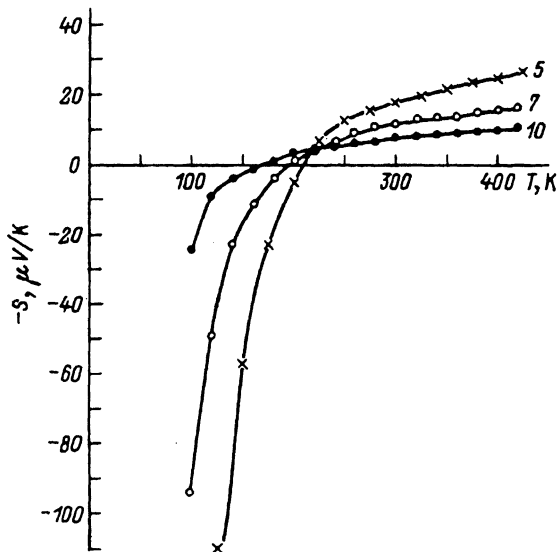


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для $y = 0.05, 0.07$ и 0.1 .

при изменениях температуры и содержания индия, измеренные температурные зависимости термоэдс S (см. рис. 1, 2) не вполне соответствовали формулам теории протекания [4,5]. При $T \lesssim 200$ К термоэдс изменялась приблизительно обратно пропорционально T , что соответствует механизму проводимости с постоянной длиной прыжка. Однако при $T \gtrsim 200$ К термоэдс была пропорциональна T , как в металлах и сильно вырожденных полупроводниках, в то время как теория протекания предсказывает уменьшение термоэдс S при повышении температуры.

В данной работе температурная зависимость термоэдс анализируется с использованием формул, полученных методом эффективной сре-

ды. Как показано в работе [6], метод эффективной среды дает для термоэдс при прыжках между ближайшими соседями формулу

$$S = -\frac{5}{6} \frac{k_0}{e} \left(\frac{\varepsilon_a^2(0)}{2k_0T} + \frac{2}{3} \pi^2 k_0 T \right) \left(\frac{d \ln g}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\mu}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_a(0)$ — энергия активации прыжковой проводимости, экстраполированная к $T = 0$, $g(\varepsilon)$ — функция плотности локализованных состояний, μ — химический потенциал. Формула (1) дает переход от зависимости $S \sim T^{-1}$ к $S \sim T$ при увеличении температуры. Если плотность состояний вблизи химического потенциала мало изменяется с температурой, то величина термоэдс $|S|$ имеет минимум при температуре

$$T_{\min} = \sqrt{3} \varepsilon_a(0) / 2\pi k_0. \quad (2)$$

По экспериментальному значению T_{\min} (рис. 1) можно оценить энергию активации $\varepsilon_a(0)$. В частности, при содержании индия 3 ат% наблюдается минимум $|S|$, и по формуле (2) получаем $\varepsilon_a(0) = 62$ мэВ, что по порядку величины соответствует энергии активации проводимости $\varepsilon_3 = 44$ мэВ [2]. При более высоких содержаниях In (рис. 2) вместо минимума $|S|$ наблюдается смена знака термоэдс, что можно качественно объяснить сменой знака производной $(dg/d\varepsilon)_{\varepsilon=\mu}$. При резко немонотонной зависимости $g(\varepsilon)$ относительно небольшое смещение химического потенциала μ может привести к его переходу через максимум плотности состояний.

Таким образом, использование формулы (1), полученной методом эффективной среды, позволяет объяснить температурную зависимость термоэдс в области прыжковой проводимости и оценить энергию активации. Обсудим вопрос о применимости формул, используемых для анализа экспериментальных данных в [2] и в настоящей работе. Теория протекания при описании прыжковой проводимости с постоянной энергией активации применима, если вероятности прыжков между различными парами примесных состояний различаются очень сильно, причем соблюдаются неравенства [3]

$$2/aN_{\text{In}}^{1/3} > \varepsilon/k_0T > 1. \quad (3)$$

Поскольку фигурирующие в (3) величины входят в показатели экспоненты, неравенства (3) могут быть не очень сильными. Первая из величин в (3) оказывается малой благодаря сильной локализации примесных состояний с радиусом $a \approx 6 \text{ \AA}$ [2]. В частности при $T \approx 200 \text{ K}$, $y = 7 \text{ ат\%}$ получаем $2/aN_{\text{In}}^{1/3} \approx 3.4$, $\varepsilon_3/k_0T \approx 2$, т. е. неравенства (3) соблюдаются, но не являются сильными.

Таким образом, мы находимся вблизи предела применимости формул теории протекания, что в то же время благоприятно с точки зрения использования метода эффективной среды. Последний применим, если вероятности прыжков между различными парами примесных состояний различаются не слишком сильно [6]. В то же время не следует ожидать большего результата, чем полуколичественное согласие произведенной оценки энергии активации с полученной ранее.

Список литературы

- [1] С.А. Немов, Ю.И. Равич, А.В. Березин, В.Э. Гасумянц, М.К. Житинская, В.И. Прошин. ФТП, **27**, 299 (1993).
- [2] Ю.И. Равич, С.А. Немов, В.И. Прошин. ФТП, **29**, 1448 (1995).
- [3] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [4] H. Böttger, V.V. Bryksin *Hopping Conduction in Solids* (Berlin, Akademie Verlag, 1985).
- [5] Н. Мотт, Э. Левис. *Электронные процессы в некристаллических веществах* (М., Мир, 1982) т. 1.
- [6] N.T.E. Whall. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **14**, L887 (1981).

Редактор Т.А. Полянская

Thermopower and activation energy of hopping conduction in solid solution $Pb_{0.78}Sn_{0.22}Te$ with high In content

S.A Nemov, V.I. Proshin, Yu.I. Ravich

St.Petersburg State Technical University, 195251 St.Petersburg, Russia

The temperature dependence of thermopower in the fourfold solid solution $(Pb_{0.78}Sn_{0.22})_{1-y}In_yTe$ is explained by hopping conduction through formulae deduced from effective-medium approximation. The estimation of the activation energy of hopping conduction has been performed. The obtained value is the same order as one derived earlier from analysis of conductivity on the base of the results of percolation theory. The conditions of applicability of the used formulae have been discussed.
