

## ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ ТАЛЛИЯ В $Pb_{1-x}Ge_xTe$

Житинская М. К., Карпов А. А., Немов С. А.

Исследованы явления переноса в твердых растворах  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  ( $0 \leq x \leq 0.20$ ), легированных 2 ат% таллия, в диапазоне температур 77—450 К. Установлено, что с ростом содержания германия в твердом растворе уменьшается легирующее действие примеси таллия и постепенно исчезают различия в кинетических коэффициентах образцов с примесью Тl и без нее, при  $x=0.20$  практически совпадают также температуры фазового перехода.

Обнаруженные особенности экспериментальных данных находят объяснения в моделях квазилокальных примесных состояний таллия и связываются с влиянием состава твердого раствора  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  на примесные состояния Тl. Сделаны оценки параметров полосы Тl в зависимости от состава твердого раствора.

Примесь таллия обладает глубоким акцепторным действием в халькогенидах свинца и оказывает существенное влияние на их электрофизические и оптические свойства [1-3]. Основные особенности экспериментальных данных образцов с таллием находят объяснение в модели квазилокальных примесных состояний Тl [1-3].

В настоящей работе продолжено изучение влияния примеси Тl на свойства полупроводников  $A^{IV}B^{VI}$ . Исследованы явления переноса в твердых растворах  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  ( $0 \leq x \leq 0.20$ ), легированных 2 ат% таллия.

Анализ полученных экспериментальных данных по удельному сопротивлению  $\rho$ , коэффициентам Холла  $R$  и термоэдс  $S$  при 77—450 К показал, что с ростом содержания Ge в твердом растворе  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  легирующее действие таллия уменьшается (рис. 1). Различия в кинетических коэффициентах в образцах с Тl и без него также постепенно уменьшаются, так что при  $x \approx 0.15-0.20$  они практически отсутствуют. Образцы с  $x=0.20$ , легированные 2 ат% Тl, имеют концентрации дырок  $p=(eR_{77})^{-1}$  (где  $R_{77}$  — коэффициент Холла при  $T=77$  К), близкие к значениям  $p$  в образцах, полученных отклонением от стехиометрии [4]. Они имеют подобные температурные зависимости и близкие численные значения  $\rho$ ,  $R$ ,  $S$ , практически совпадающие температуры фазового перехода (рис. 2).

Обсудим полученные данные. В рамках модели квазилокальных примесных состояний Тl уменьшение концентрации дырок в валентной зоне с ростом содержания Ge в твердом растворе свидетельствует о смещении полосы таллия к вершине валентной зоны (рис. 3). Оценим параметры полосы Тl — энергетическое положение центра полосы  $\epsilon_i$  и уширение  $\Gamma$ .

Для широких полос ( $\Gamma \gg k_0T$ ) справедливо соотношение [5, 6]

$$\epsilon_i - \mu = \frac{\Gamma}{2} \operatorname{tg} [\pi (0.5 - k)], \quad (1)$$

где  $\mu$  — химический потенциал,  $k$  — степень заполнения полосы примесных квазилокальных состояний дырками. Величину  $k$  можно оценить из уравнения электронейтральности. При этом необходимо учесть, что примесь Тl (элемент III группы) в PbTe является примесью замещения двухвалентного свинца в его подрешетке [7], а полоса Тl содержит два состояния на атом примеси [5]. Это означает, что квазилокальные состояния таллия наполовину заполнены

своими электронами. Кроме того, необходимо учесть, что полоса Т1 расположена ниже вершины валентной зоны. При этом электроны из зонных состояний, расположенных по энергии выше полосы Т1, перейдут в примесные состояния

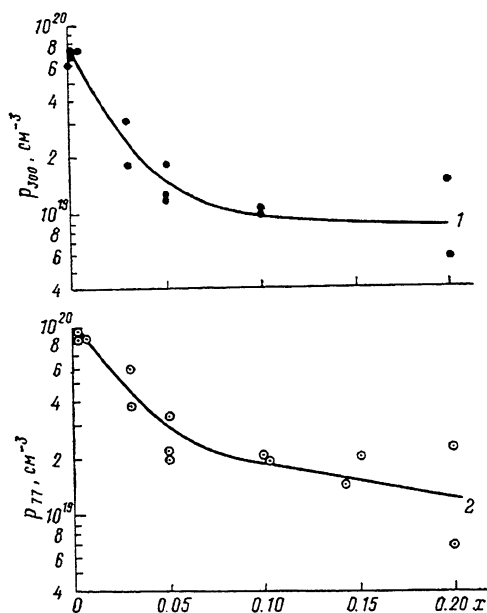


Рис. 1. Зависимость холловской концентрации дырок ( $p$ ) от состава ( $x$ ) твердого раствора  $Pb_{1-x}Ge_xTe$ , легированного 2 ат% теллура.

$T, K$ : 1 — 300, 2 — 77.

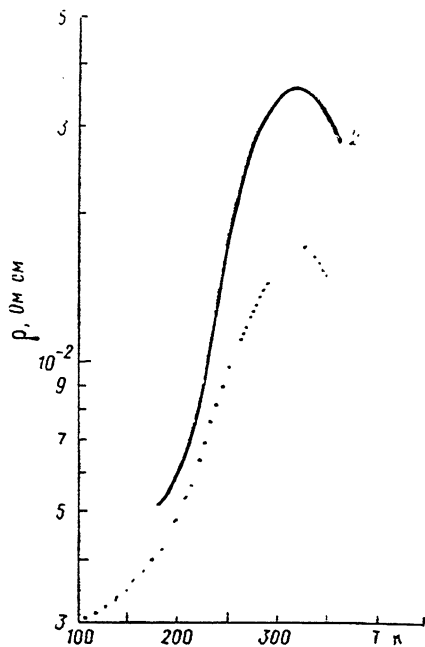


Рис. 2. Температурная зависимость удельного сопротивления ( $\rho$ ) в  $Pb_{0.8}Ge_{0.2}Te$ .

Примесь: 1 — Т1, 2 — избыток теллура, данные [4]. Максимум  $\rho$  связан с аномальным рассеянием дырок при структурном фазовом переходе [4, 11].

в количестве, равном концентрации дырок ( $p$ ) в валентной зоне. Таким образом, величина  $k$  определяется соотношением [8]

$$k = 0.5 - p/2 N_{T1}, \quad (2)$$

где  $N_{T1}$  — содержание Т1 в образце.

Результаты оценок  $\epsilon_i$  с помощью формул (1), (2) для твердых растворов в предположении, что величина уширения  $\Gamma$  постоянна и равна ее значению в  $PbTe \langle Tl \rangle$  [1, 5], приведены на рис. 3. (Расчет химического потенциала производился с учетом сложного строения валентной зоны. Закон дисперсии легких

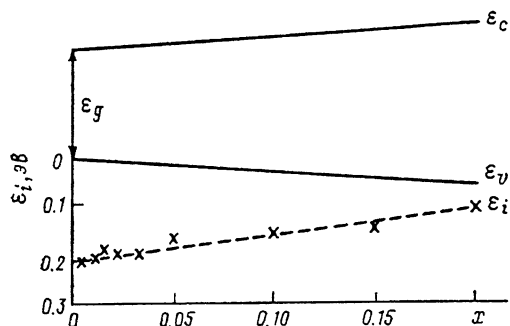


Рис. 3. Зависимость энергетического положения ( $\epsilon_i$ ) примесных состояний таллия от состава ( $x$ ) твердого раствора  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  при 77 К.

Отсчет энергии производится по шкале дырок от вершины валентной зоны.

дырок описывался кейновской моделью [1] с учетом зависимости ширины запрещенной зоны  $\epsilon_g$  от состава [9]).

Как видно из рис. 3, положение полосы таллия относительно вершины валентной зоны существенно зависит от состава твердого раствора. (В линейном приближении  $d\epsilon_i/dx \sim -0.7$  эВ). В таком случае флуктуации состава твердых растворов должны приводить к значительному неоднородному уширению  $\Gamma_{\text{вход}}$  полосы Т1 подобно наблюдавшемуся в  $PbSe_{1-x}S_x \langle Tl \rangle$  [10]. По порядку величины

$\Gamma_{\text{неодн}} \sim |\varepsilon_i(0) - \varepsilon_i(x)|$ . Для  $x \approx 0.2$  получим  $\Gamma_{\text{неодн}} \sim 0.15$  эВ, что примерно на порядок больше уширения полосы таллия, связанного с электронными переходами примесь—зона в RbTe, легированном 2 ат% Tl [1, 5]. Значительное уширение полосы Tl в твердых растворах сопровождается уменьшением плотности примесных состояний и соответственно их вклада в явления переноса.

Таким образом, примесная полоса Tl в  $\text{Pb}_{1-x}\text{Ge}_x\text{Te}$  с ростом содержания германия ( $x$ ) быстро смещается к вершине валентной зоны. Одновременно происходит ее значительное неоднородное уширение. В результате примесные состояния таллия оказывают все меньшее влияние на основные кинетические коэффициенты.

#### Список литературы

- [1] Кайданов В. И., Равич Ю. И. // УФН. 1985. Т. 145. В. 1. С. 51—86.
- [2] Вейс А. Н., Кайданов В. И., Немов С. А. // ФТП. 1978. Т. 12. В. 8. С. 1599—1606.
- [3] Кайданов В. И., Мельник Р. Б., Немов С. А. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 5. С. 1011—1013.
- [4] Ерасова Н. А., Казьмина Е. В. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1979. Т. 15. В. 8. С. 1370—1374.
- [5] Кайданов В. И., Немов С. А., Равич Ю. И., Зайцев А. М. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 2. С. 268—271.
- [6] Кайданов В. И., Немов С. А., Зайцев А. М. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 9. С. 1613—1617.
- [7] Гарцман К. Г., Жукова Т. Б., Немов С. А. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1985. Т. 21. В. 3. С. 498—500.
- [8] Кайданов В. И., Немов С. А., Парфеньев Р. В., Шамшур Д. В. // Письма ЖЭТФ. 1982. Т. 35. В. 12. С. 517—518.
- [9] Nicolîş P. M. // Brit. J. Appl. Phys. 1969. V. 2. N 3. P. 383—388.
- [10] Вейс А. Н., Кайданов В. И., Немов С. А. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 6. С. 1054—1058.
- [11] Абдуллин Х. А., Лебедев А. И. // ФТТ. 1983. Т. 25. В. 12. С. 3571—3576.

Ленинградский политехнический институт  
им. М. И. Калинина

Получена 20.04.1990  
Принята к печати 27.04.1990