

УДК 537.311.33

© 1992

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОДВИЖНОСТЕЙ И КОНЦЕНТРАЦИЙ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА В ВИСМУТЕ

Ю. И. Равич, А. В. Панопорт

С учетом непараболичности зоны проводимости и рекомбинационного рассеяния электронов и T -дырок вычисляются собственные концентрации, подвижности, термоэдс, факторы Холла и магнитосопротивления, связанные с энергетическими зависимостями времен релаксации носителей, при температурах 77—300 К. Вычисленные факторы используются при определении подвижностей и концентраций в нелегированном висмуте из результатов гальваномагнитных измерений. Учет этих факторов существенно изменяет полученные ранее величины подвижностей и концентраций.

В работе [1] был произведен расчет кинетических коэффициентов для нелегированного висмута на основе теоретической модели, учитывающей сильную непараболичность электронной и дырочной L -зон и рекомбинационное (межзонное) рассеяние электронов и T -дырок (наряду с акустическим). Используя три подгоночных параметра, характеризующих рассеяние, авторы [1] добились согласия теории с экспериментом для совокупности большого числа кинетических коэффициентов в магнитном поле при температуре 77 К. Возникает вопрос о возможности понять с помощью развитой модели явления переноса в области более высоких температур. Заметим, что с точки зрения использования сплавов Bi—Sb в термоэлектрических устройствах наибольший интерес представляет интервал температур порядка 100—200 К.

Расчеты, проведенные в [1], показали также, что факторы Холла и магнитосопротивления, обусловленные энергетической зависимостью времени релаксации, благодаря непараболичности зон значительно отличаются от единицы при температурах более 100 К. Это отличие обычно не учитывается при определении подвижностей и концентраций носителей тока в висмуте из совокупности гальваномагнитных коэффициентов в слабом магнитном поле [2–6]. В работе [7] при анализе гальваномагнитных эффектов расчет зависимости времени релаксации электронов от энергии, проведенный на основе «квазипараболической» модели, дал значения факторов Холла и магнитосопротивления, слабо отличающиеся от единицы, и подвижности и концентрации носителей, близкие к полученным ранее [5]. В статье [1] приводятся аргументы в пользу того, что «квазипараболическая» модель не может быть использована для расчета кинетических коэффициентов. Таким образом, анализ гальваномагнитных коэффициентов с целью определения подвижностей и собственной концентрации носителей в висмуте должен быть произведен заново с учетом реальных значений факторов Холла и магнитосопротивления.

В настоящей работе производится расчет подвижностей электронов и дырок, факторов Холла и магнитосопротивления, собственной концентрации носителей и термоэдс в нелегированном висмуте в температурном интервале 77—300 К. Используя вычисленные величины факторов Холла и магнитосопротивления, мы определяем подвижности и собственную концентрацию из экспериментальных величин гальваномагнитных коэффициентов в слабых магнитных полях и

сравниваем полученные величины с расчетными. Поскольку для обработки результатов гальваномагнитных измерений требуется расчет факторов Холла и магнитосопротивления, обе части задачи (расчет и анализ экспериментальных данных) находятся в неразрывной связи и решаются одновременно. Все же определенные из гальваномагнитных коэффициентов величины для краткости изложения мы будем далее называть «экспериментальными».

1. Основные соотношения

Как и в работе [1], для описания L -зон мы используем двухзонную эллипсоидальную модель непараболичности, зону T -дырок считаем параболической. Формулы для времен релаксации L -электронов и T -дырок учитывают взаимные переходы между дырочной T -зоной и тремя электронными L -подзонами

$$\begin{aligned} \tau_N^{-1} = C_N \left(\frac{k_0 T}{1 \text{ мЭВ}} \right)^{3/2} m_{dL}^{*3/2} \left[\varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) \right]^{1/2} \left(1 + 2 \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) + \\ + C_R \left(\frac{k_0 T}{1 \text{ мЭВ}} \right)^{3/2} m_{dT}^{*3/2} (\varepsilon_{LT} - \varepsilon)^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \tau_P^{-1} = C_P \left(\frac{k_0 T}{1 \text{ мЭВ}} \right)^{3/2} m_{dT}^{*3/2} (\varepsilon_{LT} - \varepsilon)^{1/2} + \\ + 3C_R \left(\frac{k_0 T}{1 \text{ мЭВ}} \right)^{3/2} m_{dL}^{*3/2} \left[\varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) \right]^{1/2} \left(1 + 2 \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right). \end{aligned} \quad (2)$$

В приведенных формулах энергии ε электронов в обеих зонах отсчитываются от края L -зоны вверх, т. е. энергия T -дырок равна $\varepsilon_P = \varepsilon_{LT} - \varepsilon$, где ε_{LT} — величина перекрытия L - и T -зон. Величина ε_g , характеризующая непараболичность L -зон, равна энергетической щели в точке L зоны Бриллюэна. Все энергетические величины в (1) и (2) выражаются в единицах $k_0 T$. (Далее энергетические зазоры в обычных единицах обозначаются E_g и E_{LT}).

Размерность параметров рассеяния C_N , C_P и C_R совпадает с размерностью обратных времен релаксации. Вместо C_R , как и в [1], мы будем употреблять безразмерный параметр $x = C_R / C_N$.

Величины m_{dL}^* и m_{dT}^* представляют собой эффективные массы плотности состояний для одного эллипсоида L - и T -зоны соответственно в единицах массы свободного электрона m_0 .

Факторы Холла и магнитосопротивления вычисляются по формулам

$$A = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}, \quad M = \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle^3}, \quad (3)$$

где угловые скобки означают соответствующее усреднение по энергии. Выражения для средних величин, а также для концентраций и различных кинетических коэффициентов в случае используемой нами простой модели непараболичности хорошо известны, и мы не будем их выписывать.

2. Исходные параметры и схема расчета

К сожалению, мы не располагаем достаточно полной и точной информацией о температурных изменениях всех параметров зонной структуры, которые требуют-

ся в наших расчетах. Для быстро растущей температуры энергетической щели между L -зонами мы будем использовать результаты применения магнитооптического метода [8]

$$E_g = (13.6 + 2.1 \cdot 10^{-3}T + 2.5 \cdot 10^{-4}T^2), \text{ мэВ.} \quad (4)$$

Энергетический зазор E_{LT} зависит от температуры, по-видимому, слабее, чем E_g (об этом можно косвенно судить по зависимости E_{LT} от давления [9]). Мы будем считать E_{LT} не изменяющимся с температурой и равным 39.2 мэВ [10, 11]. Не зависящими от температуры предполагаются и параметры рассеяния C_N , C_P , x , которые подбираются при 77 К, как это делалось в работе [1].

Трудности вызывает решение вопроса о температурной зависимости эффективных масс плотности состояний электронов и дырок. Если предполагать, что эффективная масса плотности состояний электронов растет с температурой так же быстро, как циклотронная масса, измеренная магнитооптическим методом [8], то расчетная подвижность электронов, чувствительная к выбору эффективной массы, оказывается значительно ниже определенной из гальваномангнитных коэффициентов. Если же считать эффективную массу электронов приблизительно пропорциональной $E_g(T)$, то расчетная подвижность получается больше экспериментальной. Что касается эффективной массы T -дырок при $T > 100$ К, то о ней вообще нет никакой информации. В такой ситуации нам пришлось подбирать эффективные массы электронов и дырок при каждой температуре в области $T > 100$ К, используя экспериментальные значения подвижностей. Обе эффективные массы m_{dL}^* и m_{dP}^* оказываются растущими с температурой. В отличие от [1] для m_{dL}^* и m_{dP}^* при 77 К мы приняли несколько более высокие значения, чем при $T = 0$: $m_{dL}^* = 1.12 \cdot 10^{-2} m_0$ и $m_{dP}^* = 0.16 m_0$. Подбирая параметры рассеяния при 77 К, как это описано в [1], мы получили $x = 0.3$, $C_N = 4.8 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$, $C_P = 0.8 \cdot 10^{11} \text{ c}^{-1}$.

Таким образом, схема расчета в каждой температурной точке в интервале от 100 до 300 К выглядит следующим образом. Задаваясь значениями m_{dL}^* и m_{dP}^* , прежде всего вычисляем химпотенциал электронов ζ и собственную концентрацию носителей N . Затем производим расчет факторов Холла и магнитосопротивления электронов (A_N и M_N) и дырок (A_P и M_P), подвижность электронов μ_3 вдоль оси эллипсоида, близкой к тригональной оси кристалла, и подвижность дырок ν_1 в направлении, перпендикулярном тригональной оси.

Далее, используя экспериментальные значения гальваномангнитных коэффициентов, определяем подвижности и концентрации носителей тока. Для этого из измеренных значений коэффициентов магнитосопротивления в слабом магнитном поле ρ_{ik} , ρ_{ikl} и ρ_{iklm} вычисляем коэффициенты магнитопродоводимости σ_{ik} , σ_{ikl} и σ_{iklm} . Из них методом наименьших квадратов, как в [2-6], но в отличие от этих работ используя вычисленные значения факторов A_N , M_N , A_P и M_P , определяем компоненты подвижности электронов в направлениях главных осей эллипсоидов μ_1 , μ_2 и μ_3 , подвижность дырок ν_1 и концентрацию N . Полученные таким образом экспериментальные значения μ_3 и ν_1 сравниваем с расчетными. При несоответствии полученных двумя способами величин изменяем исходные значения эффективных масс и повторяем весь расчет до тех пор, пока не добьемся совпадения.

Для проверки правильности произведенных расчетов вычисляем также термоэдс в направлении тригональной оси a_3 и сравниваем с экспериментальной, сопоставляем расчетную и экспериментальную величины собственной концентрации N для каждого значения температуры. Кроме того, мы обсуждаем, насколько подобранная нами температурная зависимость электронной эффективной массы соответствует экспериментальной зависимости циклотронной массы от темпера-

Таблица 1

Расчетные значения хиппотенциала, концентрации носителей тока и кинетических коэффициентов

T, K	$\zeta, \text{мЭВ}$	$N, 10^{23} \text{ м}^{-3}$	$\mu_3, \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	$\nu_1, \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	A_N	M_N	A_P	M_P	$-\alpha_3, \text{ мкВ}/\text{К}$
77	28.0	5.0	30.0	10.5	1.11	1.33	1.00	1.01	80
100	28.4	6.4	17.7	6.79	1.19	1.59	1.00	1.01	87
140	29.8	10.1	8.2	3.18	1.36	2.16	1.01	1.03	93
180	30.6	15.4	4.08	1.72	1.57	3.00	1.02	1.06	96
220	31.0	23.0	2.18	1.02	1.78	4.08	1.03	1.09	96
260	32.5	32.0	1.34	0.64	1.93	4.95	1.04	1.11	97
300	32.3	46.0	0.77	0.42	2.17	6.62	1.05	1.14	97

3. Обсуждение результатов

В табл. 1 приведены вычисленные при использовании эффективных масс, подобранных описанным в предыдущем разделе способом, следующие величины: хиппотенциал ζ , собственная концентрация носителей N , компоненты подвижностей электронов μ_3 и дырок ν_1 , факторов Холла и магнитосопротивления A_N , M_N , A_P и M_P и термоэдс α_3 . Факторы A_N и M_N для электронов растут с температурой и оказываются заметно больше единицы особенно в области температур 200—300 К, в то время как соответствующие факторы для дырок близки к единице.

В табл. 2 представлены полученные из гальваномагнитных коэффициентов методом наименьших квадратов с использованием расчетных значений факторов собственная концентрация N , подвижности электронов μ_1 и μ_3 и дырок ν_1 . Подвижность электронов в направлении большой оси эллипсоидов μ_2 более чем на порядок меньше μ_1 и μ_3 , поэтому точность ее определения из гальваномагнитных коэффициентов невелика и в табл. 2 она не приводится. Подвижность дырок в направлении тригональной оси ν_3 мы вообще исключили из величин, определяемых методом наименьших квадратов, считая, что она более чем на порядок ниже ν_1 в соответствии с коэффициентом анизотропии эффективных масс дырок $m_{3T}^*/m_{1T}^* = 11$ [12].

Из табл. 1, 2 следует, что подвижности μ_1 , μ_3 и ν_1 в области температур 100—300 К значительно ниже, чем полученные ранее без учета отличия факторов Холла и магнитосопротивления электронов от единицы [5]. Например, при 300 К авторы [5] нашли $\mu_1 = 3.2$ и $\mu_3 = 1.8 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, что в 2—3 раза превышает полученные нами величины.

Столь же сильно отличаются от имеющихся в литературе наши значения собственной концентрации N . Хотя отличие между полученными двумя способами величинами заметно (порядка 20% при высоких температурах), оно все же

Таблица 2

Концентрация и подвижности носителей тока, полученные из экспериментальных значений гальваномагнитных коэффициентов

T, K	$N, 10^{23} \text{ м}^{-3}$	$\mu_1, \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	$\mu_3, \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$	$\nu_1, \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$
77	5.4	51.0	30.0	10.4
100	7.3	30.0	17.7	6.71
140	12.0	12.6	8.0	3.14
180	19.1	6.0	4.01	1.74
220	28.6	3.2	2.17	1.03
260	40.4	1.9	1.28	0.64
300	58.1	1.0	0.77	0.42

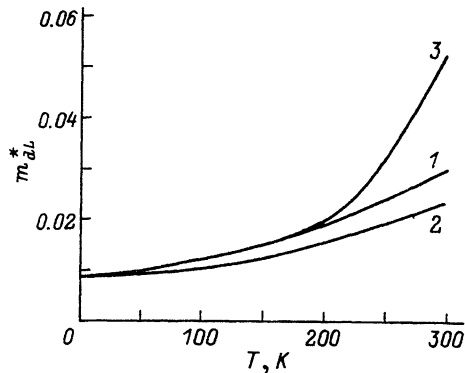


Рис. 1. Температурная зависимость эффективной массы плотности состояний электронов.

1 — наши результаты; 2 — эффективная масса, пропорциональная энергетической щели E_g ; 3 — эффективная масса плотности состояний, пропорциональная циклотронной эффективной массе, полученной магнитооптическим методом.

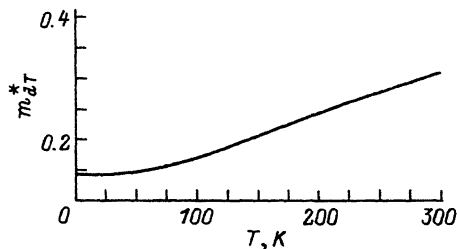


Рис. 2. Температурная зависимость эффективной массы плотности состояний T -дырок (наши результаты).

значительно меньше, чем различие приблизительно в два раза между нашими и полученными ранее результатами (например, для 300 К авторы [5] приводят величину $N = 24.5 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$).

Из вышеизложенного следует также, что подвижности и концентрации носителей изменяются с температурой быстрее, чем это считалось ранее. Если аппроксимировать температурную зависимость подвижностей в интервале температур 77—260 К степенным законом, то получается $\mu_3 \sim T^{-2.6}$ и $\nu_1 \sim T^{-2.3}$.

На рис. 1, 2 изображены температурные зависимости эффективных масс плотности состояний электронов и дырок, подобранные в результате описанного выше расчета. Из этих рисунков видно, что эффективная масса электронов растет с температурой быстрее, чем энергетический зазор E_g между электронной и дырочной зонами в точке L зоны Бриллюэна. В то же время в интервале температур 200—300 К мы получили значительно более медленный рост эффективной массы плотности состояний электронов по сравнению с циклотронной эффективной массой, полученной из магнитооптических измерений [8]. Полученная нами эффективная масса плотности состояний T -дырок также растет с температурой, хотя и медленнее, чем электронная эффективная масса.

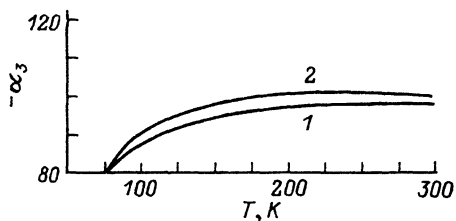


Рис. 3. Температурная зависимость термоэдс в направлении тригональной оси.

1 — наш расчет, 2 — эксперимент [13].

Проверкой правильности наших результатов по температурным зависимостям эффективных масс является сравнение расчетной и экспериментальной кривых для термоэдс как функции температуры. Из рис. 3 видно, что наша расчетная кривая близка к экспериментальной [13] во всем интервале температур 77—300 К.

Список литературы

- [1] Немчинский В. А., Равич Ю. И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 7. С. 2071—2077.
- [2] Abeles B., Meiboom S. // Phys. Rev. 1956. V. 101. N 2. P. 544—550.
- [3] Zitter R. N. // Phys. Rev. 1962. V. 127. N 5. P. 1471—1480.
- [4] Saunders G. A., Sumengen Z. // Proc. Roy. Soc. 1972. V. A239. N 1579. P. 453—466.

- [5] Michenaud J.-P., Issi J.-P. // *J. Phys. C*. 1972. V. 5. N 21. P. 3061—3072.
- [6] Гицу Д. В., Голбан И. М., Канцер В. Г., Мутяну Ф. М. Явления переноса в висмуте и его сплавах. Кишинев: Штиинца, 1987. 267 с.
- [7] Mikhail I. F. I., Hansen O. P., Nielsen H. // *J. Phys. C*. 1980. V. 13. N 9. P. 1697—1713.
- [8] Vecchi M. P., Dresselhaus M. S. // *Phys. Rev. B*. 1974. V. 10. N 2. P. 771—774.
- [9] Брандт Н. Б., Диттманн Х., Пономарев Я. Г., Чудинов С. М. // *Письма в ЖЭТФ*. 1970. Т. 11. № 5. С. 250—253.
- [10] Smith G. E., Baraff G. A., Rowell J. M. // *Phys. Rev.* 1964. V. 135. N 4. P. A1118—1125.
- [11] Vecchi M. P., Pereira J. R., Dresselhaus M. S. // *Phys. Rev. B*. 1976. V. 14. N 2. P. 298—317.
- [12] Дорофеев Е. А., Фальковский Л. А. // *ЖЭТФ*. 1984. Т. 87. № 6 (12). С. 2202—2213.
- [13] Yim W. M., Amith A. // *Solid—St. Electronics*. 1972. V. 15. N 10. P. 1141—1165.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
29 января 1992 г.