

ОСОБЕННОСТИ ЯВЛЕНИЯ САМОКОМПЕНСАЦИИ В $\text{PbTe} \langle \text{Tl}, \text{Pb}_{\text{изб}} \rangle$

Житинская М. К., Кайданов В. И., Немов С. А., Афанасьева Л. А.

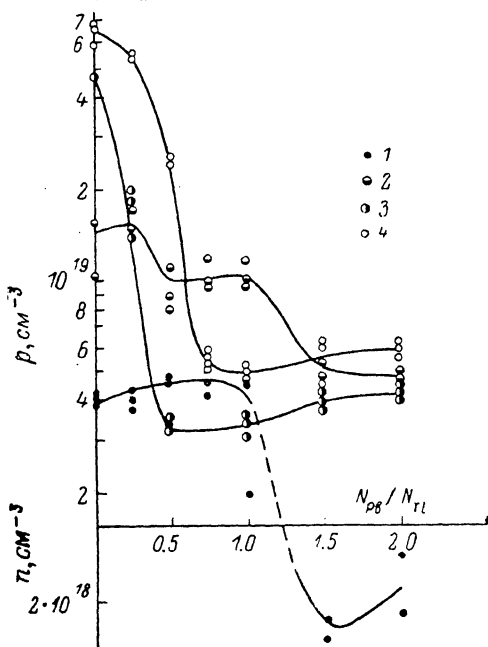
Исследовано явление самокомпенсации в PbTe , легированном Tl и избытком Pb. Показано, что экспериментальные данные удается согласовать с теорией, если предположить, что компенсация легирующего действия Tl осуществляется не только одиночными двукратно ионизованными вакансиями теллура, но и путем образования комплексов типа ион примеси — вакансия Te с энергией связи $\Delta\varphi_{\text{K}} \sim 0.5$ эВ при 650°C .

Электрофизические свойства компенсированных образцов характеризуются наличием ряда особенностей, свидетельствующих в пользу существования в образцах p -типа резонансного уровня в валентной зоне с энергией ~ 0.1 эВ и локального уровня под дном зоны проводимости с энергией ~ 0.1 эВ в образцах n -типа.

При введении в кристалл электрически активных примесей увеличивается растворимость собственных дефектов кристаллической решетки, компенсирующих легирующее действие примеси. Это явление, называемое самокомпенсацией, подробно исследовалось в селениде и сульфиде свинца, легированных таллием [1]. В работе [1] развита теория самокомпенсации, в которой предполагается, что компенсация легирующего действия примеси Tl осуществляется двукратно заряженными вакансиями халькогена. О наличии самокомпенсации свидетельствует малость параметра $\delta = (n_i/N_i^2) \ll 1$ (N_i — содержание примеси, при которой наблюдается полная компенсация $p-n=0$, n_i — собственная концентрация носителей тока). Оценка этого параметра для теллурида свинца дает величину, большую 1. Это означает, что в рамках этой модели самокомпенсации не должно быть. Интересно проверить это предположение экспериментально.

Рис. 1. Зависимость концентрации носителей тока от количества введенного избыточного свинца (N_{Pb}) в образцах $\text{PbTe} \langle \text{Tl} \rangle$.

N_{Tl} , ат%/с: 1 — 0.05, 2 — 0.2, 3 — 1.0, 4 — 2.0.



В соответствии с методикой, разработанной в [1], определялась зависимость холловской концентрации носителей заряда $p = (eR)^{-1}$ (R — коэффициент Холла) от количества избыточного сверхстехиометрического свинца N_{Pb} , который вводился в шихту образцов. Типичные зависимости p , $n = f(N_{\text{Pb}}/N_{\text{Tl}})$, соответствующие различному содержанию примеси таллия (N_{Tl}) в PbTe , приведены на рис. 1. Излом этих зависимостей, как и ранее, мы связываем с дости-

железа области гомогенности RbTe в присутствии примеси таллия, т. е. е. при концентрации избыточного свинца в RbTe <Tl>. Из рис. 1 видно, что концентрация дырок в образцах, находящихся вблизи области гомогенности, значительно ниже концентрации введенной примеси. Более того, образцы с малыми добавками Tl даже меняют тип проводимости. Указанные особенности экспериментальных данных позволяют говорить об явлении самокомпенсации в RbTe <Tl, Pb_{изб}>.

Попытка объяснить полученные результаты в рамках простой теории, предполагающей компенсацию легирующего действия примеси одиночными вакансиями, не увенчалась успехом. Это видно из рис. 2, на котором экспериментальная зависимость холловской концентрации носителей заряда в образцах с максимальной самокомпенсацией сравнивается с рассчитанной по формуле [1]

$$N = 1 + \frac{\bar{p}^2}{2} + \bar{p} \sqrt{\frac{\bar{p}^2}{4} + 1} + \delta\bar{p},$$

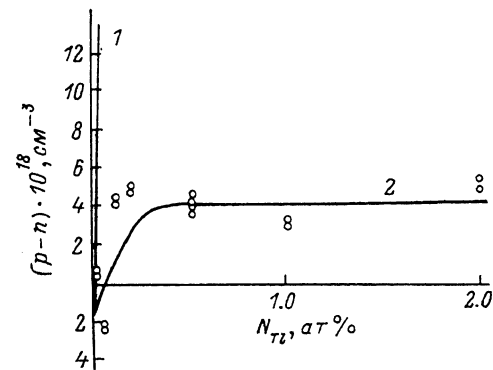


Рис. 2. Зависимость концентрации носителей тока от содержания примеси таллия (N_{Tl}) в образцах RbTe <Tl, Pb_{изб}>, находящихся в равновесии с фазой свинца.

Точки — эксперимент, линии 1, 2 — расчет (1 — $\alpha=0$, 2 — $\alpha=1$).

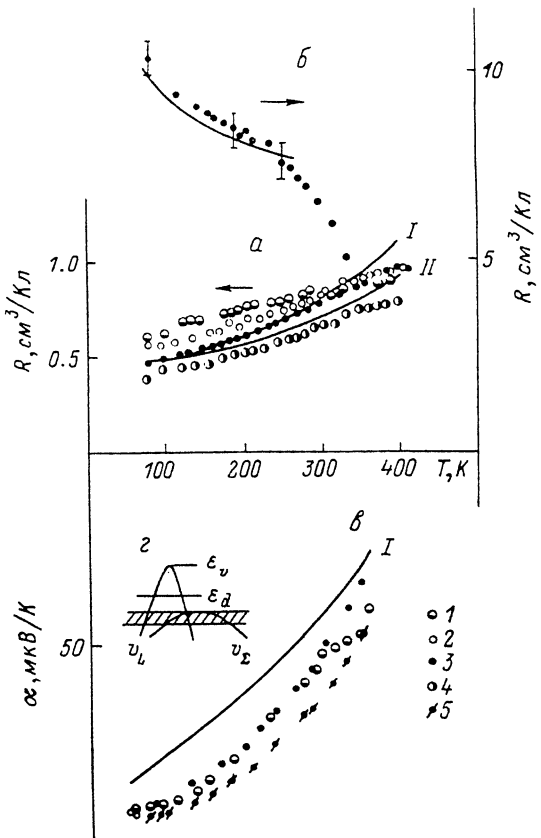


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициентов Холла R (а, б) и термоэдс α (в) в образцах RbTe <Tl, Pb_{изб}>.

а, в) $p_{Tl} \cdot 10^{18}$, см⁻³: 1 — 10, 2 — 12.4, 3 — 13.9, 4 — 16.4, 5 — 14.6. N_{Tl} , ат%: 1 — 1.0, 2 — 5 — 0.2; N_{Pb} , ат%: 1, 4 — 0, 2 — 0.1, 3 — 0.15, 5 — 0.2. Линии I, II — данные [1] для образцов RbTe <Tl> и RbTe <Na> с $p_{Tl} = 1.3 \cdot 10^{19}$ см⁻³. б) компенсированный образец n -типа ($N_{Tl} = 0.05$ ат%); точки — экспериментальные значения R , сплошная линия — расчет с $N_p = 7 \cdot 10^{17}$ см⁻³, $\epsilon_d = -0.013$ эВ. в) энергетический спектр образцов RbTe, легированных таллием и избытком свинца.

где введены следующие обозначения: $\bar{N} \equiv (N_i/N_i^*)$, $\bar{p} \equiv (p-n)/n_i$, $\delta \equiv n_i/N_i^*$. Согласно эксперимента с теорией можно улучшить, если предположить, что компенсация легирующего действия примеси Tl осуществляется не только вакансиями, но и путем образования комплексов. К сожалению, в литературе отсутствуют сведения о возможной структуре комплексов в RbTe <Tl>, поэтому мы предполагаем простейшие, содержащие вакансию Te и атом примеси. Теория самокомпенсации в такой модели была развита в работе [2]. Зависимость разности концентраций $p-n$ от N_i описывается в этом случае уравнением

$$\frac{N_i}{N_i^*} = [F(\bar{n}) + \bar{n}\delta] \frac{2 + \bar{\alpha}F(\bar{n})}{2 - \bar{\alpha}F(\bar{n})},$$

где

$$F(\bar{n}) = \left(\frac{\bar{n}}{2} + \sqrt{\frac{\bar{n}^2}{4} + 1} \right)^2, \quad \bar{n} = \frac{n-p}{n_i}.$$

Параметр $\bar{\alpha}$ при достаточно большой энергии связи комплекса равен

$$\bar{\alpha} = \frac{12N_f^*}{N_0} \exp\left(\frac{\Delta\varphi_{\kappa}}{kT}\right)$$

(N_0 — число узлов в подрешетке халькогена в единичном объеме). Из рис. 2 видно, что можно достичь хорошего количественного согласия теории и эксперимента, если предположить, что параметр связи комплекса $\alpha \approx 1.0$ (энергия связи комплекса $\Delta\varphi_{\kappa} \approx 0.5$ эВ). Таким образом, модель самокомпенсации, учитывающая возможность образования комплексов ион примеси—одиночная вакансия свинца, хорошо описывает максимальную самокомпенсацию в системе RbTe $\langle \text{Tl}, \text{Pb}_{\text{изб}} \rangle$.

В заключение отметим, что на некоторых сериях образцов с фиксированным содержанием Tl зависимость $p=f(N_{\text{Pb}}/N_{\text{Tl}})$ имеет участок промежуточной стабилизации концентрации дырок на уровне $\sim 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (рис. 1, кривая 2). Стабилизация концентрации дырок подтверждает существование квазилокального уровня с энергией $\epsilon_d = 0.1$ эВ, предполагавшегося в работах [3, 4]. Об этом же свидетельствуют данные по явлениям переноса, приведенные на рис. 3. Наблюдаемая зависимость коэффициента Холла от температуры связана со смещением квазилокального уровня ϵ_d . Более низкие значения коэффициента термоэдс при 100 К можно связать с резонансным рассеянием подобно RbTe $\langle \text{Tl} \rangle$ [5].

Для компенсированных образцов n -типа характерно уменьшение коэффициента Холла с ростом температуры во всем диапазоне температур. При низких температурах (до 200 К) это падение мы связываем с ионизацией донорных центров с концентрацией $N_D \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, расположенных в запрещенной зоне приблизительно на 0.01 эВ ниже дна зоны проводимости. На рис. 3 приведена экспериментальная зависимость $R(T)$ в сравнении с расчетной. Дальнейшее падение коэффициента Холла (выше 250 К) связано с началом собственной проводимости, что подтверждается уменьшением коэффициента термоэдс, ростом электропроводности и большой положительной величиной коэффициента поперечного эффекта Нернста—Эттингсгаузена.

Таким образом, полученные экспериментальные данные свидетельствуют о сложном механизме самокомпенсации в RbTe, легированном Tl. Энергетический спектр компенсированных образцов характеризуется наличием резонансного уровня в валентной зоне с энергией ~ 0.1 эВ и локального уровня (с энергией активации ~ 0.01 эВ) под дном зоны проводимости.

Л и т е р а т у р а

- [1] Бытенский Л. И., Кайданов В. И., Мельник Р. Б., Немов С. А., Равич Ю. И. — ФТП, 1980, т. 14, в. 1, с. 74—79.
- [2] Бытенский Л. И., Кайданов В. И., Макеенко В. П., Мельник Р. Б., Немов С. А. — ФТП, 1984, т. 18, в. 3, с. 489—492.
- [3] Кайданов В. И., Немов С. А., Мельник Р. Б., Зайцев А. М., Жуков О. В. — ФТП, 1986, т. 20, в. 5, с. 859—863.
- [4] Feit Z., Eger D., Zemel A. — Phys. Rev. B, 1985, v. 31, N 6, p. 3903—3909.
- [5] Кайданов В. И., Равич Ю. И. — УФН, 1985, т. 145, в. 1, с. 51.
- [6] Вейс А. Н., Кайданов В. И., Немов С. А., Емелин С. Н., Ксендзов А. Я., Шалабутов Ю. К. — ФТП, 1979, т. 13, в. 1, с. 185—187.

Ленинградский политехнический институт
им. М. И. Калинина

Получена 7.06.1988
Принята к печати 15.06.1988