

ное таким образом значение энергии Ферми составило 1.06 Ry. Плотность состояний на уровне Ферми составляет 10.77 сост./Ry·яч.

Как известно, для теоретического расчета параметра электрон-фононного взаимодействия необходима информация о парциальных вкладах в полную плотность состояний на уровне Ферми. Согласно нашим расчетам, данные вклады распределяются следующим образом: *s*-, *p*-, *d*-электроны тантала 1, 0.5 и 76 % соответственно, *s*- и *p*-электроны азота менее 0.5 и 17 %. Таким образом, *p*-электроны азота и *d*-электроны тантала и здесь играют определяющую роль.

По известным радиальным функциям распределения заряда нами были определены также направление и величина переноса заряда в данном соединении. Как и следовало ожидать из сравнения электроотрицательностей компонент, перенос заряда в нитриде тантала осуществляется от атома металла к атому неметалла. Количественно он составляет около 0.5 электрона, что говорит о заметной ионной составляющей химической связи в данном соединении.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Andersen O. K. // Phys. Rev. 1975. V. B12. N 8. P. 3060—3083.
- [2] Skriver H. L. The LMTO Method. Berlin, 1984. 380 p.
- [3] Koelling D. D. // Rep. Progr. Phys. 1981. V. 44. P. 139—212.
- [4] Barth V., Hedin L. // J. Phys. 1972. V. C5. P. 1629—1642.

Институт физики твердого тела  
и полупроводников АН БССР  
Минск

Поступило в Редакцию  
22 февраля 1988 г.  
В окончательной редакции  
29 сентября 1988 г.

УДК 621.315.592

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

## ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И ТЕРМОЭДС ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Cd_xHg_{1-x}Te$ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

С. А. Алиев, Т. Г. Гаджиев, Р. И. Селим-заде

В настоящей работе приводятся результаты исследования теплопроводности  $\kappa$  и термоэдс  $\alpha$   $HgTe$  и  $Cd_xHg_{1-x}Te$  ( $x=0.05, 0.1, 0.14, 0.2$ ) в интервале температур  $2 \leq T \leq 100$  К. Экспериментальные результаты о  $\kappa(T)$  представлены на рис. 1. Для всех исследованных образцов  $\kappa$  проходит через максимум при  $\sim 8$  К, в области 20—80 К зависимость  $\kappa(T)$  для  $HgTe$  соответствует  $\kappa \sim T^{-n}$  ( $n=1, 2$ ); с переходом к  $Cd_xHg_{1-x}Te$  уменьшаются значения  $\kappa$  и  $n$ . Экспериментальные результаты сопоставлены с общепринятыми теоретическими представлениями о  $\kappa(T)$ . Общее согласие эксперимента с теорией имеется. Значительное отклонение теории от эксперимента наблюдается в области 4—20 К. Оценки показывают, что согласия эксперимента с теорией можно добиться, если допустить, что в  $HgTe$  имеют место собственные дефекты, аналогичные содержанию  $\sim 0.01$  ат. % Cd. Из рис. 1 также видно, что наклон кривых  $\kappa(T)$  при  $T < T_{max}$  убывает с содержанием Cd, что связано в основном с влиянием точечных дефектов. В то же время обнаружено, что значение  $\kappa$  зависит от типа и концентрации носителей заряда. Это можно связать с рассеянием фононов на носителях заряда, где прослеживается индивидуальность поведения электронов и дырок в рассеянии фононов, т. е. фононы на дырках рассеиваются наиболее эффективно. Эти эксперименты подтверждают выводы работы [1].

Исследование термоэдс  $\alpha$  (рис. 2) показало, что в образце с  $x=0.14$  на температурной зависимости  $\alpha(T)$  обнаруживается особенность. Рассчитана диффузионная часть термоэдс; показано, что в образце с  $x=0.14$  имеет место эффект увлечения дырок фононами; обнаружено, что фононная доля термоэдс начинает проявляться с 25 К, при  $\sim 7$  К проходит через максимум. Совпадение максимумом  $\alpha$  и  $\alpha_{\text{фон}}$  по температурной шкале говорит в пользу того, что в исследованном образце  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  ( $x=0.14$ ) до температуры граничного рассеяния в переносе тепла, как и в эффекте увлечения, участвуют длинноволновые фононы, т. е. имеет место активное рассеяние коротковолновых фононов на точечных дефектах. Отсутствие эф-

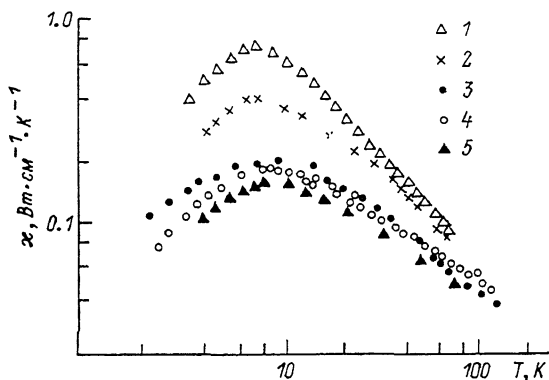


Рис. 1. Температурная зависимость теплопроводности в твердых растворах  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ .

$x$ : 1 — 0, 2 — 0.05, 3 — 0.1, 4 — 0.14, 5 — 0.2.

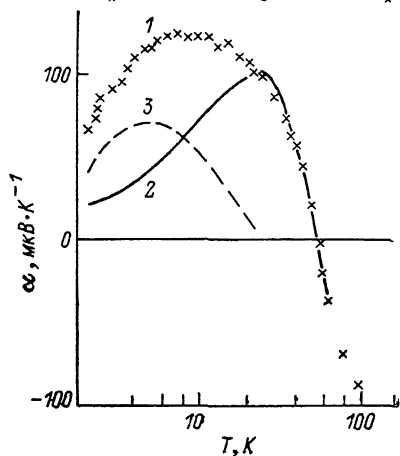


Рис. 2. Температурная зависимость термоэдс в  $\text{Cd}_{0.14}\text{Hg}_{0.86}\text{Te}$ .

1 — эксперимент, 2 — расчетная диффузионная термоэдс, 3 — термоэдс увлечения.

фекта увлечения в других образцах, возможно, связано с тем, что они обладали  $n$ -типом проводимости с чрезвычайно высоким значением подвижности электронов.

#### Л и т е р а т у р а

[1] Тамарин П. В., Косарев В. В., Ивлев В. С. // ФТТ. 1971. т. 13. № 6. С. 1814—1818.

Институт физики АН АзССР  
Баку

Поступило в Редакцию  
9 июня 1988 г.  
В окончательной редакции  
30 сентября 1988 г.

УДК 539.143.43

Физика твердого тела, том 31, в. 2, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, № 2, 1989

### ФОРМА СИГНАЛА СОЛИД-ЭХА В ЯМР ТВЕРДОГО ТЕЛА

Н. А. Сергеев, А. В. Сапига, Д. С. Рябушкин

В настоящее время расчет формы сигнала двухимпульсного эха в ЯМР твердого тела из-за многочастичного характера задачи проводится главным образом в виде степенного ряда по  $t$  и  $\tau$  ( $\tau$  — временной интервал между