

УДК 621.315.592

© 1993

ИЗМЕНЕНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ В $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

Б. А. Акимов, А. И. Лебедев, Л. И. Рябова

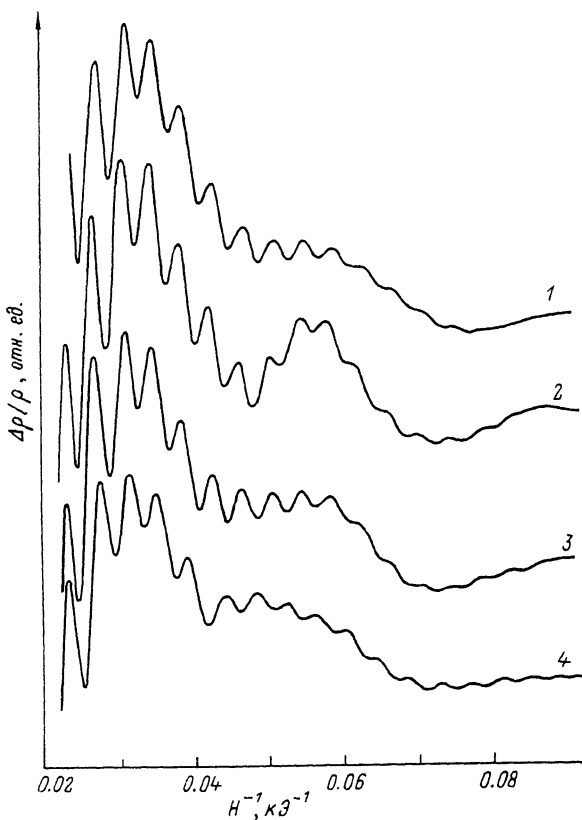
В твердых растворах $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$ ($x = 0.03, 0.06$) n -типа проводимости исследованы осцилляции Шубникова—де Гааза при гелиевых температурах. Обнаружено, что в спектре осцилляций наблюдаются два периода, что может быть связано с перестройкой зонной структуры в результате фазового перехода. Анализ осцилляционной картины позволяет сделать вывод о наличии ромбоэдрического искажения решетки, приводящего к появлению выделенного экстремума, коэффициент анизотропии которого близок к единице. Характер изменения анизотропии трех L -эллипсоидов и величина энергетического расщепления T - и L -экстремумов оценивались в рамках двухзонного приближения. Показано, что перераспределение электронов между эллипсоидами в основном определяется их сферизацией.

Исследование свойств твердого раствора $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$ представляет особый интерес в связи с обнаружением в нем низкотемпературного фазового перехода (ФП), связываемого с упорядочением дипольных моментов нецентральных атомов серы [1]. Этот ФП проявляется в электрических, диэлектрических и оптических свойствах [1], он обнаруживается в ультразвуковых [2] и рентгеновских измерениях [3]. Сегнетоэлектрическая природа этого ФП доказана в работе [4].

Происходящий в кристаллах ФП должен проявляться и в изменении их электронного спектра. Исследования осцилляций Шубникова—де Гааза (ШГ) в образцах с $x = 0.04$, проведенные в работе [5], обнаружили моностатные осцилляции ниже 8 К и появление осцилляций с удвоенной частотой выше этой температуры, что авторы связали с наличием второго ФП при 8 К. По мнению авторов, кристаллы $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$ при $T = 4.2$ К находятся в кубической фазе. Этот вывод противоречил целому ряду экспериментальных данных и определил постановку настоящей работы.

Изучение осцилляций магнетосопротивления проводилось при гелиевых температурах с использованием двухкоординатного поворотного устройства [6] в магнитных полях H до 50 кЭ в кристаллах, $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$ n -типа проводимости с $x = 0.03$ и $x = 0.06$. Токовые и потенциальные контакты к образцам подпаивались сплавом $\text{In} + 4\% \text{Ag} + 1\% \text{Au}$.

На рисунке (кривая 2) показаны характерные осцилляции ШГ, полученные для образца $\text{PbTe}_{0.94}\text{S}_{0.06}$ с холловской концентрацией электронов $n = 3.7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при ориентации вектора магнитного поля $H \parallel \langle 100 \rangle$. В отличие от PbTe , где в этой ориентации наблюдаются монохроматические (расщепленные по спину) осцилляции, благодаря тому что все четыре эллипсоида, образующие поверхность Ферми, находятся в эквивалентном положении относительно вектора H , в образце $\text{PbTe}_{0.94}\text{S}_{0.06}$ осцилляционная картина оказывается достаточно сложной. В спектре явно присутствуют две частоты: высокая (период $\Delta(1/H) = 4 \cdot 10^{-6} \text{ Э}^{-1}$) и модулирующая ее низкая (период $\Delta(1/H) = 2.73 \cdot 10^{-5} \text{ Э}^{-1}$). Поэтому для правильной интерпретации экспериментальных данных требуется высокая точность ориентации образца относительно вектора H . Для этого недостаточно



Вид осцилляций Шубникова—де Гааза $\Delta\rho/\rho(1/H)$ для образца $\text{RbTe}_{0.94}\text{S}_{0.06}$. $T = 1.8$ К. Монотонная часть зависимости $\Delta\rho/\rho(1/H)$ скомпенсирована.

просто жестко укрепить образец в измерительном устройстве вблизи желательной ориентации. В процессе эксперимента во избежание ошибки необходимо осуществлять корректировку положения образца, что и позволяет сделать поворотное устройство, обеспечивающее изменение ориентации образца непосредственно в гелиевой ванне в двух плоскостях с точностью до 0.1° .

В качестве примера на рисунке представлены зависимости $\Delta\rho/\rho(1/H)$, показывающие характер изменения осцилляционных кривых при повороте на $\sim 10^\circ$ от оси типа $\langle 100 \rangle$ к оси $\langle 110 \rangle$ (кривая 1), от оси типа $\langle 100 \rangle$ к оси $\langle 010 \rangle$ (кривая 3) и в противоположную сторону (кривая 4). Мы считали, что наиболее точно отвечает искомой ориентации кривая 2 ($J \perp H \parallel \langle 100 \rangle$) с максимальными значениями амплитуд высокочастотных осцилляций (высокочастотные осцилляции весьма слабо зависят от ориентации образца). По нашему мнению, появление двух частот осцилляций указывает на перестройку зонной структуры образца в результате ФП и свидетельствует о понижении симметрии решетки и снятии четырехкратного вырождения зон, существовавшего в L -точках зоны Бриллюэна выше T_c . Температура ФП в образце, определенная из электрических измерений, составляла $T_c = 61$ К.

Из периодов осцилляций в обратном поле мы попытались вычислить заполнение отдельных минимумов и определить тип искажения решетки. Исследование розетки вращения сечений поверхностей Ферми S при повороте образца в двух плоскостях показало, что поверхность Ферми, соответствующая высокочастотным

осцилляциям, представляет собой эллипсоид вращения с отношением экстремальных сечений $\alpha^2 = S_{\max}/S_{\min} \sim 1.2$. Таким образом, коэффициент анизотропии α^2 для этого эллипсоида весьма существенно отличается от величины $\alpha^2 = 10.5$ для РbТе. Расчет показывает, что концентрация электронов в одном практически сферизованном эллипсоиде существенно превышает концентрацию электронов, определенную по эффекту Холла. Для получения разумного значения n необходимо учесть спиновое удвоение частоты осцилляций. Вывод о наличии спинового удвоения частоты можно сделать и из анализа осцилляционной картины, где хорошо заметна нерегулярность амплитуд четных и нечетных пиков, что весьма характерно для случая спинового удвоения частоты и обусловлено различием сечений рассеяния для электронов на уровнях Ландау с противоположным направлением спина. Подобный эффект наблюдался и в других соединениях на основе РbТе, например в РbТе_{1-x}Se_x, с концентрацией электронов $n \geq 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [7]. Концентрация электронов в выделенном эллипсоиде, рассчитанная с учетом спинового удвоения частоты осцилляций, составляет $2.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Поскольку это значение является минимальным для концентрации, соответствующей данному периоду осцилляций, можно сделать важный вывод, что искажение решетки кристалла при ФП снимает вырождение эллипсоидов таким образом, что минимум, отвечающий высокочастотным осцилляциям, оказывается единственным (невыврожденным). Рассматривая задачу о разложении звезды волнового вектора, отвечающего экстремумам зон в L -точках зоны Бриллюэна в кубической фазе, на неприводимые звезды в ромбоэдрически, тетрагонально и орторомбически искаженных решетках, допускаемых для сегнетоэлектрического ФП, можно показать, что этому условию удовлетворяет только ромбоэдрическое искажение, что согласуется с выводами работ [3, 4]. Таким образом, наши результаты показывают, что при ФП в РbТе_{1-x}S_x четырехкратное вырождение долин, характерное для их зонной структуры в кубической фазе, снимается, причем в невырожденном T -минимуме зоны проводимости сосредоточивается большая часть электронов.

Рассмотрим оставшиеся три L -минимума. Из сравнения холловской концентрации носителей в образце и концентрации электронов в T -минимуме следует, что в каждом из них находится $4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ электронов. К сожалению, из-за малого числа наблюдаемых экстремумов для низкочастотных осцилляций экспериментально определить коэффициент анизотропии поверхности Ферми в L -точках зоны Бриллюэна не представляется возможным. Для определения качественного характера перестройки энергетического спектра при ФП в РbТе_{1-x}S_x мы воспользовались двухзонным приближением, положив, что матричный элемент взаимодействия остается таким же, как в РbТе [8]. Значение эффективной массы электронов m_{100}^* для L -минимумов определялось по температурной зависимости амплитуд осцилляций и с точностью $\sim 15\%$ составило $m_{100}^* \approx 0.08 m_0$, что довольно близко к значению эффективной массы в РbТе. Зная сечение поверхности Ферми, рассчитанное из периода осцилляций, значение m_{100}^* и ширину запрещенной зоны $E_g = 223 \text{ мэВ}$ [1], нетрудно оценить коэффициент анизотропии ($\alpha^2 \sim 6.2$), концентрацию электронов в одном L -экстремуме ($5.3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$) и степень их вырождения (5.4 мэВ). Полная концентрация электронов в экстремумах при этом с точностью 10% совпадает с холловской концентрацией носителей заряда.

Если предположить, что матричные элементы для T - и L -экстремумов одинаковы, то можно оценить величину их энергетического расщепления, которая оказывается менее 1 мэВ. Таким образом, перераспределение электронов между различными экстремумами ниже температуры ФП обусловлено в основном сильной сферизацией T -экстремума.

Аналогичные измерения были проведены для образца с $x = 0.03$ ($T_c = 32 \text{ К}$) и холловской концентрацией $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. В спектре осцилляций этого образца в ориентации поля $H \parallel \langle 100 \rangle$ наблюдались две основные частоты ($3.59 \cdot 10^{-6}$ и

$5.54 \cdot 10^{-6} \text{ Э}^{-1}$) и вторая гармоника одной из них ($10.7 \cdot 10^{-6} \text{ Э}^{-1}$). Наилучшее согласие между холловской концентрацией и заполнением долин получалось для ромбоэдрического искажения решетки при $\alpha^2 \sim 1$.

Интересной особенностью осцилляций ШГ в $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$, как следует из рисунка, оказывается отсутствие дополнительных частот осцилляций, связанных с потерей кристаллом центра инверсии при сегнетоэлектрическом ФП, которые наблюдались в сегнетоэлектрической фазе кристаллов $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$ [9]. Причина этого различия пока не понята и требует дальнейшего изучения.

Полученные экспериментальные данные не позволяют однозначно описать изменение энергетического спектра в твердом растворе $\text{PbTe}_{1-x}\text{S}_x$, так как экспериментально определены не все параметры, необходимые для построения модели. Однако некоторые определенные выводы сделать можно. Происходящий в кристаллах ФП сопровождается ромбоэдрическим искажением решетки. Анализ осцилляционной картины для образцов с $x = 0.03$ и $x = 0.06$ указывает на наличие выделенного эллипсоида, поверхность Ферми которого близка к сфере. Характер изменения анизотропии L -эллипсоидов, а также величина энергетического расщепления долин носят лишь оценочный характер.

Неопределенность в расчеты вносит также возможность образования в образце многодоменного состояния, обычно связываемого с ромбоэдрическим искажением решетки при ФП. Однако, по нашим данным, сделать выводы о наличии такой структуры не представляется возможным. Осцилляции, в особенности высокочастотные, свидетельствуют о том, что исследованные образцы следует рассматривать как монодоменные.

Список литературы

- [1] Абдуллин Х. А., Лебедев А. И., Гаськов А. М., Демин В. Н., Зломанов В. П. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 40. № 6. С. 229—231.
- [2] Васильев А. Н., Гаськов А. М., Крылюк О. Н. // Материалы VII Всес. симп. по полупроводникам с узкой запрещенной зоной и полуметаллам. Львов, 1986. Т. 2. С. 146—148.
- [3] Wang Z., Bunker V. A. // NLSL Ann. Report, Brookhaven Nat. Lab. Long Island, N. Y., 1989. P. 400.
- [4] Лебедев А. И., Случинская И. А. // Изв. АН СССР. Сер. Физ. 1987. Т. 51. № 10. С. 1683—1687.
- [5] Дмитриев А. И., Лашкарев Г. В., Литвинов В. И., Гаськов А. М., Демин В. Н. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. № 6. С. 304—306.
- [6] Акимов Б. А., Иванчик И. И., Чесноков С. Н. // ПТЭ. 1990. В. 4. С. 234—236.
- [7] Акимов Б. А., Вертелецкий П. В., Зломанов В. П., Рябова Л. И., Тананаева О. И., Широкова Н. А. // ФТП. 1989. Т. 23. № 2. С. 244—249.
- [8] Акимов Б. А., Рябова Л. И., Яценко О. Б., Чудинов С. М. // ФТП. 1979. Т. 13. № 4. С. 752—759.
- [9] Tsuji K., Kumashiro Y., Takano S. // J. Phys. Soc. Jap. 1984. V. 53. N 4. P. 1397—1405.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
21 апреля 1992 г.
В окончательной редакции
3 сентября 1992 г.