

Рассеяние электронов на акцепторных центрах в p -Ag₂Te при низких температурах

© Ф.Ф. Алиев[¶], М.Б. Джафаров, Г.З. Аскерова, Э.М. Годжаев*

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

* Азербайджанский технический университет,
Az-1143 Баку, Азербайджан

(Получена 2 февраля 2010 г. Принята к печати 12 февраля 2010 г.)

Наблюдалось резонансное рассеяние электронов в p -Ag₂Te при концентрациях акцепторов $N_a \leq 4.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ в интервале температур ~ 50 –80 К. Проведен расчет вклада резонансного рассеяния в температурные зависимости электропроводности $\sigma(T)$ и термоэдс $\alpha_0(T)$. Показано, что вклад резонансного рассеяния электронов в зависимостях $\sigma(T)$ и $\alpha_0(T)$ больше, чем рассеяние носителей заряда на акустических фононах.

Теллурид серебра относится к числу узкозонных полупроводников, у которых эффективная масса электронов на дне зоны проводимости маленькая и закон дисперсии электронов соответствует модели Кейна [1], благодаря чему Ag₂Te обладает высокой подвижностью электронов и малой теплопроводностью. Поэтому он очень чувствителен к внешнему воздействию. Перечисленные уникальные свойства открывают богатые перспективы их практического применения. В связи с этим изучение электрических и термоэлектрических свойств Ag₂Te с избытком Te (p -Ag₂Te) при низких температурах представляет особый интерес. В работах [2,3] установлено, что в n -Ag₂Te при концентрации доноров $N_d \geq 6.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ резонансное рассеяние электронов на донорных примесях не наблюдается. Данный вопрос в p -Ag₂Te, где концентрация доноров примерно близка к собственной концентрации, т.е. $N_d \approx n_i$, пока не исследован.

На всех образцах p -Ag₂Te с $N_d \gtrsim 6.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ в области температур ~ 4.2 –200 К наблюдаются две особенности на температурной зависимости электропроводности $\sigma(T)$: плато при $T < 40$ К и минимум при $T \approx 65$ К (рис. 1). Обнаружено, что с уменьшением N_a глубина минимума $\sigma(T)$ растет.

Коэффициент Холла R до $T \approx 40$ К не зависит от температуры, выше $T \approx 40$ К уменьшается, при $T \approx 65$ К изменяет знак проводимости с p на n и далее при $T \approx 80$ К проходит через минимум (рис. 1). Температурный ход термоэдс $\alpha_0(T)$ полностью соответствует ходу $R(T)$, т.е. $\alpha_0(T)$ до $T \approx 40$ К линейно растет с температурой, при $T \approx 65$ К дает инверсию знака, а при $T \approx 80$ К проходит через минимум (рис. 2). Для концентрации $N_a \leq 6.25 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ зависимости $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ проанализированы в работе [1]. Для анализа $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ данного образца ($N_a \leq 4.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$) проведен следующий анализ.

Как известно, для двух типов носителей заряда σ и α_0 определяются по следующим формулам:

$$\sigma = e(nU_n + pU_p) = \sigma_n + \sigma_p,$$

$$\alpha_0 = \frac{\alpha_p \sigma_p - \alpha_n \sigma_n}{\sigma_p + \sigma_n}, \quad (1)$$

где U_n , U_p , n , p , σ_n , σ_p , α_n и α_p — подвижности и концентрации электронов и дырок, парциальные электропроводности и термоэдс соответственно. Расчет температурных зависимостей $U_n(T)$ и $U_p(T)$ для данного образца проведен по методике [1], а концентрация электронов

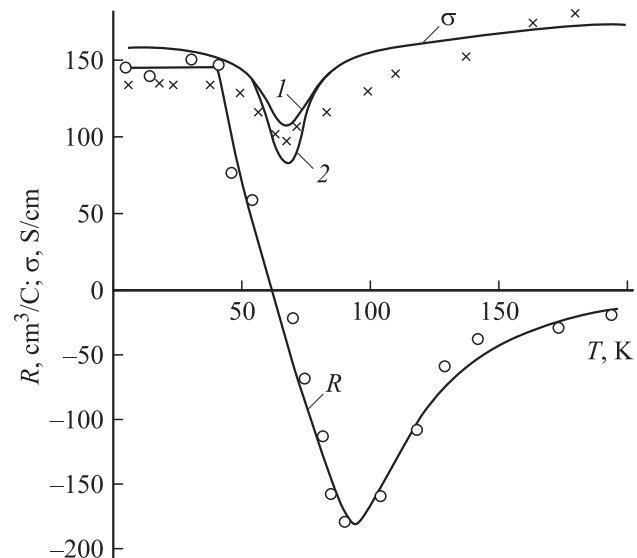


Рис. 1. Температурные зависимости электропроводности σ и коэффициента Холла R в p -Ag₂Te. Точки — экспериментальные данные, сплошные линии — расчет: 1 — рассеяние электронов и дырок на ионах и акустических колебаниях, 2 — резонансное рассеяние электронов и дырок на акустических колебаниях решетки.

[¶] E-mail: farzali@physics.ab.az

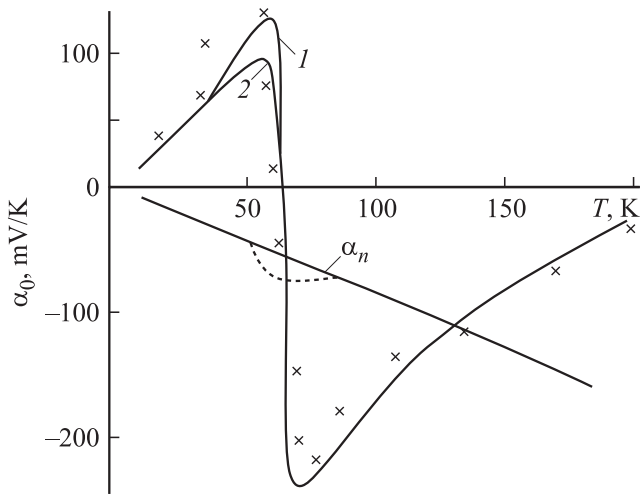


Рис. 2. Температурная зависимость термоэдс $\alpha_0(T)$ в p - Ag_2Te (точки). Расчет: 1 — рассеяние электронов и дырок на ионах и акустических колебаниях, 2 — резонансное рассеяние электронов и рассеяние дырок на акустических колебаниях решетки. Пунктирная линия — резонансное рассеяние электронов.

равна

$$n = \frac{n_i^2}{p_0 + n}$$

или

$$n^2 + pn + n_i^2 = 0, \quad (2)$$

где n_i — собственная концентрация, равная

$$n_i = 4.9 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_n m_p}{m_0} \right)^{3/4} T^{3/2} \exp(-\varepsilon_g/2k_0T),$$

$p = p_0 + n_i$ — общая концентрация дырок. Здесь p_0 определяется по коэффициенту Холла $R(T)$, где R не зависит от температуры. Из решения (2) определена концентрация электронов в исследованном температурном интервале. В работе [4] установлено, что валентная зона параболична, и тогда концентрация p определяется по [1]:

$$p = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\mu_p^*). \quad (3)$$

В работе [5] установлено, что закон дисперсии для электронов соответствует модели Кейна, в этом случае концентрация электронов определяется следующим образом:

$$n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} I_{3/2}^0(\mu_n^*, \beta), \quad (4)$$

где m_n и m_p — эффективные массы электронов и дырок, $F(\mu^*)$ и $I_{3/2}^0(\mu^*, \beta)$ — одно- и двух-параметрические интегралы Ферми,

$$\mu^* = \frac{\mu}{k_0 T},$$

μ — химический потенциал, β — параметр, характеризующий нестандартность зоны. Термоэдс для обоих

случаев определяется, как

$$\alpha_p = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{F_{r+2}(\mu_p^*)}{F_{r+1}(\mu_p^*)} - \mu_p^* \right],$$

$$\alpha_n = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{I_{3/2,0}^1(\mu_n^*, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\mu_n^*, \beta)} - \mu_n^* \right]. \quad (5)$$

Из соотношений (3), (4) были определены μ_p^* и μ_n^* , на их основе по формулам (5) определены α_p и α_n , а по значениям n, p , а также U_n и U_p (рис. 3) определены σ_c и σ_p . С учетом их численных значений в формуле (1) определены $\sigma(T)$ и $\alpha_0(T)$ (рис. 1, 2). Здесь одна особенность вызывает интерес: теоретическое уменьшение $\sigma(T)$ за счет рассеяния носителей заряда на ионах и тепловых колебаниях решетки, которое составляет примерно $\sim 17\%$, в то время как экспериментальное уменьшение достигает примерно $\sim 30\%$. Та же самая картина наблюдается на зависимости $\alpha_0(T)$ при $T \approx 65$ К, т.е. расчетные и экспериментальные значения $\alpha_0(T)$ существенно различаются.

Из рис. 1, 2 видно, что в области 50–70 К расчетные кривые $\sigma(T)$ и $\alpha_0(T)$ количественно не согласуются с экспериментальными. Эти данные можно проанализировать следующим образом. Начнем с анализа $\sigma(T)$. Как видно из рис. 3, подвижность дырок U_p при $T \lesssim 40$ К почти не зависит от температуры, а подвижность электронов U_n возрастает с температурой по закону $U_n \propto T^{1.5}$, что свидетельствует о том, что носители заряда рассеиваются на ионизованных примесях [1], а после $T > 40$ К рассеяние происходит на тепловых колебаниях решетки, благодаря чему уменьшается $\sigma(T)$. Сопоставление расчетных и экспериментальных зависимостей $\sigma(T)$ показывает, что экспериментальная зависимость проходит через более глубокий минимум, что может быть связано с сильным уменьшением U_n в области температур 50–65 К. В этом интервале температур электроны рассеиваются не только на ионизованных примесях и акустических фононах (электронный газ

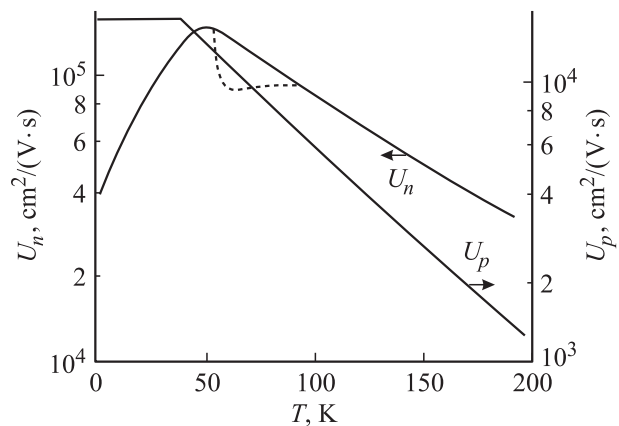


Рис. 3. Расчет температурных зависимостей подвижности электронов $U_n(T)$ и дырок $U_p(T)$ в p - Ag_2Te . Пунктирная линия — учет резонансного рассеяния электронов.

в этой области не вырожден), но можно ожидать и дополнительный механизм рассеяния.

При низких температурах средняя тепловая энергия электрона намного меньше энергии донорного уровня $E_d \gg k_0T$ ($\varepsilon_g = 0.035$ эВ, $E_d = 2$ мэВ [2] и $E_a = 4$ мэВ [6]). С ростом температуры возрастает захват электронов на акцепторы, что приводит к уменьшению числа зонных электронов при $T < 65$ К. Это происходит тогда, когда уровень Ферми расположен в узкой окрестности вблизи E_a , так как начиная с ~ 60 К акцепторный уровень входит в зону проводимости. Если учесть, что температурная зависимость соответствует $d\varepsilon_g/dT = -7 \cdot 10^{-5}$ эВ/К, то можно ожидать, что $\mu \rightarrow E_a$. Это позволяет считать, что в этом случае электроны рассеиваются на акцепторных центрах (резонансное рассеяние).

Для резонансного рассеяния проводимость $\sigma_{\text{рез}}$ имеет вид [7]

$$\sigma_{\text{рез}} = \frac{(3\pi^2)^{1/3} e^2 p^{1/3}}{4\pi \hbar N_i} \frac{m_d^*}{m_n^*} \frac{\Gamma_d}{\gamma} \left\{ 1 + \text{tg}^2 \left[\pi \left(k - \frac{1}{2} \right) \right] \right\}, \quad (6)$$

где m_d^* и m_e^* — эффективные массы плотности состояний и проводимости, p — концентрация дырок в валентной зоне, Γ_d — ширина полосы донорных примесей, γ — уширение резонансного уровня за счет гибридизации примесных и зонных состояний. Если уширение уровня целиком обусловлено нестационарностью примесных состояний, то

$$\frac{\Gamma_d}{\gamma} \approx 1, \quad k = \frac{1}{2} + \frac{N_a - p}{2N_i},$$

где N_a и N_i — концентрации акцепторов и примеси, создавшей полосу, середина которой соответствует энергии E_d . При $\mu \rightarrow E_d$ можно принять, что $m_d \rightarrow m_n^*$, где m_n^* — эффективная масса электронов на уровне Ферми ($m^* = 0.03m_0$ [8], $m_n^* = 0.02m_0$ [2]). Ширина Γ_d определяется как в [7]:

$$\rho_i(\varepsilon) = \frac{N_i}{\pi} \frac{\Gamma_d}{(\varepsilon - \varepsilon_i)^2 + (\Gamma_d/2)^2}, \quad (7)$$

где $\rho_i(\varepsilon)$ — плотность примесных состояний; N_i — концентрация примеси, создающей полосу, середина которой соответствует энергии ε_i . При малой погрешности $\varepsilon_i \approx (E_d - \mu)/2$, при $T \gg \frac{E_d}{k_0}$

$$N_i \approx \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \exp\left(-\frac{E_d - \mu}{2k_0 T}\right).$$

При $K = \frac{N_a}{N_d} \gg 1$ (K — степень компенсации) $\rho_i(\varepsilon)$ определяется так же, как в [9]:

$$\rho_i(\varepsilon) = \frac{N_d}{\gamma_0 \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\gamma_0^2}\right), \quad (8)$$

где $\varepsilon \approx e^2/\chi r_d$ — энергия кулоновского взаимодействия на среднем расстоянии между донорами, χ — диэлектрическая проницаемость,

$$r_d = \left(\frac{4\pi}{3} N_d\right)^{-1/3}$$

— среднее расстояние между донорами,

$$\gamma_0 = 0.026 \varepsilon_d (N'_a/N'_d)^{1/4}, \quad (9)$$

где N'_a и N'_d — концентрации дополнительных однозарядных акцепторов и доноров, не создающих примесных уровней. Из соотношений (7), (8) и (9) получаем $\Gamma_d \approx 0.2$ мэВ. Затем определяем значение γ , которое входит в (6). Уширение примесного уровня полосы за счет переходов примесь-зона [10] равно:

$$\gamma = \hbar/t, \quad (10)$$

где \hbar — постоянная Планка, t — среднее время жизни носителя в примесном состоянии по отношению к переходу в зону.

Исходя из принципа детального равновесия можно приравнять частоты прямых (зона-примесь) и обратных (примесь-зона) переходов [10]:

$$\frac{\rho_b}{\tau} = \frac{\rho_1}{t}, \quad (11)$$

где ρ_b — плотность зонных состояний, τ — среднее время носителя в зонном состоянии по отношению к переходу в примеси, где они определяются следующим образом:

$$\rho_b = \frac{(2m_n)^{3/2} \mu^{1/2}}{2\pi \hbar^3}, \quad (12)$$

и при низких температурах ($k_0T \ll \Gamma_d$) τ зависит от параметра рассеяния

$$r = \left. \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu}, \quad (13)$$

где

$$r = \frac{2\mu(\mu - \varepsilon_i)}{((\mu - \varepsilon_i)^2 + (\Gamma_d/2)^2)}.$$

Величина r имеет минимум и максимум при $\mu = \varepsilon_i \pm \Gamma/2$.

По значениям ρ_b, τ, ρ_1 было определено время $t = 6.6 \cdot 10^{-12}$ с и с учетом значений Γ_d, γ и k в (6) было рассчитано $\sigma_{\text{рез}}$ (рис. 1). Из рис. 1 видно, что за счет резонансного рассеяния электропроводность уменьшается меньше, чем за счет рассеяния на акустических фонах.

Можно было ожидать, что примесные состояния расположены выше дна зоны проводимости, что начиная с $T \approx 50$ К приведет к резонансному рассеянию электронов, но оказалось, что это наблюдается не всегда. В частности, резонансного рассеяния при низких температурах ($T \ll E_d/k_0$) для концентрации доноров $N_d \geq 6.2 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$ в Ag_2Te практически нет [2], т.е.

в этом интервале температур рассеяние электронов в образцах с $N_d \geq 6.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (концентрации дополнительных атомов серебра) существенно слабее, чем в образцах с $N_d \leq 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, что может быть объяснено резонансным рассеянием. С увеличением добавки атомов Te за счет компенсации уменьшаются концентрации доноров N_d . Это приводит к уменьшению интервала размытия доноров, а также к снижению вырождения электронного газа. Это также может быть причиной резонансного рассеяния.

Сильная зависимость плотности примесных состояний от энергии приводит к резкой и немонотонной энергетической зависимости времени релаксации для резонансного рассеяния, что существенным образом влияет на величину термоэдс α_0 [11,12].

Учитывая непараболичность зоны проводимости в Ag₂Te, значение термоэдс определяется [7]:

$$\alpha_{\text{res}} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} \left(\gamma_p + \frac{3}{2} \frac{1+2y}{1+y} - \frac{2y}{1+2y} \right), \quad (14)$$

где $y = \mu/\varepsilon_g$. Расчет $\alpha_p(T)$ по формуле (13) в области 50–70 К показан на рис. 2.

Из рис. 1, 2 видно, что учет резонансного рассеяния в p -Ag₂Te дает возможность увеличить значения термоэдс и электросопротивления примерно на 16–18%. Это вытекает из отношения уширения уровня γ за счет гибридизации примесных и зонных состояний γ к полной ширине полосы Γ_d , т.е. $\gamma/\Gamma_d \approx 0.8$. За счет этого в отличие от n -Ag₂Te [2], в p -Ag₂Te при концентрации доноров $N_d \leq 4.2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ обнаруживается резонансное рассеяние электронов на акцепторных центрах.

Теперь перейдем к анализу причин возрастания $\sigma(T)$ и смены знаков $\alpha_0(T)$ и $R(T)$ при $T > 65$ К. Расчеты показали, что при $T > 65$ К энергия Ферми [2] несколько меньше энергии основного состояния акцептора E_a , и за счет этого концентрация электронов на акцепторном уровне n_a , где

$$n_a = N_a \left[1 + \frac{1}{2} \exp - \frac{E_a + \mu}{k_0 T} \right]^{-1},$$

остается постоянной. При дальнейшем росте температуры число свободных мест на акцепторах истощается, т.е. начинается генерация n_a и процесс возбуждения электронов из валентной зоны в зону проводимости. В данном интервале температур основную роль в проводимости играет концентрация n_a ($n_a \gg n_i$), которая при $T > 65$ К увеличивается экспоненциально, что приводит к росту σ и смене знаков α_0 и R .

Список литературы

- [1] Ф.Ф. Алиев, Э.М. Керимова, С.А. Алиев. ФТП, **36** (8), 912 (2002).
- [2] Ф.Ф. Алиев, М.Б. Джафаров. ФТП, **42** (11), 1292 (2008).
- [3] С.А. Алиев, Ф.Ф. Алиев. Изв. АН СССР. Неорг. матер., **24** (21), 341 (1988).

- [4] С.А. Алиев, У.Х. Сугонов, М.И. Алиев. ФТП, **7** (10), 2024 (1973).
- [5] Ф.Ф. Алиев. ФТП, **37** (8), 1082 (2003).
- [6] F.F. Aliev. *Symp. on Math. and Comput. Appl.* (Baku, September 1–3, 1999) p. 80.
- [7] В.И. Кайданов, С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП, **26** (2), 201 (1992).
- [8] С.А. Алиев, Ф.Ф. Алиев. Изв. АН СССР. Неорг. матер., **21** (11), 1869 (1985).
- [9] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [10] А.И. Вейс, С.А. Немов. ФТП, **15** (6), 1237 (1981).
- [11] С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП, **22** (8), 1370 (1988).
- [12] В.И. Кайданов, С.А. Немов. ФТП, **15** (3), 542 (1981).

Редактор Т.А. Полянская

Electron scattering by acceptor centres in p -Ag₂Te at low temperatures

F.F. Aliev, M.B. Jafarov, G.Z. Askerova, E.M. Gojaev*

Institute of Physics,

Azerbaijan National Academy of Sciences,
Az-1143 Baku, Azerbaijan

* Azerbaijan Technical University,
Az-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract The resonance scattering of electrons in p -Ag₂Te at low acceptor concentrations $N_a \leq 4.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ in the range of temperatures ~ 65 K has been observed. The calculation of the resonance scattering contribution on temperature dependences of the electrical conductivity $\sigma(T)$ and the thermoelectrical power $\alpha_0(T)$ has been carried out. It has been shown that the contribution of the resonance scattering of electrons to $\sigma(T)$ and $\alpha_0(T)$ dependences is larger than to the charge carriers scattering of by acoustic phonons.