

неравномерное распределение примеси по объему кристалла. Авторы полагают, что в областях локализации дефектов и происходит структурное усложнение дипольных комплексов, например от $\text{OH}^- \dots \text{Me}^{2+} \text{V}_c^-$ до $\text{OH}^- \dots (\text{Me}^{2+} \text{V}_c^-)_x$ где $x = 1, 2, \dots$

Увеличение потенциального барьера и уменьшение поляризуемости приводят к наблюдаемым эффектам смещения пиков диэлектрических потерь в сторону более высоких температур и уменьшения интенсивности пиков.

Список литературы

- [1] Алексеев П.Д. // Тез. докл. Всес. научн. конф. «Физика диэлектриков». Секция спектроскопия диэлектриков. Баку, АзПИ, 1982. С. 66–67.
- [2] Ботоки А.А., Воробьев А.А., Ульянов В.Л. Радиационная физика ионных кристаллов. М.: Атомиздат, 1980. С. 208.
- [3] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978. С. 792.
- [4] Фольгер И. // Диэлектрическая спектроскопия: Пер. с англ. В.А.Иоффе / Под ред. Г.А.Смоленского. М.: ИЛ, 1960. С. 385–389.
- [5] Лущик Ч.Б., Лущик А.Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. М.: Наука, 1989. С. 264.

Омский государственный университет

Поступило в Редакцию
13 октября 1993 г.

УДК 546.65:537.31

© Физика твердого тела, том 36, № 4, 1994
Solid State Physics, vol. 36, N 4, 1994

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЙ МЕХАНИЗМ ПЬЕЗОПРОТИВЛЕНИЯ SmS

Л.Н.Васильев, В.В.Каминский

Как известно [1], моносulfид самария обладает наибольшими по величине константами пьезосопротивления среди изученных соединений.¹ Хотелось бы уяснить причину этого, а также попытаться смоделировать материал на основе SmS , обладающий максимальной допустимой величиной пьезорезистивного эффекта. В настоящей работе обобщены и дополнены данные о зонной структуре SmS и на их основе предложена концентрационная модель механизма пьезорезистивного эффекта. Для ее проверки использовались результаты измерений продольных констант пьезосопротивления π_{11} монокристаллических образцов SmS стехиометрического состава в интервале температур от гелиевых до комнатных [2]. Поскольку пьезорезистивный эффект в SmS изотропен, $\pi_{11} \approx \pi_{12}$ и $\pi_{44} \ll \pi_{11}$. Для расчета $\pi_{11}(T)$ в SmS учитывались следующие уровни и состояния.

1. Локализованные $4f$ -уровни, наличие которых является общей отличительной особенностью редкоземельных полупроводников, с энергией $E_f = 0.23$ эВ ниже дна зоны проводимости, концентрацией

¹ Имеются в виду гомогенные (однородные) материалы, а не какие-либо структуры на их основе, например структуры включающие p - n -переходы.

$N_f = 1.8 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ и барическим сдвигом при одноосном сжатии $dE_f/dP = -5.4 \cdot 10^{-2} \text{ мэВ/МПа}$ [3], играющие роль донорных.

2. Различные примесные состояния, характерные лишь для моносulfида самария. а) Мелкие донорные уровни, имеющие соответственно $E_d = 0.0035 \text{ эВ}$, $N_d \sim 10^{19} \div 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $dE_d/dP = -2.4 \cdot 10^{-2} \text{ мэВ/МПа}$ [2]. б) Донорные уровни с $E_i = 0.045 \text{ эВ}$, $N_i = (2 \pm 1) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $dE_i/dP = -3.5 \cdot 10^{-2} \text{ мэВ/МПа}$ [3]. в) Компенсирующие примесные уровни, лежащие глубоко в запрещенной зоне [4] с концентрацией $N_a < N_i$. Кроме того, учитывалось наличие некоторого количества носителей тока $N_0 \sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$, имеющегося в зоне проводимости при всех рассматриваемых температурах и от температуры не зависящего [2].

Природа примесных состояний связана с неидеальностью условий процесса кристаллизации из расплава (градиенты температур, механические напряжения) и с наличием у SmS области гомогенности до 4 ат.% в сторону избытка самария [5]. Это может приводить к неравномерному распределению ионов самария по объему кристалла. Действительно [5,6], в образцах SmS стехиометрического состава наблюдались включения второй фазы Sm_3S_4 . Ее количество составляло до 1 мол.%, в то время как по результатам химического анализа отклонение суммарного количества самария и серы от стехиометрического было менее 0.2%. Естественно предположить также наличие дефектов и ассоциатов дефектов, предшествующих выделению фазы Sm_3S_4 . Тогда в остальной части объема образца, т. е. непосредственно в SmS, имеется избыточный самарий. Располагаясь в междоузлиях кристаллической решетки, он создает примесные центры, являющиеся донорами [5]. Их концентрация может достигать $(0.08 \cdot 1.8 \cdot 10^{22} \sim 10^{21}) \text{ см}^{-3}$. Согласно [5], при наличии излишнего Sm должно также возникать некоторое количество вакансий в подрешетке серы, что приводит к появлению компенсирующих примесных уровней. Последнее согласуется с тем фактом, что в составах Sm_{1+x}S при $x < 0.035$ концентрации электронов проводимости может достигать величин порядка 10^{20} см^{-3} [5], в то время как в монокристаллах SmS стехиометрического состава она всегда находится в пределах $(0.5 \div 3.5) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Разница между этими величинами определяется наличием компенсирующих центров N_a . Металлический самарий, применяющийся для синтеза SmS, согласно паспортным данным, содержит до 0.03 вес.% примесей редкоземельных металлов, которые в соединениях LnS трехвалентны. Это может создать концентрацию N_0 до $5.4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ носителей тока, если считать, что каждая примесь дает по одному электрону в зону проводимости.

Расчет проводился по обычной схеме исходя из условия электронейтральности

$$n = N_c F_{3/2}(\mu^*) = n_i + n_f + n_d + N_0 - N_a, \quad (1)$$

где N_c — плотность состояний в зоне проводимости; μ^* — химпотенциал; $n_{i,d,f}$ — концентрации носителей, возбужденных с уровней в зону проводимости. Считаем подвижность не зависящей от давления, тогда

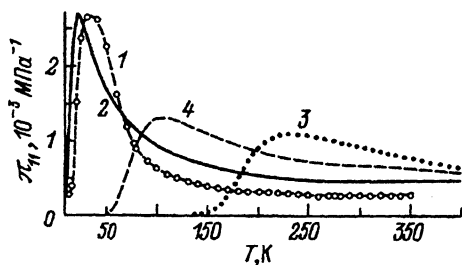


Рис. 1. Экспериментальная (1) и расчетные (2-4) зависимости продольного коэффициента пьезосопротивления SmS от температуры.

2 — $(N_0 - N_d) = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $N_d = 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_i = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_f = 1.8 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$; 3 — то же, но $N_d = N_i = 0$; 4 — то же, но только $N_d = 0$.

$\pi_{11} = d(\ln \sigma)/dP = d(\ln n)/dP$, где σ — проводимость, откуда

$$\pi_{11} = kT(\partial\varphi/\partial E_i + \partial\varphi/\partial E_d + \partial\varphi/\partial E_f) \frac{(1/n)dn/d\mu^*}{\partial n/\partial\mu^* - \partial\varphi/\partial\mu^*}. \quad (2)$$

Здесь $\varphi = n_i + n_f + n_d$. Подставляя μ^* , найденное численно из (1), в (2), получим зависимость π_{11} от температуры и других параметров.

Концентрационная модель пьезорезистивного эффекта в SmS должна давать некоторую погрешность, так как не учитывает вклада от изменения подвижности. Однако она вполне удовлетворительно описывает экспериментальные результаты. На рис. 1 представлены экспериментальная кривая 1, снятая на образце SmS ($n = 3.2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300 \text{ K}$), и расчетная кривая 2. При подборе N_0 , N_d и N_i для описания $\pi_{11}(T)$ конкретного образца налагается требование равенства экспериментального и расчетного значений n при $T = 300 \text{ K}$.

Для уяснения роли, которую играют электроны, активированные с различных уровней, в пьезорезистивном эффекте, на рис. 1 приведены расчетные кривые, полученные с учетом одних лишь f -уровней (3) и с учетом f - и примесных N_i -уровней (4). При $T > 200 \text{ K}$ наибольший вклад в величину π_{11} дают f -уровни, а наличие N_i и N_d лишь уменьшает эффект. При $90 < T < 200 \text{ K}$ превалирует вклад от N_i . При $T < 90 \text{ K}$ существенным становится вклад от N_d , который при $T < 50 \text{ K}$ почти полностью определяет величину π_{11} .

Таким образом, для создания материала с еще большим, чем у SmS, π_{11} при $T = 300 \text{ K}$ необходимо по возможности повысить вклад от $4f$ -уровней. Поскольку N_f фиксировано, то остается возможность изменения E_f . Она реализуется, например, в твердых растворах на основе SmS.

На рис. 2 представлена зависимость π_{11} от E_f , рассчитанная при $T = 300 \text{ K}$. Максимум кривой примерно совпадает с действительным расположением $4f$ -уровней в SmS, которое, таким образом, является практически оптимальным с точки зрения величины пьезорезистивного эффекта, что наряду с необычайно высокой концентрацией N_f (эффект самолегирования [7]) объясняет рекордную величину π_{11} при $T > 200 \text{ K}$.

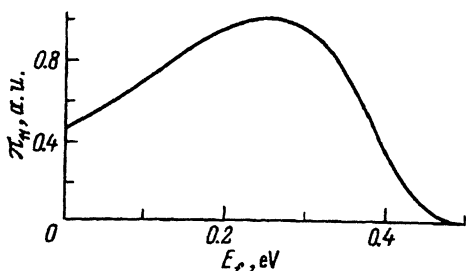


Рис. 2. Влияние глубины залегания $4f$ -уровней ионов самария на величину продольного коэффициента пьезосопротивления SmS при $T = 300 \text{ K}$.

Расчет при $N_d = N_i = 0$.

Список литературы

- [1] Каминский В.В., Смирнов И.А. // Приборы и системы управления. 1985. № 8. С. 22–24.
- [2] Каминский В.В., Степанов Н.Н., Васильев Л.Н., Оскотский В.С., Смирнов И.А. // ФТТ. 1985. Т. 27. № 7. С. 2162–2165.
- [3] Быховский А.Д., Каминский В.В., Романова М.В. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 7. С. 2172–2174.
- [4] Голубков А.В., Гончарова Е.В., Капустин В.А., Романова М.В., Смирнов И.А., // ФТТ. 1980. Т. 22. № 12. С. 3561–3567.
- [5] Голубков А.В., Сергеева В.М. // Журнал ВХО им. Д.И.Менделеева. 1981. Т. 26. № 6. С. 645–653.
- [6] Рябов А.В., Рувимов С.С., Сорокин Л.М., Смирнов Б.И., Голубков А.В. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 7. С. 1986–1989.
- [7] Оскотский В.С., Смирнов И.А. // Сб. «Редкоземельные полупроводники». Л., 1977. 206 с.

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
25 октября 1993 г.

© Физика твердого тела, том 36, № 4, 1994
Solid State Physics, vol. 36, N 4, 1994

ШИРИНА ЛИНИЙ МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА В ОКРЕСТНОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

Э.Халваши

Известно, что в точке фазового перехода парамагнетик — антиферромагнетик с магнитной анизотропией типа легкая ось ($\text{Cs}_2\text{FeF}_5 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $T_c = 2.4 \pm 0.1$ К) имеет место сильное уширение линии ЭПР [1], причем линия магнитного резонанса сужается как при уменьшении, так и при увеличении температуры от значения T_c .

Целью данного сообщения является выяснение механизма сужения линии магнитного резонанса выше критической температуры T_c .

Соответствующий гамильтониан анизотропного обменного взаимодействия запишем в стандартном виде

$$H' = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{ij \\ (i \neq j)}} [U_{ij} S_i^z S_j^z + V_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)], \quad (1)$$

где U_{ij} и V_{ij} — продольный и поперечный обменные потенциалы, S^a ($a = x, y, z$) — компоненты спина $S = 1/2$.

1. При повышении температуры от значения T_c сужение резонансной линии происходит в результате усреднения анизотропного обменного взаимодействия (1) и «превращения» его в изотропное, а именно при повышении температуры спиновые пары «начинают успевать» одновременно занимать всевозможные положения в пространстве в течение времени, меньшего, чем время спин-спиновой релаксации T_2 , обусловленное взаимодействием (1).

Действительно, если в начальный момент времени гамильтониан имел вид (1), то в последующий момент из-за поворота спиновой пары