

## ПЛОТНОСТЬ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ ПО ДАННЫМ ТЕРМОЭДС В $\text{PbTe} \langle \text{Tl} \rangle$

Немов С. А., Равич Ю. И.

Приведены экспериментальные зависимости коэффициента термоэдс  $\alpha$  от степени заполнения  $k$  резонансных состояний таллия дырками в  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Na} \rangle$  при 120 К с содержанием Тl 1 и 2 ат%. Немонотонный характер зависимостей  $\alpha(k)$  обусловлен сильным резонансным рассеянием дырок в квазилокальные состояния Тl. Доминирующий характер резонансного рассеяния позволяет сформулировать метод нахождения функции плотности резонансных состояний  $g_i(\epsilon)$  из экспериментальных данных по термоэдс. Этим методом получены зависимости  $g_i(\epsilon)$  в  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Na} \rangle$ . Показано, что для получения разумных значений  $g_{i, \max}$  и полуширины  $\Gamma/2$  необходим учет вклада тяжелых дырок и зависимости энергетического зазора  $\Delta\epsilon_i$  между экстремумами валентной зоны от содержания примеси натрия.

Легирование  $\text{PbTe}$  примесью Тl сопровождается образованием полосы квазилокальных (резонансных) состояний на фоне разрешенного спектра валентной зоны, расположенной вблизи вершины зоны тяжелых дырок ( $\Sigma$ -зоны) [1]. Характерной особенностью квазилокальных состояний в  $\text{PbTe} \langle \text{Tl} \rangle$  является наличие сильного резонансного рассеяния дырок на примеси Тl в образцах с уровнем Ферми ( $\mu$ ), совпадающим по энергии с квазилокальными состояниями [2]. Наличие резонансного рассеяния приводит к появлению особенности (минимума) на энергетической зависимости времени релаксации дырок  $\tau(\epsilon)$  в области энергий, соответствующих квазилокальным состояниям. Это утверждение находится в согласии с экспериментальными данными по удельному сопротивлению  $\rho$  при низких температурах. Как показано в работе [3], в опытах по дополнительному легированию  $\text{PbTe} \langle \text{Tl} \rangle$  электрически активной примесью (Na, избыток Pb) зависимость  $\rho$  от степени заполнения резонансных состояний дырками ( $k$ ) имеет вид колоколообразной кривой с максимумом при  $k \approx 0.5$  (что соответствует  $\mu \approx \epsilon_i$  — энергии центра полосы таллия). Необходимость дополнительного легирования  $\text{PbTe}$  примесью Тl обусловлена тем, что максимальная степень заполнения полосы дырками в образцах, легированных одной примесью таллия, не превышает 1/3. Введение наряду с таллием электрически активной примеси позволяет варьировать степень заполнения резонансных состояний от 0 до 1, т. е. продвигать уровень Ферми через всю полосу квазилокальных состояний [3, 4].

Резонансное рассеяние приводит к появлению особенностей в зависимости от степени заполнения полосы Тl и в других кинетических коэффициентах. Причем наиболее ярко они должны проявляться в кинетических коэффициентах, чувствительных к производной  $\partial(\ln \tau)/\partial(\ln \epsilon)|_{\mu}$ . К последним относится коэффициент термоэдс  $\alpha$ .

На рис. 1 приведены зависимости  $\alpha$  при 120 К от степени заполнения резонансных состояний дырками  $k$  в сериях образцов  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Na} \rangle$ ,  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Li} \rangle$ ,  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Pb}_{\text{изб}} \rangle$  с содержанием таллия  $N_{\text{Tl}} = 1$  и 2 ат% (в  $\text{PbTe} \langle \text{Na} \rangle$  и  $\text{Li}$  — акцепторы, избыток Pb — донор). В образцах с дополнительной примесью Na и избытком свинца степень заполнения  $k$  определена по формуле (1) работы [3], следующей из уравнения электронейтральности. Электрофизические свойства  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Li} \rangle$  и  $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Na} \rangle$  подобны, но для образцов с литием характерна худшая воспроизводимость составов. Поэтому в них величина  $k$  определялась

из данных по эффекту Холла  $R(T)$  на основании экспериментальной зависимости  $dR/dT|_{100\text{ К}} = f(k)$  для  $\text{PbTe}\langle\text{Tl, Na}\rangle$ , взятой из [4].

Как видно из рис. 1, качественный вид зависимостей  $\alpha(k)$  для серий образцов с  $N_{\text{Tl}}=1$  и 2 ат% соответствует представлениям о резонансном рассеянии. Существенной особенностью экспериментальных данных является наличие протяженного участка со слабой зависимостью  $\alpha(k)$  вблизи  $k=0.5$ , свидетельствующего о слабости энергетической зависимости времени релаксации вблизи минимума.

Доминирующий характер резонансного рассеяния в  $\text{PbTe}\langle\text{Tl}\rangle$  [2, 4] позволяет найти вид функции плотности резонансных состояний  $g_i(\epsilon)$ . В самом деле время релаксации при резонансном рассеянии описывается выражением

$$\tau_{\text{рез}}(\epsilon) \approx \frac{\hbar}{\Gamma} \frac{g_{\text{зон}}(\epsilon)}{g_i(\epsilon)}, \quad (1)$$

в котором  $g_{\text{зон}}(\epsilon)$  — плотность зонных состояний,  $\Gamma$  — уширение полосы ре-

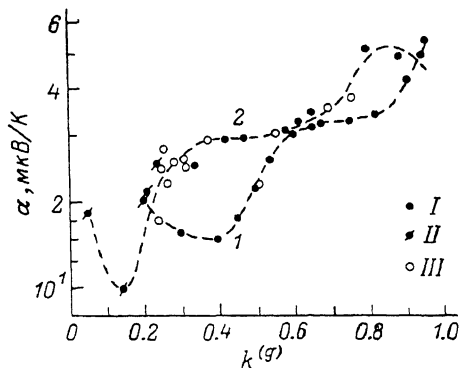


Рис. 1. Зависимость коэффициента термоэдс  $\alpha$  от степени заполнения  $k$  полосы резонансных состояний галлия дырками в  $\text{PbTe}\langle\text{Tl, Na}\rangle$ ,  $\text{PbTe}\langle\text{Tl, Li}\rangle$  и  $\text{PbTe}\langle\text{Tl, Pb}_{\text{изб}}\rangle$  при 120 К.  $N_{\text{Tl}}$ , ат%: 1 — 1, 2 — 2. Примеси: I — Na, II —  $\text{Pb}_{\text{изб}}$ , III — Li.

зонансных состояний, обусловленное резонансным рассеянием (гибридизацией зонных и примесных состояний).

Если пренебречь вкладом тяжелых дырок, то

$$\frac{\partial \ln \tau_{\text{рез}}}{\partial \ln \epsilon} \Big|_{\mu} \approx - \frac{\partial \ln g_i}{\partial \ln \epsilon} \Big|_{\mu}, \quad (2)$$

поскольку плотность состояний в зоне легких дырок изменяется слабо при энергиях носителей  $\epsilon \approx \epsilon_i \sim 0.2$  эВ (по шкале энергий дырок, отсчитанных от вершины зоны легких дырок) [2, 4].

Из экспериментальной зависимости  $\alpha(k)$  находим эффективный параметр рассеяния  $r = \partial \ln \tau / \partial \ln \epsilon|_{\epsilon=\mu}$  как функцию  $k$  по формуле (3), учитывающей непараболичность зоны легких дырок:

$$\alpha = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} \left( r + \frac{3}{2} \frac{1+x}{1+x} - \frac{2x}{1+2x} \right), \quad (3)$$

где  $x = \mu/\epsilon_g^*$ ,  $\epsilon_g^*$  — эффективный зазор взаимодействия.

Вводя обозначение  $f(k) = r/\mu$ , из (2) получаем уравнение

$$g_i^{-1} \frac{dg_i}{d\mu} = -f(k), \quad (4)$$

или

$$\frac{dg_i}{dk} \frac{dk}{d\mu} = -f(k) g_i. \quad (5)$$

Поскольку, по определению,

$$k = (2N_{\text{Tl}})^{-1} \int_{-\infty}^{\mu} g_i(\epsilon) d\epsilon \quad (6)$$

(коэффициент 2 учитывает наличие двух состояний в полосе на атом Tl [4]), дифференцированием (6) по  $\mu$  находим величину  $dk/d\mu$ , подставляем ее в (5) и получаем уравнение для  $g_i$

$$\frac{dg_i}{dk} = -(2N_{\text{Tl}}) f(k), \quad (7)$$

решение которого имеет вид

$$g_i = -2N_{T1} \int_0^k f(k') dk'. \quad (8)$$

Найденное значение  $g_i$  относится к образцу со степенью заполнения полосы TI дырками  $k$  и уровнем Ферми  $\mu$ . Последнюю величину мы знаем недостаточно точно. Положение химического потенциала  $\Delta\mu$  относительно центра полосы  $\varepsilon_i$ ,

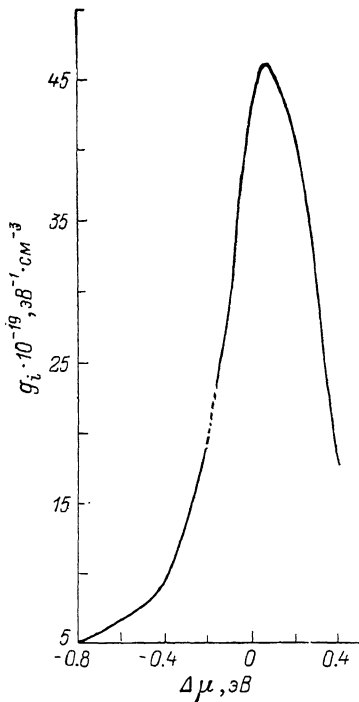


Рис. 2. Функция плотности состояний в примесной полосе TI, рассчитанная в рамках однозонной модели.

$$N_{T1} = 1 \text{ ат}\%.$$

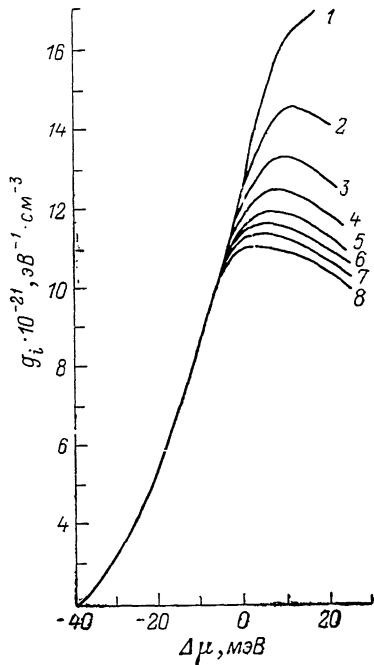


Рис. 3. Функция плотности состояний в примесной полосе TI, рассчитанная в рамках двухзонной модели.

$$N_{T1} = 2 \text{ ат}\%; A, \text{ мэВ/ат}\%: 1 - 10, 2 - 20, 3 - 30, 4 - 40, 5 - 50, 6 - 60, 7 - 80, 8 - 100.$$

можно уточнить с использованием найденной плотности резонансных состояний. Из выражения  $dk/d\mu$  получаем

$$\Delta\mu = \mu - \varepsilon_i = \int_{0.5}^k \frac{dk'}{\varphi(k')}, \quad (9)$$

где  $\varphi = (2N_{T1})^{-1} g_i$ .

Результаты выполненного таким образом расчета приведены на рис. 2, из которого видно, что даже столь грубое приближение позволяет получить колоколообразный вид кривой  $g_i(\varepsilon)$ , качественно согласующийся с литературными данными [3, 5, 6]. Однако количественное сравнение полученной зависимости  $g_i(\varepsilon)$  с данными по плотности состояний [3, 5] и оценками ширины полосы [2, 6, 7] показывает, что полученное нами значение  $g_{i, \text{max}}$  приблизительно на порядок меньше, а ширина на порядок больше, чем литературные значения. Это означает, что использованная однозонная модель является слишком грубым приближением и необходим учет вклада тяжелых дырок. Описанный далее анализ экспериментальных данных в двухзонной модели позволяет получить функцию плотности состояний  $g_i(\varepsilon)$ , согласующуюся с полученными ранее результатами [2, 3, 5-7].

Учет вклада тяжелых дырок производился следующим образом. Уровень Ферми определялся из полной концентрации дырок

$$p = (eR_{77})^{-1} = p_1 + p_2, \quad (10)$$

$$p_1 = \frac{8\pi}{3h^3} (2m_{d_1,0}^*)^{3/2} \left( \mu + \frac{\mu^2}{\varepsilon_g} \right)^{3/2}, \quad (11)$$

$$p_2 = \frac{4\pi}{h^3} (2m_{d_2}^* k_0 T)^{3/2} F_{1/2} \left( \frac{\mu - \Delta \varepsilon_v}{k_0 T} \right), \quad (12)$$

где  $R_{77}$  — значение коэффициента Холла при 77 К,  $m_{d_1,0}^*$  — эффективная масса плотности состояний легких дырок в вершине  $L_6^*$ -зоны,  $m_{d_2}^*$  — эффективная масса плотности состояний тяжелых дырок,  $\Delta \varepsilon_v$  — энергетический зазор между зонами легких и тяжелых дырок.

Возможность нахождения полной концентрации дырок из величины  $R_{77}$  связана с тем, что резонансное рассеяние выравнивает подвижности легких ( $u_1$ ) и тяжелых ( $u_2$ ) дырок, так что их отношение  $b = u_1/u_2 \approx 1$  [2, 4].

Коэффициент термоэдс легких дырок  $\alpha_1$  находился из экспериментального значения  $\alpha$  по формуле для двухзонной модели

$$\alpha = \alpha_1 \eta b / (1 + \eta b) + \alpha_2 / (1 + \eta b), \quad (13)$$

где  $\eta = p_1/p_2$ ,  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  — парциальные коэффициенты термоэдс легких и тяжелых дырок соответственно. Величина  $\alpha_2$  рассчитывалась по формуле

$$\alpha_2 = \frac{k_0}{e} \left[ \frac{3}{2} \frac{F_2(x)}{F_1(x)} - x \right], \quad (14)$$

где  $x = (\mu - \Delta \varepsilon_v)/k_0 T$ . Это оправдано, поскольку для тяжелых дырок при резонансном рассеянии  $\partial \ln \tau_2 / \partial \ln \varepsilon|_{\mu} \approx \partial \ln g_2 / \partial \ln \varepsilon|_{\mu}$ , в силу того что уровень Ферми в исследованных образцах расположен вблизи вершины зоны тяжелых дырок.

Плотность резонансных состояний определялась из термоэдс легких дырок описанным выше способом. В расчете были использованы следующие значения параметров зонной структуры:  $m_{d_1,0}^* = 0.13m_0$  и  $\varepsilon_g^* = 0.13$  эВ [8],  $m_{d_2}^* = 2m_0$  [9]. Согласно [10], энергетический зазор  $\Delta \varepsilon_v$  в РbТе<Na> зависит от содержания примеси Na ( $N_{Na}$ ) и может быть представлен в виде  $\Delta \varepsilon_v = \Delta \varepsilon_{v,0} + AN_{Na}$ . Однако численные оценки параметров не были сделаны. В соответствии с [11] мы полагаем  $\Delta E_{p,0} = 0.16$  эВ, а коэффициент  $A$  варьировали в пределах от 0 до 100 мэВ/ат%. Результаты расчета приведены на рис. 3, из которого видно, что учет вклада тяжелых дырок дает правильный порядок величин  $g_{i,\max}$  и  $\Gamma/2$ . Однако в модели «жестких зон» ( $A=0$ ) зависимость  $g_i(\varepsilon)$  не имеет максимума. При  $A \geq 20$  мэВ/ат% для обеих серий образцов мы получаем колоколообразную кривую. При еще больших значениях параметра  $A$  зависимость  $g_i(\varepsilon)$  имеет почти плоскую вершину, причем левый склон хорошо описывается лоренцевской кривой. При  $A \geq 20$  мэВ/ат% величины  $g_{i,\max}$  и  $\Gamma/2$  согласуются с оценками, имеющимися в литературе [2, 5-7], причем плотность состояний в максимуме растет с ростом содержания таллия в образцах, но несколько увеличивается и ширина кривых  $g_i(\varepsilon)$  на уровне 0.5.

Таким образом, выполненный анализ экспериментальных данных по термоэдс в условиях сильного резонансного рассеяния дырок в РbТе<Тl> позволил определить плотность резонансных состояний  $g_i(\varepsilon)$ . Причем оказалось, что, во-первых, при  $\varepsilon < \varepsilon_i$  форма кривых  $g_i(\varepsilon)$  близка к лоренцевой, во-вторых, при  $\varepsilon \approx \varepsilon_i$  имеется плоская вершина, в-третьих, согласовать теорию с экспериментом можно только при учете увеличения зазора между зонами легких и тяжелых дырок по мере увеличения содержания натрия в образцах теллурида свинца.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Кайданов В. И., Равич Ю. И. — УФН, 1985, т. 145, в. 1, с. 51—86.
- [2] Кайданов В. И., Немов С. А. — ФТП, 1981, т. 15, в. 3, с. 542—550.
- [3] Кайданов В. И., Немов С. А., Парфеньев Р. В., Шамшур Д. В. — Письма ЖЭТФ, 1982, т. 35, в. 12, с. 517—519.

- [4] Кайданов В. И., Немов С. А., Равич Ю. И., Зайцев А. М. — ФТП, 1983, т. 17, в. 9, с. 1613—1617.
- [5] Черник И. А., Лыков С. Н., Гречко Н. И. — ФТТ, 1982, т. 25, в. 10, с. 2931—2937.
- [6] Вейс А. Н., Немов С. А. — ФТП, 1981, т. 15, в. 6, с. 1237—1240.
- [7] Казьмин С. А., Кайданов В. И., Немов С. А., Парфеньев Р. В., Шамшур Д. В., Шубников М. Л. — ФТТ, 1984, т. 26, в. 10, с. 3205—3207.
- [8] Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца  $PbTe$ ,  $PbSe$ ,  $PbS$ . М., 1968. 384 с.
- [9] Черник И. А., Кайданов В. И. — В кн.: Тр. ЛПИ, сер. физика полупроводников, диэлектриков и полимеров. Л., 1971, № 325, с. 43—56.
- [10] Черник И. А., Лыков С. Н. — ФТТ, 1981, т. 23, в. 10, с. 2956—2963.
- [11] Вейс А. Н., Уханов Ю. И. — ФТП, 1976, т. 10, в. 7, с. 1315—1320.

Ленинградский политехнический  
институт им. М. И. Калинина

Получена 21.10.1987  
Принята к печати 1.02.1988