

PACS 72.15.E

## Зонна структура і механізм розсіювання носіїв струму в n-PbTe при 4,2К

Д.М.Фреїк, Л.І.Никируй, Я.П.Салій, Л.Й.Межиловська, О.Я.Довгий

*Фізико-хімічний інститут при Прикарпатському університеті імені В.Стефаника,  
Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна*

Досліджено домінуючі механізми розсіювання носіїв струму в кристалах n-PbTe при температурі 4,2К з використанням параболічного та непараболічного законів дисперсії згідно моделі Кейна. Показано, що роль кулонівського потенціалу вакансій переважає при низьких концентраціях. При високих концентраціях сумарне розсіювання для обох моделей майже повністю визначається розсіюванням на короткодіючому потенціалі вакансій. Одержані результати свідчать про те, що стандартний параболічний закон дисперсії при гелієвій температурі добре працює при низьких та середніх концентраціях. При високих концентраціях слід використовувати непараболічний закон дисперсії.

**Ключові слова:** телурид свинцю, холлівська рухливість, дисперсія, зонна модель, час релаксації.

*Стаття поступила до редакції 26.11.1999, прийнята до друку 8.12.1999.*

### I. Вступ

Напівпровідники на основі сполук  $A^{IV}B^{VI}$  зарекомендували себе як найбільш ефективні матеріали для створення термогенераторів, детекторів когерентного випромінювання в інфрачервоній області оптичного діапазону, датчиків тиску. Для розрахунку їх термоелектричних параметрів важливо правильно оцінити вклад різних механізмів розсіювання вільних носіїв заряду. До них слід віднести розсіювання на теплових коливаннях кристалічної ґратки та розсіювання на точкових дефектах. Питання про встановлення домінуючого механізму розсіювання раніше неодноразово піднімалось в працях [1-4]. В даній роботі аналізується вплив зонної структури на механізм розсіювання в кристалах n-PbTe.

### II. Моделі зонної структури та механізми розсіювання

В кристалах PbTe для розрахунку зонної структури з достатньою точністю слід враховувати взаємодію між собою шести зон [7]. Для цього необхідно розв'язати секулярне рівняння шостого степеня, що є надзвичайно складною задачею, тому постійно робляться певні наближення та уточнення. Згідно моделі Кейна [5-9], для одержання закону дисперсії  $\epsilon = \epsilon(k)$ , розглядається не весь енергетичний спектр, а лише положення та симетрія екстремальних точок. Оскільки, ширина забороненої зони  $\epsilon_g$  в PbTe значно менша різниці енергій між іншими точками зони Бріллюена, то, в принципі, можна обмежитись 2-зонним наближенням, яке враховує взаємодію нижньої зони провідності та верхньої валентної зони.

Розв'язавши рівняння Шредінгера з використанням теорії збурень та секулярне

рівняння 2-ого степеня [7], одержимо закон дисперсії для вказаної моделі:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \varepsilon_G + \sqrt{\varepsilon_G^2 + \frac{4\hbar^2}{m^{*2}} k^2 p^2}. \quad (1)$$

Даний закон дисперсії стосується зони провідності, яка взаємодіє лише з однією верхньою валентною зоною. При розрахунках брали ефективну масу  $m^*=0,013m_0$ , елемент міжзонної взаємодії  $p^2 = \frac{3\hbar^2 \varepsilon_G}{4m^*}$ , ширину забороненої зони  $\varepsilon_G=0,19\text{eV}$  (для температури  $T=4.2\text{K}$ ) [2,8,9].

На відміну від стандартної енергетичної зони, в якій:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2)$$

тут виникає лінійний по  $k$  доданок, який надає закону дисперсії непараболічний характер.

Механізми розсіювання визначались в наближенні часу релаксації [7].

Домінуючими механізмами розсіювання при низьких температурах є розсіювання на кулонівському і короткодіючому потенціалах вакансій халькогена (матеріал  $p$ -типу) та розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів. Розсіювання на оптичних фонах при цьому практично не вносить ніякого вкладу в загальний механізм розсіювання при даній температурі [2,3]. Залежності часу релаксації, згідно яких проводились розрахунки в даній роботі, для різних механізмів розсіювання мають вигляд [2]:

– кулонівський потенціал вакансій:

$$\tau_c(x) = \frac{\varepsilon_0^2 (2m^*)^{1/2} (k_0 T)^{3/2} (x + \beta x^2)^{3/2}}{\pi (Ze^2)^2 N_v [Ln(1 + \xi) - \xi / (1 + \xi)] (1 + 2\beta x)}, \quad (3)$$

де  $\xi = (2kr_v)^2$ ,  $k$  – хвильовий вектор носія,  $r_v$  – радіус екранування потенціалу вакансії,  $N_v = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , для  $n < 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  та  $N_v = n/2$  для  $n \geq 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ;

– короткодіючий потенціал вакансій:

$$\tau_v(x) = \frac{\tau_{0,v} (x + \beta x^2)^{-1/2}}{(1 + 2\beta x) [(1 - A)^2 - B]}, \quad (4)$$

де  $\tau_{0,v} = \pi \cdot \hbar^4 / m^* (2m^* k_0 T)^{1/2} U_{vc}^2 N_v$ , (5)

$$A = \beta x (1 - K) / (1 + 2\beta x),$$

$$B = 8\beta x (1 + \beta x) K / 3(1 + 2\beta x)^2;$$

– деформаційний потенціал акустичних фононів:

час релаксації при розсіюванні на деформаційному потенціалі акустичних фононів обчислюється за формулою (4), в якій слід прийняти індекс  $v=a$ , та переписати вираз для  $\tau_{0,a}$  наступним чином:

$$\tau_{0,a} = 2\pi\hbar^4 C_l / E_{ac}^2 (2m^* k_0 T)^{3/2}. \quad (6)$$

В формулах (3)-(6) взято такі константи

[2]:

статична діелектрична проникність  $\varepsilon_0=400$ ; короткодіючий потенціал вакансії  $U_{vc} = 3 \cdot 10^{-35} \text{ Дж} / \text{ м}^3$ , деформаційний потенціал вакансії  $E_{ac} = 15\text{eV}$ ; комбінація констант  $C_l = 7.1 \cdot 10^{10} \text{ H} / \text{ м}^2$ ;  $K=1.5$ ;  $K$  – відношення короткодіючих потенціалів вакансій для зони провідності та валентної зони та деформаційних потенціалів для цих зон. При одночасному врахуванні кількох механізмів розсіювання сумарний час релаксації обчислювався згідно [8]:

$$\tau^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1}. \quad (7)$$

Аналіз одержаних теоретичних результатів зручно проводити для холлівської рухливості, яку можна виміряти експериментально. Холлівська рухливість  $\mu_H$  згідно [7] розраховується за формулою:

$$\mu_H = e \langle [\tau(\varepsilon) / m_0(\varepsilon)]^2 \rangle / \langle \tau(\varepsilon) m_0(\varepsilon) \rangle, \quad (8)$$

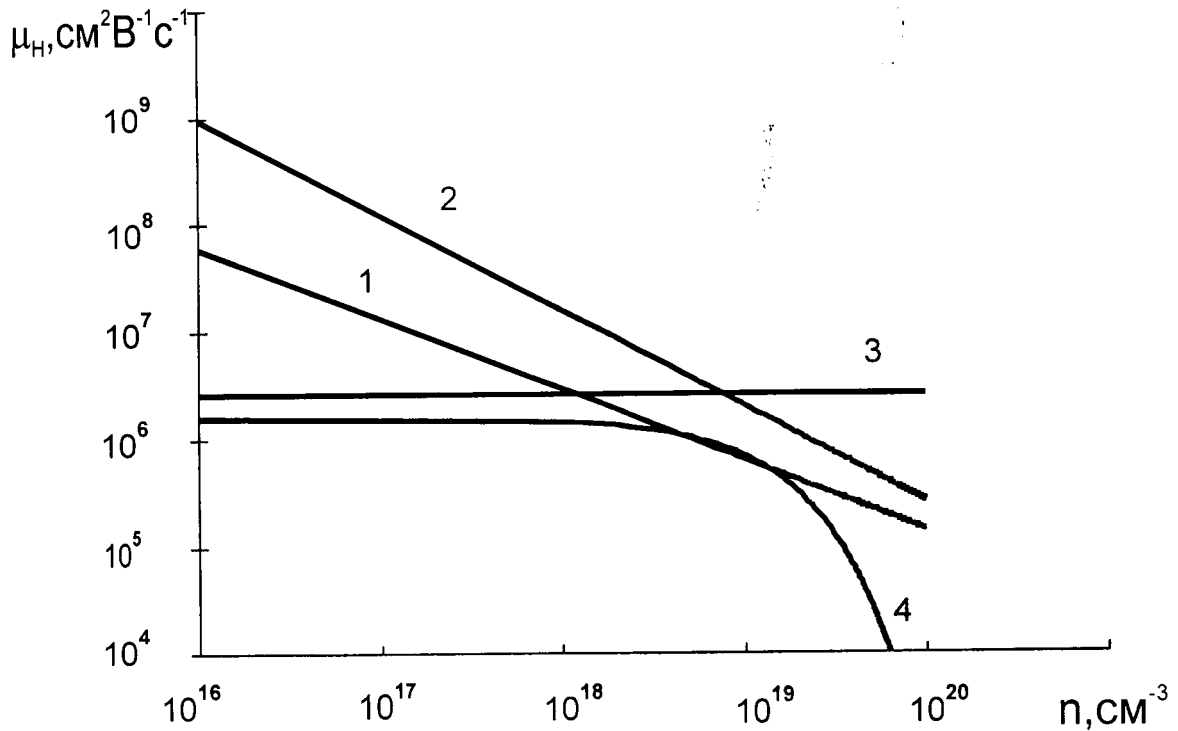


Рис.1. Залежність холлівської рухливості електронів  $\mu_H$  n-PbTe від концентрації  $n$  при  $T=4,2K$  для стандартної зони з врахуванням механізмів розсіювання: 1 – на кулонівському потенціалі вакансій, 2 – на короткодіючому потенціалі вакансій, 3 – на деформаційному потенціалі акустичних фононів, 4 – сумарному за формулою (7).

де усереднення слід розглядати, як:

$$\langle A(\varepsilon) \rangle = \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) A(\varepsilon) d\varepsilon / \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$f_0(\varepsilon)$  – функція розподілу Фермі-Дірака.

Проінтегрувавши, одержуємо вираз для холлівської рухливості:

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \tau \frac{I_{3/2,1}^{1/2}(0;0,10)}{I_{3/2,0}^{1/2}(0;0,10)}, \quad (9)$$

де  $I_{n,k}^m(z; \beta)$  – двопараметричні інтеграли Фермі, які протабульовані в [8].

### III. Результати та їх обговорення

На рис. 1 і 2 показано залежності холлівської рухливості носіїв заряду в n-PbTe від концентрації електронів при температурі 4,2K для стандартної (яка

описується параболічним законом дисперсії) та нестандартної зон відповідно. Крім того, показано вклад різних механізмів розсіювання.

Для стандартної енергетичної зони при низьких концентраціях більший внесок в загальне розсіювання дає розсіювання на кулонівському потенціалі (рис.1). При концентраціях  $\sim 10^{19} \text{cm}^{-3}$  і вище починає впливати розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій, яке різкіше веде до зменшення холлівської рухливості, ніж розсіювання на кулонівському потенціалі (рис1). Для нестандартної зони чітко виражений сильний вплив розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій для

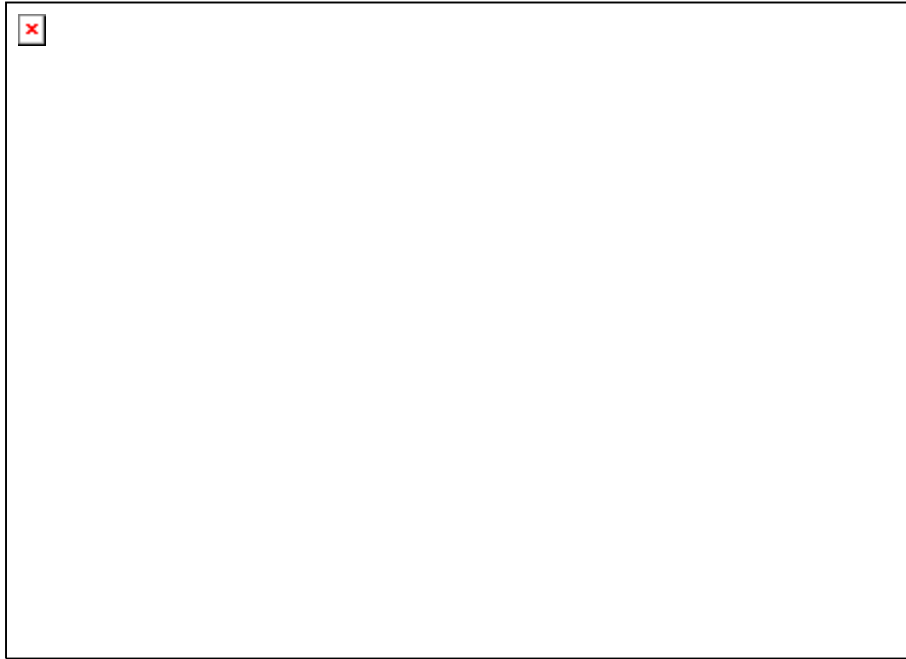


Рис.2. Залежність холлівської рухливості електронів  $\mu_n$  n-PbTe від концентрації  $n$  при  $T=4,2K$  для нестандартної зони з врахуванням механізмів розсіювання: 1 – на кулонівському потенціалі вакансій, 2 – на короткодіючому потенціалі вакансій, 3 – на деформаційному потенціалі акустичних фононів, 4 – сумарному за формулою (7).

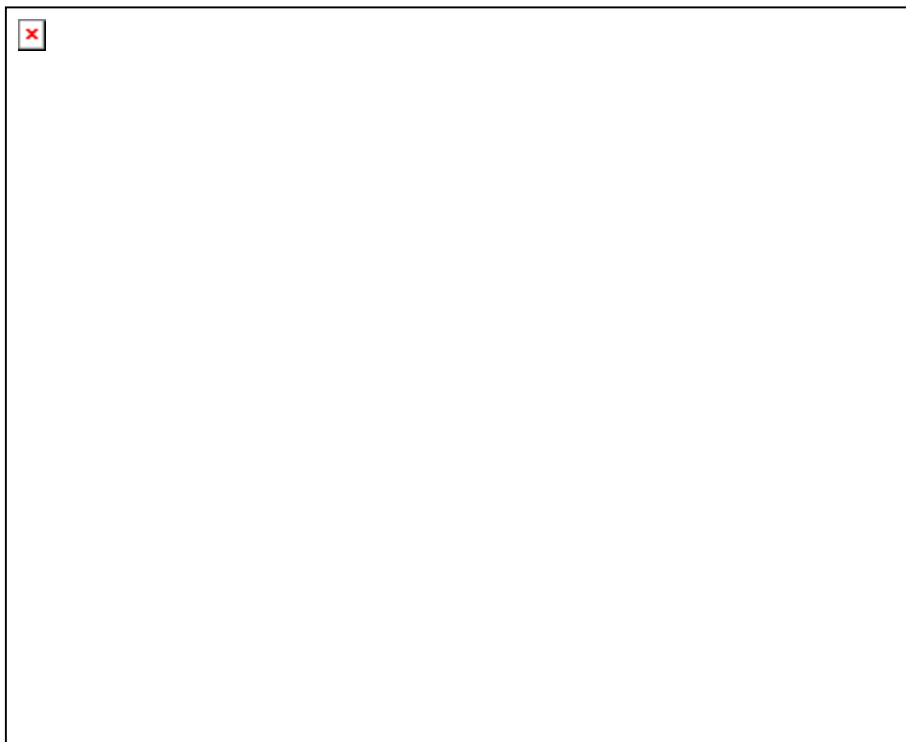


Рис.3. Залежності холлівської рухливості електронів  $\mu_n$  n-PbTe при  $T=4,2K$  від концентрації  $n$ : 1 – нестандартна зона; 2 – стандартна зона, що обчислені за формулою (8); 3 – експеримент [1,3].

високих концентрацій. Кулонівський потенціал вакансій, як видно з аналізу нахилу кривої (рис.2), має деякий вплив тільки в області низьких та середніх концентрацій. Розсіювання ж на

деформаційному потенціалі акустичних фононів в обох моделях дає значний внесок в сумарний механізм розсіювання (рис.1,2).

Порівняння розрахункових та експериментальних [1,3] концентраційних

залежностей рухливості (рис.3) говорить про те, що при низьких ( $10^{16} - 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) та при середніх ( $5 \cdot 10^{17} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ) концентраціях у n-PbTe має місце стандартний закон дисперсії. Для області високих концентрацій ( $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$  і вище) виконується непараболічний закон дисперсії (рис.3).

Розсіювання на кулонівському потенціалі вакансії переважає при низьких і середніх концентраціях, тобто, при застосуванні стандартного закону дисперсії. Але, його роль не слід завищувати. В роботі [10] пропонують вважати, що на вакансії, яка дає два вільних носія, локалізується заряд  $0.14e$ , а не 1 чи 2. Тобто, потрібно

враховувати сильну делокалізацію заряду. Домінуючим же для високих концентрацій є розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій (рис.1,2), що, можливо, пов'язане з впливом непараболічного закону дисперсії (рис.3).

Таким чином, одержані результати підтверджують, що розрахунки термоелектричних параметрів n-PbTe при низьких та середніх концентраціях необхідно проводити на основі параболічного закону дисперсії. При високих концентраціях носіїв струму реалізується непараболічна модель енергетичної зони.

- [1] Ю.И.Равич, Б.А.Ефимова, Н.А.Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS*. Наука. М. (1968).
- [2] Д.М.Заячук. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в теллуриде свинца // *ФТП* **31**.2. сс.217-220(1997).
- [3] Р.І.Запужляк. Фізичні основи термоелектричних явищ у кристалах PbTe // *Фізика і хімія твердих тіл*. **7**. сс.25-53(1999).
- [4] Н.П.Гавалешко, П.Н.Горлей, В.А.Шендеровский. *Узкозонные полупроводники: получение и физические свойства*. Наук.думка. Киев(1984).
- [5] E.O.Kane. The k-p method // *Semiconductors and semimetals*. New York: Acad.Press **1**. pp.75-100(1970).
- [6] E.O.Kane. Band structure of narrow gap semiconductors // *Lect Notes Phys*. **133**. pp.13-31(1980).
- [7] А.И.Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. Наука. М. (1978).
- [8] Б.М.Аскеров. *Кинетические эффекты в полупроводниках*. Наука. Л. (1970).
- [9] И.М.Цидилковский. *Электроны и дырки в полупроводниках*. Наука. М. (1972).
- [10] K. Cuft, M.Ellet, C. Williams. *Proc Int Conf Phys Semicond*. Paris. (1964).

### **Band structure and dispersion's mechanism of the charges in the n-PbTe at the 4,2K**

D.M.Freik, L.I.Nykyruy, Ya.P.Saliy, L.Y.Mezhylovska, O.Ya.Dovgiy

*Physical and chemical institution at the Precarpathian university named by V.Stefanyk, Shevchenko str., 57, Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine*

Is investigated the main dispersion's mechanisms of the electron conductivity in the crystals of n-PbTe at the 4,2K with parabolic and unparabolic laws of the disperssions for the Kane's model. It's shown the role of the Coulomn's potential of vacansion is one of the main at the low concentrations. The shortinfluence potential is main at the high concentrations for the both models.The obtain results are shows, that parabolic law of the disperssion is good worked at the low and medium concentrations. The unparabolic disperssion's law must be used at the high concentrations.

**Keyword:** telluride of lead, Holl's mobility, disperssion, band's model, time of relaxation.