

Особенности энергетического спектра и механизмов рассеяния дырок в PbSb_2Te_4

© С.А. Немов^{†*}, Н.М. Блажих^{*}, Л.Е. Шелимова^{*}

* Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия

[†] Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

^{*} Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, 119991 Москва, Россия

(Получена 16 июля 2012 г. Принята к печати 25 июля 2012 г.)

На серии кристаллов PbSb_2Te_4 легированных медью, с различной концентрацией дырок $(1.6-3.2) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ исследованы кинетические коэффициенты Холла R_{ikl} , электропроводности σ_{kk} , термоэдс α_{kk} и их анизотропия в диапазоне температур 77–450 К. Наблюдаемая во всех исследованных кристаллах анизотропия термоэдс свидетельствует о смешанном механизме рассеяния дырок. Основными механизмами рассеяния являются рассеяние на акустических фонах и кулоновском потенциале примесей и дефектов. Определены экспериментальные эффективные параметры рассеяния и парциальные подвижности в плоскости скола и вдоль тригональной оси. Теоретические оценки подвижности находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом. Установлено, что характер температурной зависимости отношения $\alpha_{kk}/T = f(T)$ определяется величиной концентрации дырок. Показано, что для кристалла с $p_{\min} = 1.6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ электрофизические свойства могут быть описаны в рамках однозонной модели, оценена величина эффективной массы плотности состояний дырок в основном экстремуме валентной зоны $m_d \approx 0.5m_0$. Сделана оценка энергетического зазора между экстремумами валентной зоны $\Delta E_v \approx 0.23 \text{ эВ}$.

1. Введение

Интересным направлением исследования термоэлектрических материалов, появившимся в последнее время, является синтез тетрадимитоподобных соединений на основе $\text{A}^{\text{IV}}\text{A}_2^{\text{V}}\text{B}_4^{\text{VI}}$. К подобным тройным слоистым халькогенидам относится соединение PbSb_2Te_4 , имеющее кристаллическую решетку с ромбоэдрической симметрией [1–3]. Свойства этих кристаллов мало изучены. Известно, что кристаллы PbSb_2Te_4 растут со значительным отклонением от стехиометрического состава с большим количеством собственных электрически активных точечных дефектов. Кристаллы имеют дырочный тип проводимости с концентрацией носителей тока $p \approx 3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ [4]. Введение меди в шихту приводит к некоторому уменьшению концентрации дырок [5, 6].

Важнейшими характеристиками проводников являются энергетический спектр носителей тока и механизмы рассеяния. Однако, отсутствие набора образцов PbSb_2Te_4 с заметно различающимися концентрациями позволило сделать только оценки в рамках однозонной модели [4,6].

В данной работе проведен анализ особенностей зонной структуры и механизмов рассеяния дырок на основе данных по явлениям переноса кристаллов PbSb_2Te_4 с различными концентрациями носителей тока.

2. Монокристаллы

Монокристаллы PbSb_2Te_4 были выращены в Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова

в Москве по методу Чохральского с подпиткой жидкой фазой из плавающего тигля. Использование данного метода позволило вырастить монокристаллические слитки достаточно больших размеров ($\sim 1 \text{ см}$) в направлении тригональной оси. Легирование медью проводилось введением Cu в шихту [4].

Структура полученного соединения была рассчитана с помощью комплекса кристаллографических программ AREN на основе рентгенографических исследований на автоматическом дифрактометре ДРОН-УМ (Cu_α -излучение) и рентгеноструктурных исследований на автоматическом дифрактометре Syntex P1 (MoK_α -излучение) [3].

Дополнительно с помощью термозонда был произведен контроль однородности кристаллов по разбросу значения коэффициента термоэдс по поверхности кристаллов, величина которого для разных участков образца не превышала 5%.

Наличие монокристаллов высокого качества с различной концентрацией дырок позволило провести количественные оценки параметров зонной структуры и механизмов рассеяния в PbSb_2Te_4 .

3. Методика эксперимента

Монокристаллы PbSb_2Te_4 обладают ромбоэдрической симметрией (пространственная группа $R\bar{3}m$), следствием которой является сильная анизотропия физических свойств. Кинетические коэффициенты в анизотропных кристаллах являются тензорными величинами. Благодаря наличию инверсионно-поворотной оси c_3 кинетические коэффициенты имеют следующие независимые компоненты: коэффициенты Холла R_{123} , R_{321} , термоэдс α_{11} ,

[†] E-mail: nemov_s@mail.ru

Электрофизические параметры исследованных кристаллов $PbSb_2Te_4$

№ кристалла	Состав шихты	σ_{11} (77 K), (Ом · см) ⁻¹	σ_{33} (77 K), (Ом · см) ⁻¹	$p, 10^{20}$ см ⁻³	R_{123}/R_{321} (300 K)	$\frac{R_{123}(300 K)}{R_{123}(77 K)}$
1	$Pb_2Sb_6Te_{11}$	5400	400	3.2	2	1.6
2	$(Pb_2Sb_6Te_{11})_{0.9995}(Cu)_{0.005}$	2900	450	1.7	1.4	1.8
3	$(Pb_2Sb_6Te_{11})_{0.999}(Cu)_{0.001}$	6600	470	1.6	1.3	1.9

α_{33} и электропроводности σ_{11}, σ_{33} (ось 3 параллельна направлению тригональной оси c_3 в монокристалле, а индексы в порядке расположения: первый — направление измеряемого электрического поля, второй — направление электрического тока или градиента температуры, третий — направление магнитного поля). Для исследования эффектов Холла, термоэдс, электропроводности и их анизотропии из монокристаллических слитков были вырезаны по два образца с размерами примерно $4 \times 4 \times 10$ мм, с большим размером в плоскости скола и вдоль оси c_3 соответственно. Измерения кинетических коэффициентов проводились в диапазоне температур 77–450 К.

4. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Основные экспериментальные результаты представлены в таблице и на рис. 1, 2.

Графики температурных зависимостей коэффициентов Холла и электропроводности мы не приводим, так как характеры полученных нами зависимостей $R_{ikl}(T)$ и

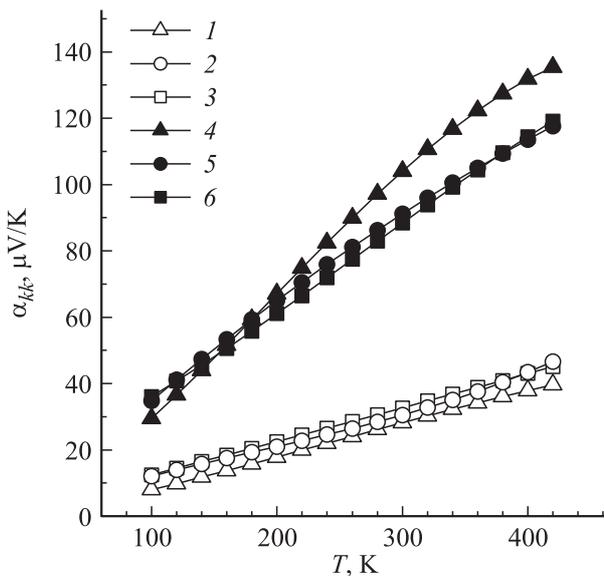


Рис. 1. Температурная зависимость компонент тензора термоэдс α_{kk} кристаллов $PbSb_2Te_4$. 1, 2, 3 — α_{11} , 4, 5, 6 — α_{33} . Номера кривых соответствуют номерам кристаллов в таблице: 1, 4 — 1; 2, 5 — 2; 3, 6 — 3.

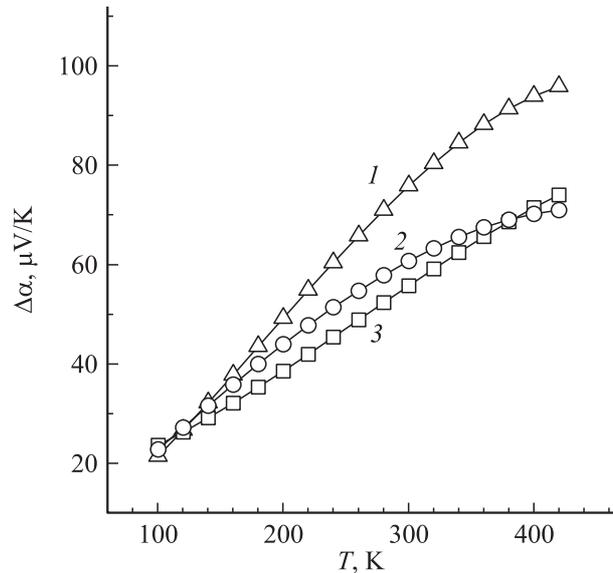


Рис. 2. Температурная зависимость анизотропии термоэдс $\Delta\alpha = \alpha_{33} - \alpha_{11}$. Номера кривых соответствуют номерам кристаллов в таблице.

$\alpha_{kk}(T)$ исследованных кристаллов совпадают с опубликованными в [4,6], причем кинетические коэффициенты имеют близкие значения.

Отметим, что температурные зависимости компонент тензоров электропроводности и термоэдс, а также поперечного эффекта Нернста–Эттингсгаузена [6] не имеют ярких аномалий, свидетельствующих об участии в явлениях переноса нескольких типов носителей тока. Поэтому обсуждение экспериментальных результатов начнем в рамках однозонной модели.

Исследованные кристаллы на основе $PbSb_2Te_4$ имели дырочный тип проводимости с концентрацией дырок $p \approx (1.6-3.2) \cdot 10^{20}$ см⁻³ (см. таблицу), определенной из большей компоненты тензора Холла R_{123} при температуре 77 К. Столь высокие концентрации носителей тока позволяют использовать для расчетов формулы кинетических коэффициентов, справедливые для вырожденной статистики.

Рассмотрим подробнее данные по термоэдс. Как видно из рис. 1, 2 в исследованных образцах наблюдается значительная анизотропия термоэдс, величина которой при комнатной температуре достигает $\Delta\alpha = \alpha_{33} - \alpha_{11} \approx 76$ мкВ/К и несколько меньше для легированных образцов. Наиболее вероятной причиной

возникновения анизотропии термоэдс является смешанный анизотропный механизм рассеяния дырок, который предполагает наличие как минимум двух механизмов, приводящих к разным энергетическим зависимостям времени релаксации вдоль различных кристаллографических направлений [4,6].

Как известно, в большинстве легированных полупроводников основными механизмами рассеяния носителей тока являются рассеяние на продольных акустических фононах и на кулоновском потенциале ионов примеси. Причем параметр рассеяния r — показатель степени в энергетической зависимости времени релаксации $\tau(\varepsilon) \propto \varepsilon^{r-1/2}$, равен: $r = 2$ для примесного и $r = 0$ для акустического рассеяния соответственно [7]. Анализ данных по эффекту Нернста–Эттинггаузена, выполненный в работе [6], показал, что в PbSb_2Te_4 также реализуется подобный смешанный механизм рассеяния дырок, причем в плоскости скола доминирует рассеяние на акустических фононах при температурах 100–450 К, а в направлении тригональной оси — рассеяние на кулоновском потенциале ионизованных примесей и дефектов при низких температурах. Компоненты тензора термоэдс для вырожденных образцов описываются выражением

$$\alpha_{ii} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} (r_{ii} + 1), \quad (1)$$

где: k_0 — постоянная Больцмана, e — величина заряда электрона, T — абсолютная температура, μ — химический потенциал, r_{ii} — параметр рассеяния вдоль оси x_i .

В случае смешанного механизма рассеяния время релаксации не является степенной функцией энергии носителей тока, и в общем случае параметр рассеяния не ввести. Однако при сильном вырождении электронного газа кинетические коэффициенты определяются свойствами электронов, имеющими энергию вблизи уровня Ферми μ в слое $k_0 T$. Поэтому вместо параметра r можно ввести эффективный параметр рассеяния $r_{\text{эфф}}$ через логарифмическую производную времени релаксации по энергии:

$$r_{\text{эфф}} = \left. \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \varepsilon} \right|_{\mu} + \frac{1}{2}, \quad (2)$$

и использовать известные формулы [8] для кинетических коэффициентов в модели с параболическим законом дисперсии с заменой параметра r на $r_{\text{эфф}}$.

Учтем температурную зависимость термоэдс благодаря температурному смещению химического потенциала, т. е. $\mu(T)$, которое, как известно, в случае вырожденной статистики описывается формулой:

$$\mu(T) = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad (3)$$

где μ_0 — химический потенциал при 0 К.

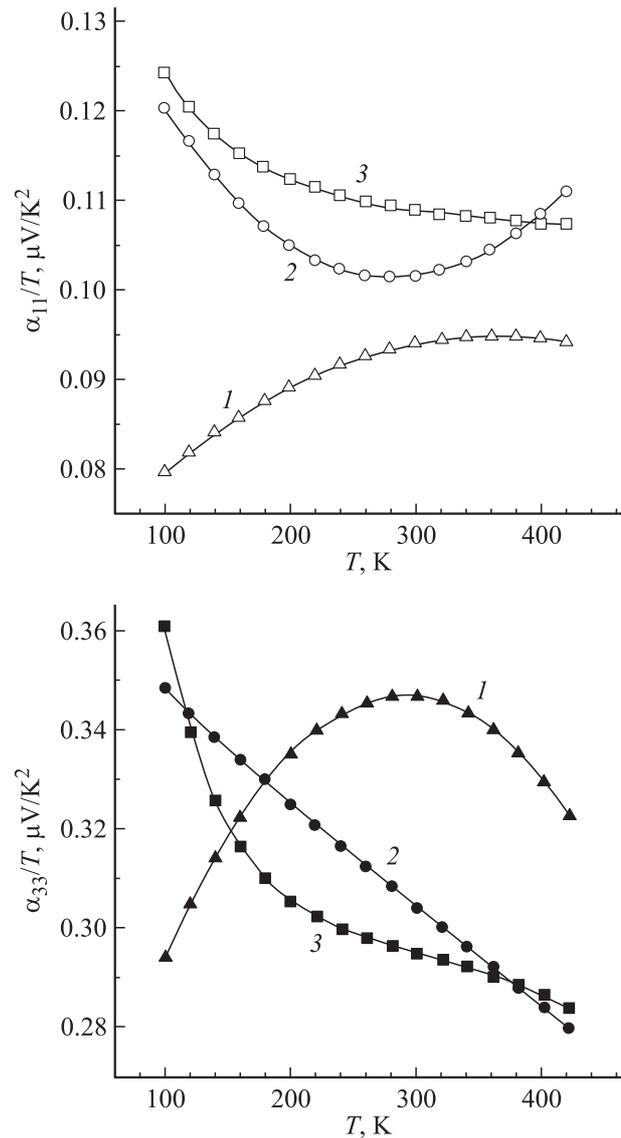


Рис. 3. Температурные зависимости отношения коэффициента термоэдс к температуре в плоскости скола (α_{11}/T) и в направлении тригональной оси (α_{33}/T). Номера кривых соответствуют номерам кристаллов в таблице.

В итоге температурная зависимость отношения α_{kk}/T с учетом возможного изменения параметра рассеяния $r_{kk}^{\text{эфф}}$ с температурой имеет вид

$$\frac{\alpha_{kk}}{T} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0}{\mu_0} [r_{kk}^{\text{эфф}}(T) + 1] \left[1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_0 T}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (4)$$

Таким образом, в рамках однозонной модели и смешанного механизма рассеяния отношение термоэдс к температуре (α_{kk}/T) может заметно уменьшаться при увеличении вклада акустического механизма рассеяния при высоких температурах и немного ($\sim 5\%$) увеличиваться за счет температурного смещения химического потенциала.

Обратимся к экспериментальным данным. Как видно из рис. 3 ожидаемое в однозонной модели изменение термоэдс с температурой наблюдается только в кристалле № 3 с $p_{\min} = 1.6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

В соответствии с результатами [5,6] мы предполагаем, что в плоскости скола доминирует рассеяние на акустических фоновых. В пользу этого предположения также свидетельствуют данные по поперечному эффекту Нернста–Эттингсгаузена в интервале температур 77–450 К. У всех исследованных кристаллов компоненты тензора Нернста–Эттингсгаузена в плоскости скола отрицательны, $Q_{123} < 0$, в то время как другие компоненты или положительны, или изменяют свой знак с плюса на минус [6].

С ростом температуры вклад акустического рассеяния возрастает и при температурах выше комнатной рассеяние на акустических фоновых доминирует. Поэтому для оценок полагаем, что параметр рассеяния $r = 0$, и по формуле (1) из экспериментальных данных находим химический потенциал μ_{400} при 400 К, а затем по формуле (3) находим уровень Ферми $\mu_0 \approx 0.23$ эВ при $T = 0$ К.

При $T = 100$ К из экспериментальных данных по термоэдс по формуле (4) находим эффективный параметр рассеяния $r_{11}^{\text{eff}}(100 \text{ К}) \approx 0.15$. Полученное значение эффективного параметра рассеяния согласуется с представлениями о смешанном механизме рассеяния и доминирующем рассеянии на акустических фоновых.

Подобный расчет эффективного параметра рассеяния на основе экспериментальных данных в направлении тригональной оси (α_{33}) дает $r_{33}^{\text{eff}}(100 \text{ К}) \approx 2.4$. Полученное значение превышает величину параметра r для примесного рассеяния ($r = 2$) [7].

Улучшить согласие оценок параметров рассеяния (r_{kk}^{eff}) с экспериментом в рамках однозонной модели можно, если предположить наличие непараболичности зонного спектра дырок. В этом случае коэффициент термоэдс описывается выражением [7]

$$\alpha_{kk} = \frac{k}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{kT}{\mu} (r_{kk}^{\text{eff}} + 1 - \lambda), \quad (5)$$

где λ — параметр, характеризующий непараболичность зоны. Введение небольшой непараболичности ($\lambda \approx 0.15$) позволяет снизить величину эффективного параметра рассеяния r_{33}^{eff} до 2, при этом перерасчет уровня Ферми дает значение $\mu_0 \approx 0.20$ эВ. Результаты расчета эффективного параметра рассеяния приведены на рис. 4.

Оценим эффективную массу плотности состояний $m_d^* = m_d/m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) для кристалла № 3. В случае сильного вырождения газа свободных носителей в однозонной модели формула концентрации дырок имеет вид

$$p = \frac{8\pi}{3h^3} (2m_d)^{3/2} \mu_0^{3/2}, \quad (6)$$

где h — постоянная Планка, m_d — эффективная масса плотности состояний.

Из формулы (6) для концентрации дырок p , подставив ранее найденную величину химического потенциала μ_0 , получаем оценку величины эффективной массы плотности состояний на уровне Ферми $m_d \approx 0.5m_0$.

Полученное значение m_d в $PbSb_2Te_4$ значительно ниже величины эффективной массы в Sb_2Te_3 ($m_d \approx 0.8m_0$ [9]).

При смешанном механизме рассеяния обратные времена релаксации и обратные парциальные подвижности (u_n) складываются:

$$\tau^{-1} = \sum \tau_n^{-1}, \quad (7)$$

$$u^{-1} = \sum u_n^{-1}, \quad (8)$$

где u — подвижность, обусловленная всеми механизмами рассеяния, u_n — парциальные подвижности.

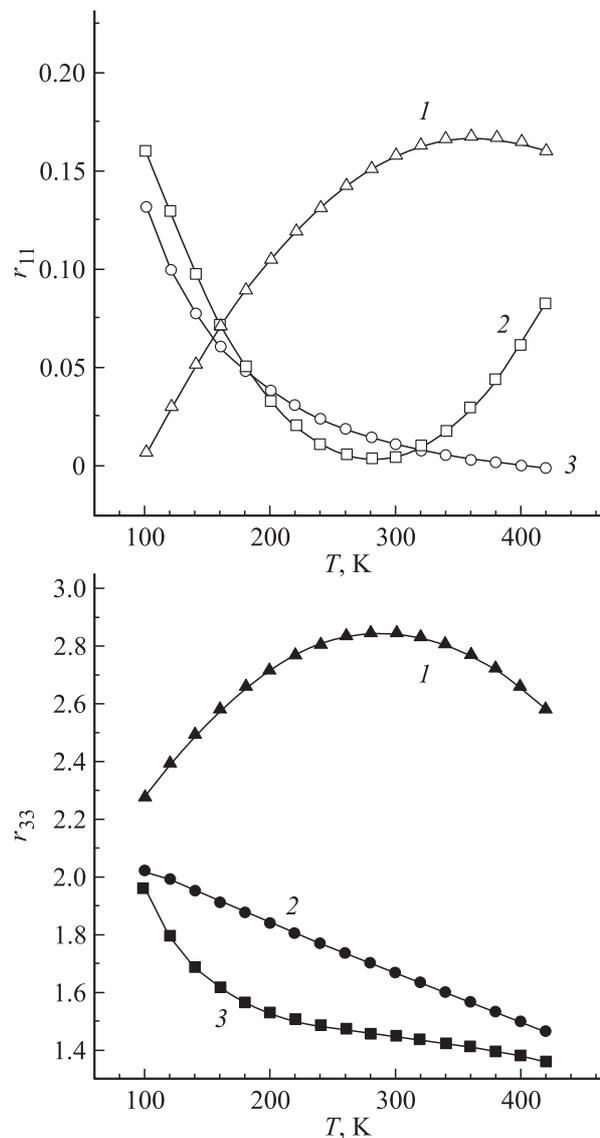


Рис. 4. Параметры рассеяния в плоскости скола r_{11} и вдоль тригональной оси r_{33} . Номера кривых соответствуют номерам кристаллов в таблице.

В этом случае эффективный параметр рассеяния может быть представлен в виде

$$r_{\text{eff}} = \sum r_n \left(\frac{u_n^{-1}}{u^{-1}} \right), \quad (9)$$

где r_n — параметр рассеяния, отвечающий парциальной подвижности u_n .

В плоскости скола считаем, что $r_1 = 0$, $r_2 = 2$, эффективный параметр рассеяния описывается выражением

$$r_{\text{eff}} = 2 \left(\frac{u_2^{-1}}{u^{-1}} \right). \quad (10)$$

Откуда, подставив экспериментальное значение r_{eff} , получим соотношение подвижностей дырок для рассеяния на ионах примеси и акустических фонах: $u_2 \approx 13u_1$ (при 100 К). Полную подвижность можно оценить из данных по холловской подвижности $R_{123}\sigma_{11}$. Полученные величины подвижностей дырок равны $u_1 \approx 230 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ и $u_2 \approx 3000 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ соответственно.

К сожалению, зонный спектр дырок в PbSb_2Te_4 мало изучен и нам не известна анизотропия эффективной массы. Поэтому в настоящее время невозможно произвести детальное сравнение расчетных подвижностей с экспериментальными данными, тем не менее на основе полученных данных можно сделать некоторые теоретические оценки.

В случае сильного вырождения подвижность определяется временем релаксации τ и эффективной массой на уровне Ферми $m^*(\mu)$ [7]:

$$u = \frac{e\tau(u)}{m^*(\mu)}. \quad (11)$$

Для оценок парциальных подвижностей использовались следующие формулы

— для рассеяния на акустических фонах время релаксации имеет вид [7]:

$$\tau_{\text{ac}}(\mu) = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{\rho V_0^2 \hbar^4}{\Xi^2 m_d^{3/2} k_0 T} (\sqrt{\mu})^{-1}, \quad (12)$$

где ρ — плотность кристалла, V_0 — скорость звука в кристалле, Ξ — константа деформационного потенциала;

— для рассеяния на кулоновском потенциале примесей время релаксации описывается формулой Конвелла–Вайскофа [8]:

$$\tau_C = \frac{\kappa^2 \sqrt{2m}}{\pi e^4 N_i F} \mu^{3/2},$$

где κ — диэлектрическая постоянная, N_i — концентрация ионов примеси,

$$F(\mu) = \ln(1 + \xi) - \frac{\xi}{1 + \xi}, \quad (14)$$

где $\xi = 4k_F^2 r_s^2$, $\hbar k_F$ — импульс дырки на уровне ферми, r_s — радиус экранирования.

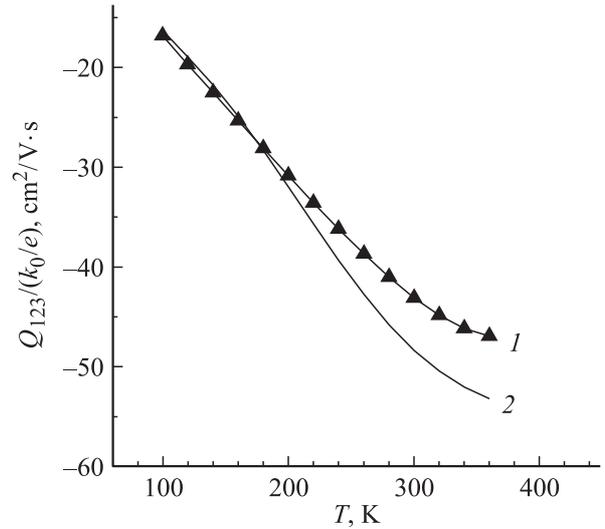


Рис. 5. Температурная зависимость компоненты Q_{123} тензора Нернста–Эттинггаузена. 1 — эксперимент; 2 — расчет.

Подставляя выражение (12) в (11), полагая скорость звука, равную 2500 м/с (как в Sb_2Te_3 [10]), и величину константы деформационного потенциала $\kappa = 10 \text{ эВ}$, поскольку в большинстве полупроводников она имеет значения, близкие к 10 эВ [8], получаем расчетное значение подвижности для акустического механизма рассеяния $u_{\text{ac}} \approx 200 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, что близко к экспериментальному значению.

Для оценки подвижности на кулоновском потенциале примесей подставляем выражение (13) в (11), полагая величину диэлектрической постоянной $\kappa = 170$ (как в Sb_2Te_3 [10]) и величину концентрации ионизованных примесей и дефектов $N_i \approx p$, получаем значение $u_C \approx 5000 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$, т.е. правильный порядок подвижности дырок. Достичь лучшего согласия расчетов с экспериментом в настоящее время не представляется возможным, учитывая отсутствие информации о ряде параметров PbSb_2Te_4 , входящих в формулу (13).

Аналогичные расчеты вдоль тригональной оси показали, что для получения эффективного параметра рассеяния r_{eff} , не превышающего 2, необходим учет непараболичности, при этом, полученные численные значения удовлетворительно согласуются с экспериментальными.

Как видно из таблицы, наблюдается значительная анизотропия холловских подвижностей. Отношение экспериментальных значений полных подвижностей в плоскости скола и вдоль c_3 имеет величину $(R\sigma)_{11}/(R\sigma)_{33} \approx 10$. Столь значительная анизотропия подвижности, по-видимому, свидетельствует о сильной анизотропии энергетического спектра дырок.

Для проверки сделанных ранее предположений и результатов расчета подвижности была рассчитана температурная зависимость нернстовской подвижности в плоскости скола ($Q_{123}e/k_0$) по формуле

$$\frac{Q_{ikl}}{k_0 e} = \frac{\pi^2}{3} (R_{ikl}\sigma_{kk}) (r_{kk}^{\text{eff}} - \lambda) \frac{kT}{\mu}. \quad (15)$$

Результаты расчета и сопоставление с экспериментом приведены на рис. 5. Видно, что наблюдается хорошее согласие расчетов с экспериментом. Некоторое различие при высоких температурах (около 10%) может быть связано с появлением носителей второго сорта, к которым особенно чувствителен коэффициент Нернста–Эттингсгаузена.

Рассмотрение экспериментальных данных для кристаллов с более высокими концентрациями дырок (№ 1 и № 2) показывают существенное отличие изменения характера температурной зависимости отношения $\alpha_{kk}/T = f(T)$ от ожидаемой для однозонной модели, что, по-видимому, связано со сложным строением валентной зоны и участием в явлении переноса дырок второго типа. Подобное отличие наблюдается в кристалле № 2 с $p = 1.7 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, близкой к концентрации дырок в кристалле № 3 вблизи комнатной температуры. Поэтому можно предположить, что при комнатной температуре химический потенциал, по-видимому, находится вблизи вершины дополнительного экстремума валентной зоны, тогда для оценок энергетического зазора ΔE_v можно принять

$$\Delta E_v \approx \mu_0 + kT. \quad (16)$$

Сделанная оценка по формуле (16) дает величину энергетического зазора $\Delta E_v \approx 0.23 \text{ эВ}$.

Кристалл № 1 демонстрирует поведение отношения α_{kk}/T , отличное от однозонного во всем исследованном диапазоне температур. По-видимому, уровень химического потенциала кристалла расположен в дополнительном экстремуме уже при 77 К.

5. Заключение

Из анализа данных по термоэдс α_{kk} и ее анизотропии с использованием данных по электропроводности σ_{kk} , коэффициента Холл R_{ikl} и Нернста–Эттингсгаузен Q_{ikl} определены эффективные параметры рассеяния, парциальные вклады в подвижности рассеяния на акустических фононах и кулоновском потенциале примесей и дефектов, сделаны теоретические оценки подвижности, удовлетворительно согласующиеся с экспериментом.

Оценена масса плотности состояний в основном экстремуме валентной зоны ($m_d \approx 0.5m_0$) и энергетический зазор между основным и дополнительным экстремумом валентной зоны ($\Delta E_v \approx 0.23 \text{ эВ}$).

Список литературы

- [1] Л.Е. Шелимова, Т.Е. Свечникова, П.П. Константинов, О.Г. Карпинский, В.С. Земсков. Неорг. матер. **43**, 165 (2007).
- [2] Teruyki Ikeda, Sossina M. Haile, Vilupanur A. Ravi, Hesham Azizgolshani, Franck Gascoin, G. Jeffrey Snyder. Acta Mater. **55**, 1227 (2007).
- [3] Л.Е. Шелимова, О.Г. Карпинский, Т.Е. Свечникова, Е.С. Авилов, М.А. Кретьова, В.С. Земсков. Неорг. матер., **40** (12), 1440 (2004).
- [4] М.К. Житинская, С.А. Немов, Л.Е. Шелимова, Т.Е. Свечникова, П.П. Константинов. ФТТ, **50** (1), 8 (2008).
- [5] Л.Е. Шелимова, О.Г. Карпинский, П.П. Константинов, Т.Е. Свечникова, М.К. Житинская, Е.С. Авилов, М.А. Кретьова, В.С. Земсков. Перспективные матер., № 2, 28 (2008).
- [6] С.А. Немов, Н.М. Благих, Н.С. Дема, М.К. Житинская, В.И. Прошин, Т.Е. Свечникова, Л.Е. Шелимова. ФТП **46** (4), 463 (2012).
- [7] Б.М. Аскеров. Кинетические явления в полупроводниках Л., Наука, 1970.
- [8] А.И. Ансельм. Введение в теорию полупроводников (М., Наука, 1978).
- [9] M. Stordeur, G. Simon. Phys. Status Solidi B, **124**, 799 (1984).
- [10] Физические величины. Справочник, под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. (М., Энергоатомиздат, 1991).

Редактор Т.А. Полянская

Peculiarities of energy spectr and holes scattering mechanisms at $PbSb_2Te_4$

S.A. Nemo^{*+}, N.M. Blagikh^{*}, L.E. Shelimova^{*}

^{*} St. Petersburg State Polytechnic University,

1952521 St. Petersburg, Russia

⁺ Ioffe Physicotechnical Institute

Russian Academy of Sciences,

194021 St. Petersburg, Russia

^{*} Baikov Institute of science of material and metallurgy,

Russian Academie of Sciences,

119991 Moscow, Russia

Abstract Series crystals of $PbSb_2Te_4$ with different copper and hall density $(1.6-3.2) \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ was investigated the kinetic coefficients Hall R_{ikl} , conductivity σ_{kk} , thermopower α_{kk} , and their anisotropy in the range 77–450 K. Observed in all the investigated crystals the anisotropy of the thermoelectric power shows a mixed mechanism of holes scattering. The main scattering mechanisms are scattering by acoustic phonons and the Coulomb potential of impurities and defects. Determined by the experimental effective parameters of the scattering and partial mobility in the cleavage plane and along the trigonal axis. Theoretical estimates of mobility are in good agreement with experiment. Established that character of the temperature dependence of the ratio $\alpha_{kk}/T = f(T)$ is determined by the concentration of holes. It is shown that for a crystal with $p_{\min} = 1.6 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ electrical properties can be described within the one-band model, the estimated value of the effective mass density of holes in the valence band extrema mainly $m_d \approx 0.5m_0$. The estimation of the energy gap between the valence band extrema $\Delta E_v \approx 0.23 \text{ eV}$.