

УДК 621.315.592

Энергетический спектр носителей заряда в твердых растворах $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$

© Ф.Ф. Алиев⁺, У.М. Агаева*, М.М. Зарбалиев*

⁺ Институт физики Национальной академии наук Азербайджана, Az-1143 Баку, Азербайджан

* Сумгаитский государственный университет, Az-5008 Сумгаит, Азербайджан

E-mail: farzali@physics.ab.az; zarbaliymm51@mail.ru

(Получена 27 января 2015 г. Принята к печати 16 сентября 2015 г.)

Исследованы температурные зависимости электропроводности $\sigma(T)$, коэффициента Холла $R(T)$ и коэффициента термоэдс $\alpha(T)$ в твердых растворах $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ ($0 \leq x \leq 0.10$) при 80–1000 К. По данным кинетических параметров определены эффективные массы электронов и дырок. Полученные экспериментальные данные о $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ интерпретированы в рамках модели с одним и двумя типами носителей заряда. Установлено, что начиная с $x = 0.05$ твердые растворы $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ относятся к узкозонным полупроводникам, обладающими высокими матричными элементами взаимодействия.

В [1] показано, что в системе $\text{TlInTe}_2\text{—TlYbTe}_2$ наблюдается область растворимости на основе TlInTe_2 до 10% TlYbTe_2 при комнатной температуре. Характерной особенностью кристаллов твердых растворов $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ является наличие в их кристаллической решетке большой концентрации ($10^{18}\text{—}10^{20}\text{ см}^{-3}$) стехиометрических вакансий и связанных с ними локализованных состояний в запрещенной зоне [1–6] и эта величина растет с ростом мольной доли иттербия в составе твердых растворов. Образование твердых растворов приводит к изменениям электронной и решеточной подсистем кристалла, вызывая статическую деформацию решетки и возмущение электрон-фононного спектра. С ростом концентрации твердого раствора среднее расстояние между атомами растворенного вещества TlYbTe_2 достигает значений, при которых межпримесное взаимодействие начинает вносить заметный вклад в энергию кристалла растворителя TlInTe_2 [2], и это приводит к появлению принципиально новых свойств, не характерных для исходного материала. Так, при легировании TlInTe_2 некоторыми редкоземельными элементами (Ge, Pi, Nd, Eu, Gy, Yb) наблюдается эффект стабилизации уровня Ферми, когда его положение определяется только составом сплава и не зависит от концентрации легирующих примесей [1,3,7].

В работе [4] исследованы электрические свойства $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ при слабых и сильных электрических полях, и авторы наблюдали переключение ВАХ. В работе [5,6] исследованы температурные зависимости термоэдс и теплопроводности твердых растворов $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ и показано, что в рассеянии фононов одновременно с U -процессами активную роль играют нормальные процессы и рассеяние на точечных дефектах. Авторы [1–4] так же показали, что образцы $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ обладают переключающими свойствами с электрической памятью и высокой термоэффективностью.

Несмотря на то что исследованию электрических и тепловых свойства $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$, посвящен ряд работ [1–6], в них не было изучено влияние иттербия на энергетический спектр носителей заряда. Данный вопрос представляет особый научный и практический интерес, так как переход от TlInTe_2 к $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ позволяет улучшить термоэлектрические свойства при температуре $T > 600\text{ К}$ и создать термопары для термогенераторов в качестве p -ветви [8]. Изучение электронного спектра носителей заряда уделяет особое внимание стабилизации работы термогенераторов [8]. Поэтому цель настоящей работы состоит в изучении энергетического спектра носителей заряда в твердых растворах $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$. В данной работе исследованы температурные зависимости электропроводности (σ), коэффициент Холла (R) и термоэдс (α) в твердых растворах $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ ($0 \leq x \leq 0.10$) при 80–1000 К. Измерения σ , R и α проводились на образцах с омическими контактами при постоянном токе [5] в постоянных магнитных полях вплоть до 1200 А/м. Погрешность измерений не превышала 4–5%.

1. Синтез образцов

Синтез твердых растворов системы $\text{TlInTe}_2\text{—TlYbTe}_2$ проводился сплавлением исходных компонентов, взятых в стехиометрическом соотношении. Для синтеза использовались материалы чистотой 99.999–99.992 мас.%. Согласно диаграмме состояния [1], незначительное отклонение от стехиометрии в ту или иную сторону может привести к получению гетерофазных образцов. Поэтому в шихту добавляли до 0.05 мас.% теллура сверх стехиометрии.

Синтез проводили в откачанных до 10^{-2} Па и запаянных кварцевых ампулах в следующем режиме: температуру нагревателя, содержащего кварцевые ампулы с

веществом, повышали со скоростью 20–25 К/ч до 750 К. При этой температуре образцы выдерживали в течение 3–4 ч, а затем нагревали до 1100 К и выдерживали еще 4 ч, после гомогенизации в течение 25–30 ч при 1250 К ампулу перемещали через зону с температурным градиентом 50 К/см со скоростью 2–3 мм/ч.

Полученные слитки медленно охлаждали (2 К/ч) до 1000 К, а затем до 500 К со скоростью 4 К/ч, после чего печь выключали. В результате были получены монокристаллы и крупноблочные поликристаллы p -TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$. Измерения проводились на поликристаллических образцах.

2. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 приведены температурные зависимости электропроводности $\sigma(T)$ твердых растворов TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$. Как видно из рисунка, зависимости $\sigma(T)$ для разных составов твердых растворов существенно отличаются друг от друга. Для исходного соединения TlInTe $_2$ собственная область проводимости начинается при температуре $T \sim 700$ К, а в твердых растворах TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$ по мере роста относительного содержания иттербия в составах собственная область смещается в сторону более высоких температур (рис. 1). По высокотемпературным наклонам кривых $\lg \sigma(10^3/T)$ была оценена термическая ширина запрещенной зоны (E_g) для исследованных образцов и было выявлено, что по мере роста содержания относительного количества иттербия в составах твердых растворов E_g изменяется от 0.70 эВ для исходного соединения TlInTe $_2$ и до 0.54 эВ для TlIn $_{0.90}$ Yb $_{0.10}$ Te $_2$. Это свидетельствует о том,

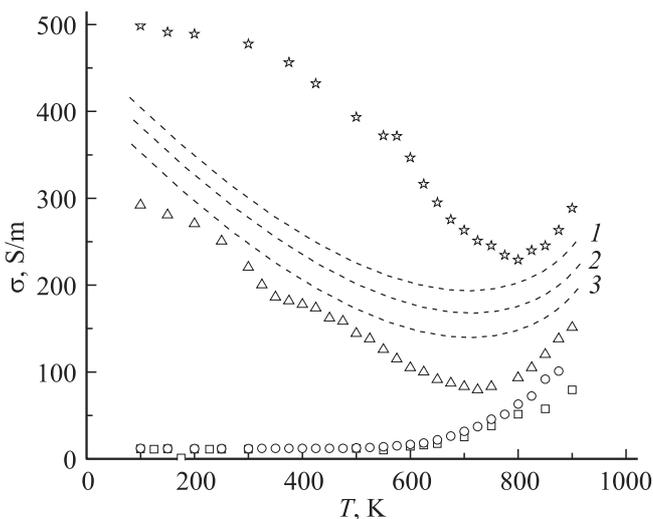


Рис. 1. Температурные зависимости электропроводности в TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$; точки — экспериментальные данные; \square — ($x = 0$), \circ — ($x = 0.02$), \triangle — ($x = 0.05$), \star — ($x = 0.10$). Пунктирные линии — расчетные данные для образца TlIn $_{0.95}$ Yb $_{0.05}$ Te $_2$ с параметрами: 1 — r_i, r_{ac} ; 2 — r_i, r_{ac}, r_{op} ; 3 — r_i, r_{ac}, r_{op}, r_d .

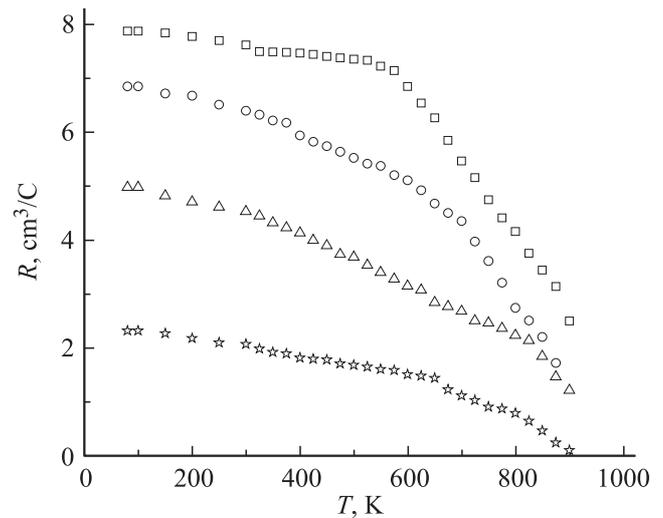


Рис. 2. Температурные зависимости коэффициента Холла (при $H = 1200$ А/м) в TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$. Обозначения те же, что и на рис. 1.

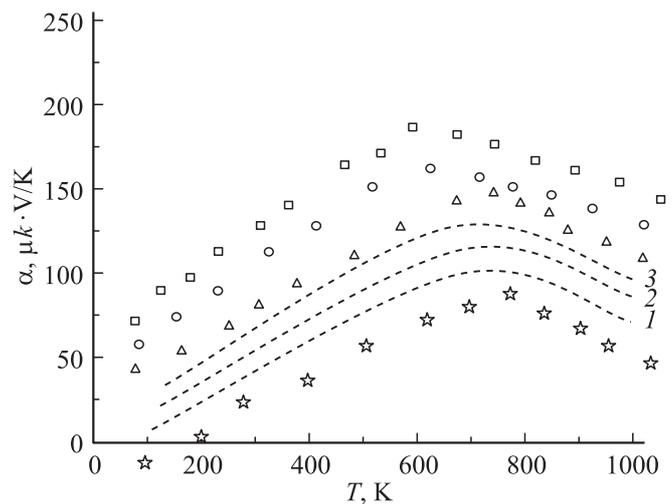


Рис. 3. Температурные зависимости термоэдс в TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$. Обозначения те же, что и на рис. 1.

что в твердых растворах наряду с „самолегированием“ происходит также „самокомпенсация“.

На рис. 2 и 3 представлены температурные зависимости коэффициентов Холла $R(T)$ и термоэдс αT твердых растворов TlIn $_{1-x}$ Yb $_x$ Te $_2$. Знаки обоих коэффициентов положительны, и это свидетельствует о том, что проводимость полностью обеспечивается дырками.

Из рис. 2 видно, что при слабом замещении атомов In атомами Yb, коэффициент Холла уменьшается и соответственно концентрация дырок увеличивается. На всех образцах при $T > 700$ К наблюдается область собственной проводимости. При дальнейшем увеличении относительного содержания Yb в составах, область собственной проводимости смещается в сторону более высоких температур. Данный факт наблюдается также

Зонные параметры и подвижности дырок в твердых растворах $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$

Параметры	Образцы							
	$T = 100\text{ К}$				$T = 300\text{ К}$			
	$x = 0$	$x = 0.02$	$x = 0.05$	$x = 0.10$	$x = 0$	$x = 0.02$	$x = 0.05$	$x = 0.10$
E_g (эВ)	0.70	0.66	0.62	0.54	0.68	0.63	0.59	0.51
m_p^*	0.55	0.52	0.48	0.43	0.53	0.51	0.46	0.40
m_n^*	0.040	0.036	0.034	0.031	0.037	0.033	0.032	0.030
$P \cdot 10^8$ (эВ · см)	4.1	4.0	3.9	3.6	4.0	3.9	3.8	3.5
$\mu_p \cdot 10^{-3}$ (см ² /В · с)	210	230	1200	1350	180	195	1100	1250

на температурной зависимости $\alpha(T)$, откуда видно, что до температуры $T \sim 650\text{ К}$ $\alpha(T)$ линейно возрастает, а при наступлении собственной области, медленно уменьшается. Из рис. 1–3 видно, что начиная с $x \geq 0.05$ температурный ход $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ такой же, как и для узкозонных полупроводников [9].

В данных образцах слабая зависимость $R(T)$ и линейная зависимость $\alpha(T)$ до $T \sim 650\text{ К}$ означает, что проводимость осуществляется одним типом (p -тип) носителей заряда, что и дает возможность определить эффективную массу дырок. В случае квадратичного закона дисперсии и для любой степени вырождения коэффициент термоэдс в классически сильном магнитном поле описывается соотношением [10]

$$\alpha_\infty = -\frac{k}{e} \left[\frac{5}{3} \frac{F_{3/2}(\eta^*)}{F_{1/2}(\eta^*)} - \eta^* \right], \quad (1)$$

где η^* — приведенный химический потенциал, $F(\eta^*)$ — однопараметрический интеграл Ферми. Известно, что термоэдс при сильном магнитном поле выражается как $\alpha_\infty = \alpha + \Delta\alpha_\infty$, где $\Delta\alpha_\infty$ — магнитотермоэдс в классически сильном магнитном поле. В узкозонных полупроводниках $\Delta\alpha_\infty$ составляет ~ 10 – 12% от величины [11].

Коэффициент Холла в сильном магнитном поле (R_∞) определяется только концентрацией носителей заряда:

$$R_\infty = \frac{1}{ep}. \quad (2)$$

В свою очередь концентрация носителей заряда описывается соотношением [10]

$$n, p = 4\pi \frac{2m_n^* m_p^* kT}{h^2} F_{3/2}(\eta^*), \quad (3)$$

где m_n^* и m_p^* — эффективные массы электронов и дырок.

Из (3) по известным значениям p , T и η^* была определена эффективная масса дырок m_p^* (см. таблицу).

При определении температурной зависимости $E_g(T)$ использовалось соотношение $\partial E_g / \partial T = -1.2 \cdot 10^{-4}$ эВ/К [12]. Получено, что для всех образцов эффективная масса дырок в интервале температур 100 – 650 К почти не меняется. Это указывает на то, что валентная зона $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$ подчиняется квадратичному закону дисперсии. Следует отметить, что до

настоящего времени не был исследован энергетический спектр зоны проводимости в $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$.

Используя значение эффективной массы дырок и полагая, что концентрация доноров $N_d = 0$, по значению коэффициента Холла при $T \leq 700\text{ К}$ находим концентрацию акцепторов $N_a \sim 1.2 \cdot 10^{18}$ см⁻³ (образец $x = 0.05$) и температуру снятия вырождения дырочного газа при $T_{nd} \sim 640\text{ К}$.

При $T \geq 640\text{ К}$ вырождение дырок снимается и начинается собственная проводимость, о чем свидетельствуют экспериментальные кривые, приведенные на рис. 1–3. В области собственной проводимости величина собственной концентрации носителей заряда определяется из уравнения электронейтральности $N_a = p - n$ как

$$n_i = 4.9 \cdot 10^{15} (m_n^* m_p^* e)^{3/4} T^{3/2} \exp(-E_g/2kT), \quad (4)$$

где n_i в области собственной проводимости для двух типов носителей заряда $R(T)$ и $\sigma(T)$ в слабых магнитных полях определяются по следующим соотношениям [13]:

$$\left. \begin{aligned} R &= \frac{1}{N_a e} \frac{(1-c)(1-b^2c)}{(1+bc)^2} \\ \sigma &= N_a e b \mu_p \frac{1+bc}{b(1-c)} \end{aligned} \right\}, \quad (5)$$

где $c = n_i / (N_a + n_i)$, $b = \mu_n / \mu_p$ — отношение подвижности электронов к подвижности дырок. Значение N_a можно вычислить по начальной части кривой $R(T)$, на которой R не зависит от температуры. Равенство $r_n = r_p$ (r_n, r_p — факторы рассеяния) справедливо при условии одинаковой зависимости времени релаксации электронов и дырок от энергии [10]. В этом случае b не зависит от температуры. Температурная зависимость подвижности дырок определяется в виде $\mu_{p(T)} = \mu_p(100\text{ К}) \cdot T^{-0.7}$, где $\mu_p(100\text{ К}) = R_\sigma(100\text{ К})$. Решением системы (5) определялись c и b и находилось значение собственной концентрации n_i .

Учитывая значения n_i, m_p^* и E_g в (4), можно определить эффективную массу электронов m_n^* (см. таблицу).

Как видно из таблицы, значения m_p^*, m_n^* в $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$ относительно меньше, чем в других растворах $TlIn_{1-x}Ln_xTe_2$ [12]. Из таблицы также видно, что

в образцах $\text{Pn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ в основном существует корреляция между шириной запрещенной зоны, эффективной массой m_p^* , m_n^* и матричным элементом взаимодействия (P). Из этого ряда выпадает лишь то, что по сравнению с другими узкозонными полупроводниками [9] большая эффективная масса электронов в $\text{Pn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ может быть связана либо с матричным элементом взаимодействия, либо с кристаллическими структурами. Твердые растворы $\text{Pn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ кристаллизуются в тетрагональной сингонии, как и исходное соединение PnTe_2 [14]. В этой сингонии взаимодействие электронов с кристаллической решеткой незначительно [15]. В силу [15] можно полагать, что большие значения E_g и m_n^* не связаны с кристаллической структурой. Можно ожидать, что их значения обусловлены высоким значением матричного элемента взаимодействия:

$$P = \left[\frac{3\hbar^2}{4m_0} E_G (1 - m_n^*) \right]^{1/2}. \quad (6)$$

Из рис. 2 видно, что до температуры $T \sim 650$ К концентрация дырок возрастает настолько, что продолжается вырождения дырочного газа, что и также характерно для узкозонных полупроводников [9]. Эта оценка подтверждается температурными зависимостями σ и R при $T \leq 700$ К.

Для проверки полученных данных о m_n^* , m_p^* и E_g были рассчитаны температурные зависимости $\sigma(T)$ и αT , которые до $T \leq 700$ К (где $\rho\mu_p \gg \rho\mu_n$) определяются по следующим соотношениям:

$$\sigma = e\rho\mu_p,$$

$$\alpha = -\frac{k}{e} [r + 2 - \eta^*] \quad [10], \quad (7)$$

а после $T \leq 700$ К выражения σ , α в области собственной проводимости можно представить как функции отношения дырочной и электронной составляющих проводимости ($\alpha = \sigma_p/\sigma_n$) [16]:

$$\sigma = \sigma_i \frac{b^{1/2}(a+1)}{a^{1/2}(b+1)},$$

$$\alpha = -\frac{k}{2e} \left[\frac{\varepsilon_0(a-1)}{(a+1)} + \chi - \ln a \right], \quad (8)$$

где

$$\sigma_i = en_i(\mu_n + \mu_p), \quad \varepsilon_0 = \left(\frac{E_g}{kT} \right) + r_n + r_p,$$

$$\chi = r_p - r_n + \ln \left[b \left(\frac{m_n^*}{m_p^*} \right)^{3/2} \right] n_i.$$

Используя (3), определяется концентрация электронов n .

Нами было принято следующее приближение: за счет большой эффективной массы дырок концентрация их

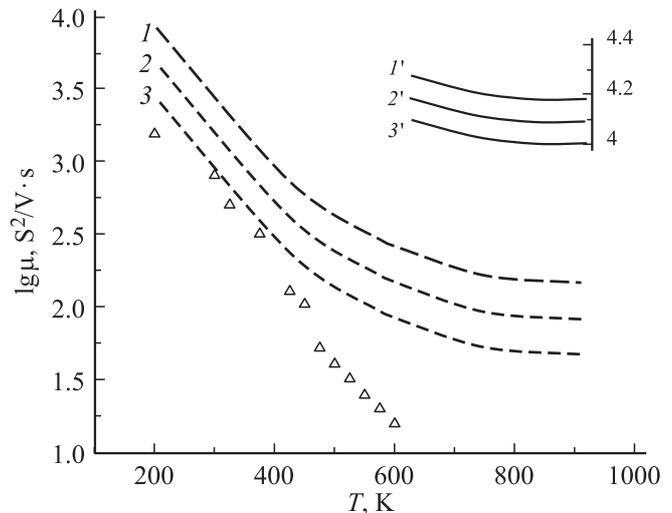


Рис. 4. Температурные зависимости подвижности электронов (с параметрами: 1' — r_i, r_{ac} ; 2' — r_i, r_{ac}, r_{op} ; 3' — r_i, r_{ac}, r_{op}, r_d и дырок (обозначения те же, что и на рис. 1) для образца $\text{Pn}_{0.95}\text{Yb}_{0.05}\text{Te}_2$. Точки — экспериментальные данные.

$p = N_a$ (где $N_a \gg p_i$) и до $T \sim 650$ К остается постоянной, а при $T \geq 700$ К $p = N_a + p_i$. Химический потенциал для электронов и дырок при $T \geq 700$ К имеет вид

$$\eta_{n,p} \approx -\frac{E_g}{2} + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right). \quad (9)$$

При температурах до $T \sim 600$ К температурную зависимость $\mu_p(T)$ можно выразить как $\mu_p = R\sigma$ (рис. 4).

Значения $\mu_n(T)$ при $T > 700$ К, когда электронный вклад в температурные зависимости $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ становится заметным на фоне дырочной проводимости (рис. 1, 3), для случаев невырожденного электронного газа и при его вырождении для стандартной (параболической) зоны проводимости (также валентной зоны) определялись по формуле [10]

$$\mu(T) = \frac{e \langle \tau_{ef}(T, E) \rangle}{m^*}, \quad (10)$$

где τ_{ef} — время релаксации импульса, m^* — эффективная масса носителей заряда (угловыми скобками обозначено усреднение по энергии электронов).

При существовании двух механизмов рассеяния с параметрами r_i и r_{ac} эффективное транспортное время релаксации $\tau(T, E)$ имеет вид [10]

$$\tau_{ef}(T, E) = \frac{\tau_i(T)\tau_{ac}(T) \left(\frac{E}{kT} \right)^{r_{ac}-1/2}}{\tau_i(T) + \tau_{ac}(T) \left(\frac{E}{kT} \right)^{r_{ac}-r_i}}. \quad (11)$$

При определении $\tau_i(T)$ для рассеяния на ионизованных примесных атомах применима формула [10]

$$\tau_i(T) = \frac{\chi_1 (2m_n^* m_p^*)^{1/2} (kT)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F}, \quad (12)$$

где χ_1 — диэлектрическая постоянная кристалла, N_i — концентрация ионов примеси. Функция F определяется согласно [13]:

$$F = \ln(1 + \xi) - \frac{\xi}{1 + \xi}; \quad \xi = 4k_0^2 r_s, \quad (13)$$

где r_s — радиус экранирования для невырожденных полупроводников, который определяется как [13]

$$r_s = \left(\frac{\chi_1 k_0 T}{4\pi e^2 n} \right)^{1/2}. \quad (14)$$

Здесь n — концентрация электронов (где $T > 700$ К, $n = n_i^2/p$), k_0 — волновое число электрона с энергией $E = \hbar^2 k_0^2 / 2m^*$.

Формула для рассеяния электронов на акустических фононах для стандартной зоны имеет вид [10]

$$\tau_{ac}(T) = \frac{9\pi}{2} \frac{\rho v_0^2 \hbar^4}{C^2 (2m_n^*; m_p^* kT)^{3/2}}, \quad (15)$$

где ρ — плотность кристалла, C — константа, v_0 — скорость звука в кристалле. Величина C связана с константой деформационного потенциала решетки E_d следующим образом [10]: $E_d = \frac{2}{3}C$. Значения $\chi_1(T)$, $\rho = (7.2-8)$ г/см³, $v_0 = 5 \cdot 10^5$ см/с взяты из [12] и принималось $E_d = 30$ эВ, можно рассчитать $\tau_{ac}(T)$.

Подставив (12) и (15) в (11), можно определить $\tau_{ef}(T) = \langle \tau_{ef}(T, E) \rangle$ при одновременном рассеянии электронов на ионизованных примесях и на акустических фононах, а с помощью соотношения (10) можно определить температурную зависимость подвижности для вырожденного электронного и дырочного газов (μ_n и μ_p) (рис. 4). Учитывая значения m_n^* , m_p^* , μ_n , μ_p и n_i в (7) и (8) можно определить температурную зависимость электропроводности и термоэдс (рис. 1, 3).

Как видно из рис. 1, 3, 4, количественно не имеется согласования между расчетными и экспериментальными кривыми. Для преодоления расхождения между расчетными и экспериментальными данными необходимо учитывать новые центры рассеяния. В этом случае расчет $\mu_2(T)$ при любой степени вырождения проводится следующим образом:

$$\mu_2 = \left(\frac{1}{\mu_{i,ak}} + \frac{1}{\mu_{op}} \right)^{-1}. \quad (16)$$

Здесь μ_{op} — подвижность с учетом рассеяния носителей заряда на оптических фононах, которая рассчитывалась следующим образом. При условии

$$r_s = \left[\frac{\chi_1 \hbar^2}{4m^* e^2} \left(\frac{\pi}{3\hbar} \right)^{1/2} \right]^{1/2}$$

и при $kT \gg \hbar\omega_0$ время релаксации [10]

$$\tau_{op}(T) = \frac{\sqrt{2}}{4\pi} \frac{M\Omega_0(\hbar\omega_0)^2}{e^4(m^*kT)^{1/2}} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2}, \quad (17)$$

где M — приведенная масса ионов в элементарной ячейке, Ω_0 — объем элементарной ячейки. Поставив (17)

в (10), можно определить температурную зависимость подвижности носителей заряда при механизме рассеяния на оптических фононах. Учитывая значения μ_{op} в (16), можно определить $\mu_2(T)$ и подставляя значения $\mu_2(T)$ в (7) и (8), рассчитать $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$.

Как видно из рис. 1, 3, 4, данный подход также не поможет количественному согласованию расчетных и экспериментальных данных (кривые 2).

В работе [2] показано, что $TlIn_{1-x}Ln_xTe_2$ характеризуется дефектами (по мнению авторов, эти дефекты являются точечными), вакансиями In (или Ln) в междоузлиях, появляющихся за счет статически расположенных атомов In в подрешетке. Поэтому в (16) нужно учесть вклад подвижности μ_d , рассчитанный с помощью времени релаксации при механизме рассеяния на точечных дефектах для стандартной зоны, как в [10]:

$$\tau_d(T) = \frac{\pi \hbar^4}{(2m^*kT)^{1/2} m^8 V_0^2 N_d^1} \left(\frac{E}{kT} \right)^{-1/2}, \quad (18)$$

где V_0 — постоянная, характеризующая амплитуду δ потенциала, N_d^1 — концентрация точечных дефектов, которую принялись как $N_d^1 \approx N_a$. Учитывая значения V_0 , N_d^1 и m^* в (18), определяем $\tau_d(T)$, после чего по (10), можно определить $\mu_d(T)$. Тогда эффективную подвижность определим следующим образом:

$$\mu_3 = \left(\frac{1}{\mu_{i,ac}} + \frac{1}{\mu_{op}} + \frac{1}{\mu_d} \right)^{-1}. \quad (19)$$

Учитывая значения $\mu_3(T)$ в (7) и (8), были рассчитаны $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$.

Как видно из рис. 1, 3, 4 (кривые 3), расчетные данные относительно близки к экспериментальным данным. Количественное сопоставление данных по $\mu_p(T)$ показало, что расчетных значений подвижности дырок больше экспериментальных. Это может быть связано с двумя причинами: 1) в $TlIn_{1-x}Yb_xTe_2$ значение радиуса экранировки отличается от значения постоянной решетки, 2) в этом материале дырочный газ сильно вырожденный. Вторая причина более вероятна. Для подтверждения данного предположения по формуле (1) были определены приведенные химические потенциалы (η^*) и получено, что для всех образцов при $T = 100$ К $\eta^* \geq 10$. С ростом температуры снимаются вырождения, в результате чего увеличивается разброс между расчетными и экспериментальными данными (рис. 1–4). По экспериментальным данным $\mu_p(T)$, количественно трудно отличить рассеяние на акустических и оптических фононах в сильно вырожденных случаях. Превалирующий механизм рассеяния легко выделить из концентрационной зависимости $\mu(n)$. Как отмечалось в [17], $\mu_{ac} \sim n^{-1}$, $\mu_{op} \sim n^{1/3}$, $\mu \sim n^{2/3}$. Из рис. 4 видно, что в зависимости $\mu_p \sim T^{-\alpha_0}$ показатель степени $\alpha_0 \approx 0.7$ и μ_p почти не зависит от концентрации дырок. Это означает, что до $T \leq 700$ К механизм рассеяния дырок носит смешанный

характер. По сравнению с другими узкозонными полупроводниками [18] подвижность электронов и дырок в $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ мала, вероятной причиной чего является большая эффективная масса носителей заряда в них.

Итак, в исследованной области температур твердый раствор $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ ($0 \leq x \leq 0.10$) обладает дырочной проводимостью при сильно вырожденном состоянии дырочного газа. При $T \geq 700$ К наблюдается область собственной проводимости и характер температурных зависимостей σ и α объясняется наличием двух типов носителей заряда. Начиная с $x = 0.05$, при переходе от TlInTe_2 к $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$, температурный ход $\sigma(T)$ качественно и количественно сильно отличается. Предполагается, что этот переход сопровождается переходом от полупроводника к узкозонному полупроводнику. Предложенная модель с одним (дырки) и двумя (электроны и дырки) типами носителей заряда с учетом рассеяния носителей заряда на ионных центрах, на акустических и оптических фононах, а также на дефектах хорошо описывает электрические и термоэлектрические свойства твердых растворов $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ при $0.05 \leq x \leq 0.10$.

Список литературы

- [1] М.М. Зарбалиев. Неорг. матер., **35** (5), 560 (1999).
- [2] Г.С. Оруджев, Э.М. Годжаев, Р.А. Керимова. ФТТ, **48** (1), 40 (2006).
- [3] Л.Д. Иванова, Ю.В. Петрова, Ю.В. Гранаткина, Т.Е. Свечникова, М.А. Коржуев, В.С. Земсков. Неорг. матер., **43** (12), 1436 (2007).
- [4] М.М. Зарбалиев. Изв. АН Азерб. Респ. Физика, **5** (3), 26 (1999).
- [5] Э.М. Годжаев, Р.А. Керимова. Неорг. матер., **40** (11), 1314 (2004).
- [6] М.М. Зарбалиев, А.М. Ахмедова, У.М. Зарбалиева. Вестн. Бакинского гос. ун-та, **1**, 1435 (2011).
- [7] Б.А. Волков, Л.И. Рябова, Д.Р. Хахлов. УФН, **172** (8), 875 (2002).
- [8] T.C. Harman. J. Appl. Phys., **29**, 1471 (1958).
- [9] С.И. Радауцан, Э.К. Арутанов, В.И. Пругло. *Полуметаллы и узкозонные полупроводники* (Кишинев, Штиинца, 1979).
- [10] Б.М. Аскеров. *Кинетических эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1970).
- [11] Ф.Ф. Алиев, Г.Г. Гусейнов, Г.П. Пашаев, Г.М. Агамирзоева, А.Б. Магеррамов. Неорг. матер., **44** (2), 156 (2008).
- [12] Э.М. Керимова. *Кристаллофизика низкоразмерных халькогенидов* (Баку, ЭЛМ, 2012).
- [13] Ф.Ф. Алиев, Э.М. Керимова, С.А. Алиев. ФТП, **36** (8), 932 (2002).
- [14] M. Duczmal, L. Pawlok. J. Alloys Comp., **316**, 262 (1997).
- [15] И.М. Цидильковский. *Электронные дырки в полупроводниках* (М., Наука, 1970).
- [16] В.М. Везин, Г.П. Вяткин, В.Н. Когев, П.И. Карих. ФТП, **18** (2), 312 (1984).
- [17] Г.Б. Абдуллаев, М.И. Алиев, С.А. Алиев, Д.Г. Араслы, Н.А. Вердиева, Р.Э. Гусейнов. *Кинетические явления в Ag_2Te и Ag_2Se* (Преп. № 30, Баку, 1974).
- [18] С.А. Алиев, Ф.Ф. Алиев. Изв. АН СССР. Сер. Неорг. матер., **21** (11), 1869 (1985).

Редактор Г.А. Оганесян

The energetic spectrum of charge carriers in solid solutions of $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$

F.F. Aliev⁺, U.M. Agaeva^{*}, M.M. Zarbaliyev^{*}

⁺ Institute of Physics,
Azerbaijan Academy of Sciences,
Az-1143 Baku, Azerbaijan

^{*} Sumgait State University,
Az-5008 Sumgait, Azerbaijan

Abstract The temperature dependence of the electrical conductivity $\sigma(T)$, the Hall coefficient $R(T)$ and the coefficient of thermopower $\alpha(T)$ in the solid solutions $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ ($0 \leq x \leq 0.10$) at 80–1000 K have been investigated. The effective masses of electrons and holes have been determined on the basis of the kinetic parameters. The experimental data on $\sigma(T)$ and $\alpha(T)$ have been interpreted in the framework of the model involving one or two types of charge carriers. It was established that starting with $x = 0.05$ solid solutions of $\text{TlIn}_{1-x}\text{Yb}_x\text{Te}_2$ belong to the narrow-gap semiconductors having high interaction matrix element.