

**ДОПУСТИМЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ УРОВНЯ
СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ
[В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ СВИНЕЦ—ОЛОВО—СЕЛЕН]**

Каширская Л. М., Кучеренко И. В., Свистов А. Е.

Собственные дефекты в соединениях типа $A^{IV}B^{VI}$ создают глубокие уровни, энергия которых не коррелирует с положением экстремумов зон [1]. Ранее в ряде работ [2-6] было показано, что в нелегированном $n\text{-Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ имеется уровень, расположенный вблизи экстремума зоны проводимости. Величина возмущающего потенциала, создаваемого дефектом в этих соединениях, ~ 1 эВ [7], в то время как энергия уровня E_{γ} изменяется во всем экспериментально допустимом интервале значений состава (x), температуры (T), гидростатического давления (P) на величину ≤ 0.3 эВ [5]. Поэтому в первом приближении можно считать, что

$$E_{\gamma} = E_0 + \alpha_x x + \alpha_T T + \alpha_P P. \quad (1)$$

Здесь и далее энергия отсчитывается от середины запрещенной зоны в этих кристаллах.

Ранее нами было показано, что $E_0 \simeq 10$ мэВ, $\alpha_x \simeq 0$, $\alpha_T = 0$, $\alpha_P \simeq 4.3$ мэВ/кбар [5]. Эти коэффициенты получены главным образом на основе обработки температурных зависимостей коэффициента Холла R_H . При этом предполагалось, что уровень узкий, донорный, однозарядный, а величина холл-фактора равна единице. Поэтому оценить точность полученных параметров не представлялось возможным.

Целью данной работы является определение предельно допустимых интервалов, в которых лежат значения E_0 , α_x , α_T и α_P . Как будет показано далее, опираясь на ряд экспериментов, можно утверждать, что при некоторых экспериментально реализуемых комбинациях x_i , T_i и P_i энергия уровня

$$E_{\gamma}(x_i, T_i, P_i) > W_i, \quad (2a)$$

или

$$E_{\gamma}(x_i, T_i, P_i) < W_i, \quad (2б)$$

где E_{γ} определяется (1), а значения W_i получены без упомянутой выше обработки $R_H(T)$ и каких-либо допущений о природе данного уровня. Совокупность

Т а б л и ц а 1

№ строки	x	T , К	P , кбар	$>$, $<$ *	W , мэВ
1	0	0	0	∨	73
2	0	0	0	∨	—73
3	0.06	0	0	∨	66
4	0.15	0	0	∨	39
5	0.15	0	0	∨	0
6	0.15	0	29	∨	124
7	0.15	300	0	∨	47
8	0.15	300	15	∨	18
9	0.2	0	0	∨	37
10	0.2	0	26	∨	135
11	0.31	0	0	∨	73
12	0.31	0	12	∨	127
13	0.31	300	0	∨	55
14	0.31	150	0	∨	23
15	0.31	300	12	∨	66
16	0.31	300	0	∨	0
17	0.31	300	12	∨	51
18	0.37	300	0	∨	24

Примечание. * Знаки соответствуют неравенствам типа: $>$ — (2а), $<$ — (2б).

таких неравенств определяет предельно допустимые интервалы, внутри которых лежат значения E_0 , α_x , α_T , α_P . Оказалось, что эта система неравенств значения некоторых параметров определяет достаточно жестко. Все коэффициенты рассматриваемых неравенств представлены в табл. 1. Там же отмечен и тип данного неравенства (2а) или (2б).

Строки 1, 2 в табл. 1 соответствуют тому, что уровень в PbSe при низкой температуре расположен в запрещенной зоне [2, 3]. В работе [4] было пока-

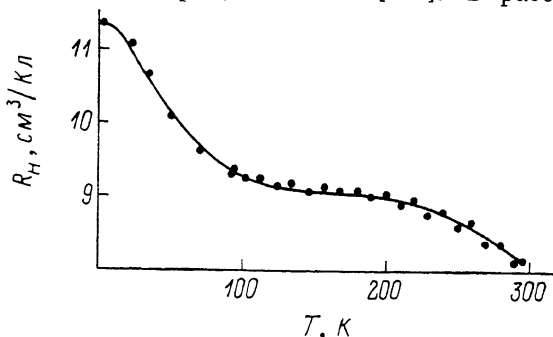


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента Холла R_H в $n\text{-Pb}_{0.85}\text{Sn}_{0.15}\text{Se}$ (измерительное поле 2 кЭ).

зано, что уменьшение R_H с ростом T от 200 до 300 К в этих кристаллах свидетельствует об ионизации уровня, который, таким образом, должен быть расположен ниже уровня Ферми E_F при низкой температуре, т. е. $E_\gamma(x_i, T \ll \ll 150, P=0) < E_F(x_i, T, P=0)$. Коэффициенты таких неравенств представлены в строках 3, 9, 11, 14 табл. 1. Значения E_F получены из холловской концентрации расчетом в рамках шестизонной модели закона дисперсии [8] с параметрами, приведенными в [4]. На рис. 1 представлена зависимость $R_H(T)$ для образца с $x=0.15$. Видно, что уменьшение R_H начинается уже с 20 К, поэтому уровень при $T=0$ расположен ниже E_F , но близок к нему (строки 4, 5 в табл. 1).

Ранее было показано, что при 300 К в этом образце при увеличении P от 0 до 15 кбар концен-

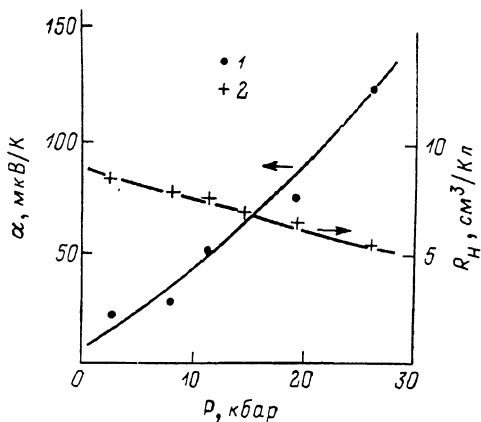


Рис. 2. Барическая зависимость термоэдс α (1) и коэффициента Холла R_H (2) в $n\text{-Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Se}$.

Термоэдс измерялась при 12 К, а R_H — при 4.2 К в магнитном поле 2 кЭ.

трация электронов в зоне проводимости возрастает на величину, примерно равную изменению концентрации электронов с температурой при $P=0$ (табл. 2 в [5]). Поэтому при $P=0$ $E_\gamma < E_F$ (строка 7), а при $P=15$ кбар $E_\gamma > E_F$ (строка 8).

В случае, когда уровень налагается на зону проводимости L_6^+ (инверсное по отношению к PbSe расположение термов) и расположен вблизи экстремума зоны, имеет место существенная гибридизация блоховских волновых функций свободных электронов и резонансных состояний уровня [5]. При $E_F \approx E_\gamma$ возникает дополнительный вклад дырочного типа в R_H , проводимость и термоэдс α . Такая ситуация при 4.2 К реализуется в кристалле с $x=0.15$ вплоть до $P=29$ кбар, что приводит к инверсии знака R_H и α под действием P [6]. В этом образце, следовательно, при $0 \leq P \leq 29$ кбар уровень находится в зоне проводимости (строки 4, 6). Как отмечалось ранее, при $P=0$, $T=4.2$ К в кристал-

лах с $0.15 < x \leq 0.37$ данный уровень расположен ниже E_F . Если под действием P уровень пересекает E_F , то при $E_g \simeq E_F$ следовало ожидать аналогичных аномалий в R_H , α и в этих кристаллах, поскольку они характеризуются инверсным расположением термов. На рис. 2 представлены барические зависимости R_H и α в $\text{Pb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}\text{Se}$. Видно, что R_H изменяется незначительно, а α растет в соответствии с увеличением эффективной массы в зоне проводимости. Таким образом, следует заключить, что даже при максимальном давлении $E_g < E_F$ (строка 10). Аналогичные явления наблюдаются и в кристалле с $x=0.31$ при 4.2 К (строки 11, 12).

При 300 К обусловленный гибридизацией блоховских и резонансных волновых функций электронов дополнительный вклад дырочного типа в R_H наблюдался при $P=0$ в кристаллах с $x=0.31$ и 0.37 [5], поэтому в них уровень находится в зоне проводимости L_6^+ (строки 16, 18). Наконец, как было показано в [5], дополнительный вклад в R_H в образце с $x=0.31$ при 300 К увеличивается с ростом P , поэтому вплоть до $P=12$ кбар уровень расположен в зоне проводимости и ниже E_F (строки 13, 15, 17 в табл. 1).

При составлении описанных выше ограничений необходимо было учесть и возможные ошибки в определенных из эксперимента значениях x , T , P , E_F . Поэтому в табл. 1 представлены значения W , соответствующие ослабленным (с учетом этих ошибок) неравенствам, т. е. для неравенств типа (2а) значения W были уменьшены, а для (2б) увеличены. Описанная выше система линейных неравенств решалась на ЭВМ симплекс-методом. Предельно допустимые значения каждого из параметров представлены в табл. 2. Следует подчеркнуть, что

Т а б л и ц а 2

E_0 , мэВ		α_x , мэВ		α_T , мэВ/К		α_P , мэВ/кбар	
min	max	min	max	min	max	min	max
-32.6	9.3	49	217	-0.078	-0.011	3.72	4.36
$\frac{1}{2} E_g (\text{PbSe}, 4.2 \text{ К}) = 73 \text{ мэВ}$		$\frac{1}{2} \frac{\partial E_g }{\partial x} = 4.45 \text{ мэВ}$		$\frac{1}{2} \frac{\partial E_g }{\partial T} = 0.22 \text{ мэВ/К}$		$\frac{1}{2} \frac{\partial E_g }{\partial P} = 4.3 \text{ мэВ/кбар}$	

неравенства ограничивают в четырехмерном пространстве E_0 , α_x , α_T , α_P выпуклый многогранник, поэтому экстремальное значение любого из параметров соответствует одной из вершин этого многогранника и реализуется лишь при строго определенных значениях остальных трех параметров. Для сравнения в табл. 2 приведены $0.5 E_g$ (PbSe , 4.2 К) — энергия дна зоны проводимости в PbSe в отсчете от середины запрещенной зоны при 4.2 К, $P=0$ и скорости смещения зон $0.5 \partial |E_g| / \partial x$, $0.5 \partial |E_g| / \partial T$, $0.5 \partial |E_g| / \partial P$ при изменении x , T , P соответственно.

Из табл. 2 вытекает следующее.

1. Уровень практически не смещается относительно дна зоны при увеличении давления. Точнее, под действием давления скорость изменения энергии зоны L_6^+ относительно середины запрещенной зоны более чем в 7 раз превышает скорость относительного движения дна зоны и уровня.

2. При увеличении температуры энергия уровня уменьшается относительно середины запрещенной зоны со скоростью $\alpha_T = -0.05 \pm 0.04$ мэВ/К, много меньшей скорости смещения экстремумов зон $0.5 \partial |E_g| / \partial T = 0.22$ мэВ/К.

3. Согласно результатам оптических исследований, в PbSe при низкой температуре уровень расположен выше середины запрещенной зоны на 50 [2] или на 20 мэВ [3]. Мы получили, что $E_0 \leq 9$ мэВ. Причина столь большого расхождения нам в настоящее время не ясна так же, как не ясно, почему в [3] получено значение $\alpha_T = 0.2$ мэВ/К. Отметим, наконец, что если для наилучшего согласования с оптическими экспериментами считать, что $E_0 = 9$ мэВ, то соответствующие этой энергии $\alpha_x = 50$ мэВ, $\alpha_T = -0.011$ мэВ/К, $\alpha_P = 3.7$ мэВ/кбар будут близки к значениям, полученным нами в [5].

В заключение выражаем благодарность В. А. Каминскому за помощь в проведении численной обработки результатов.

Л и т е р а т у р а

- [1] Parada N. J., Pratt G. W. // Phys. Rev. Lett. 1969. V. 22. N 5. P. 180—182.
- [2] Lischka K., Preier H. // Phys. St. Sol. (b). 1980. V. 101. N 2. P. K129—K134.
- [3] Вейс А. Н. // ДАН СССР. 1986. Т. 289. В. 6. С. 1355—1359.
- [4] Кучеренко И. В., Свистов А. Е., Шотов А. П. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 6. С. 1108—1111.
- [5] Копыловский Б. Д., Кучеренко И. В., Свистов А. Е. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 11. С. 2049—2055.
- [6] Ицкевич Е. С., Каширская Л. М., Кучеренко И. В., Панкратов О. А., Свистов А. Е., Шотов А. П. // Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 43. В. 6. С. 303—306.
- [7] Волков Б. А., Панкратов О. А. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. В. 1. С. 280—293.
- [8] Dimmok T. O. // Proc. Conf. «Phys. Semimet. a. Narrow Gap. Semicond.». Dallas, 1970. P. 319—330.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР
Москва

Получено 23.05.1988
Принято к печати 11.10.1988