# Влияние межзонного рассеяния на явления переноса в p-PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>

© С.А. Немов\*+¶, Н.М. Благих\*, М.Б. Джафаров•

- \* Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
- 195251 Санкт-Петербург, Россия
- + Забайкальский государственный университет,

672039 Чита, Россия

• Азербайджанский технологический университет,

Аz-2011 Гянджа, Азербайджан

(Получена 18 декабря 2013 г. Принята к печати 23 декабря 2013 г.)

Экспериментальные данные по явлениям переноса в p-PbSb $_2$ Te $_4$  качественно и количественно объяснены в двухзонной модели с межзонным рассеянием в диапазоне температур 77—300 K. Определены параметры двухзонной модели: эффективные массы плотности состояний легких и тяжелых дырок  $m_{d1}\approx 0.5m_0$ ,  $m_{d2}\approx 0.9m_0~(m_0$  — масса свободного электрона), энергетический зазор между неэквивалентными экстремумами  $\Delta E_v(T)\approx 0.23-4.5\cdot 10^{-2}(T/100-1)$  эВ.

#### 1. Введение

Соединение  $PbSb_2Te_4$  получается по перитектической реакции с большим количеством собственных дефектов [1]. Дефекты электрически активны и приводят к дырочной проводимости кристаллов с концентрацией носителей тока  $p \approx 3.2 \cdot 10^{20} \, \mathrm{cm}^{-3}$  [2]. Столь высокая концентрация дырок и отсутствие кристаллов с другими значениями p сильно затрудняют анализ данных по электропроводности, термоэдс и эффекту Холла [3].

В связи с этим анализ экспериментальных данных по явлениям переноса первоначально проводился в однозонной модели [3]. Отметим, что обе компоненты тензора термоэдс ( $S_{\parallel}$  — вдоль тригональной оси и  $S_{\perp}$  — в плоскости скола кристаллов) практически линейно растут с температурой, а обе компоненты электропроводности  $\sigma_{\parallel}$  и  $\sigma_{\perp}$  убывают по степенному закону в соответствии с теорией кинетических явлений в полупроводниках с одним сортом носителей тока в случае сильного вырождения электронного газа [4]. Однако экспериментально наблюдаемый сильный рост коэффициента Холла R с температурой (отношение  $R_{300\,\mathrm{K}}/R_{77\,\mathrm{K}}$  для обеих компонент тензора Холла достигает величины около двух) [5] не описывается в однозонной модели.

Качественно увеличение коэффициента Холла с температурой традиционно в физике полупроводников интерпретируется в двухзонной модели с разными эффективными массами и подвижностями носителей тока. Зависимость R(T) объясняется перераспределением носителей между неэквивалентными экстремумами при изменении температуры.

Введение Си в шихту кристаллов  $PbSb_2Te_4$  позволило снизить концентрацию дырок до значения  $p_{min}\approx 1.6\cdot 10^{20}\,{\rm cm}^{-3}$  [6,7]. Подробный анализ экспериментальных данных по температурным зависимостям удельной электропроводности, коэффициентов Холла, Зеебека и Нернста—Эттингсгаузена Q, выполненный в

работах [8,9], показал, что в кристалле с  $p_{\min}$  в области низких температур (77—150 K) экспериментальные данные хорошо описываются однозонной моделью, а при повышении температуры необходимо учитывать вклад дырок из дополнительного экстремума валентной зоны. В этом приближении были оценены параметры легких и тяжелых дырок в  $PbSb_2Te_4$  [8,9]. Тем не менее их использование не позволило удовлетворительно количественно описать температурные зависимости кинетических коэффициентов [9].

В настоящей работе приводятся результаты количественного описания экспериментальных данных по температурным зависимостям основных кинетических коэффициентов в двухзонной модели с учетом межзонного рассеяния и проводимости по тяжелой зоне.

# 2. Модель энергетического спектра дырок

Согласно результатам [6,8,9], валентная зона в PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> имеет сложное строение. Предположим, что основной вклад в явления переноса вносят два сорта дырок в основном (1) и дополнительном (2) экстремумах с различающимися эффективными массами плотности состояний  $m_{d1}$  и  $m_{d2}$  и подвижностями  $u_1$  и  $u_2$ . Таким образом, мы предполагаем, что энергетический спектр дырок в валентной зоне PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> имеет вид, изображенный на рис. 1. Согласно оценкам, сделанным в [9], спектр дырок характеризуется следующими значениями:  $m_{d1} \approx (0.5 - 0.6) m_0 \ (m_0$  — масса свободного электрона),  $m_{d2} \approx (1-2)m_0$ , энергетический зазор между неэквивалентными экстремумами валентной зоны  $\Delta E_v \approx (0.22 - 0.23) \, \mathrm{эB} \,$  при  $T = 100 \, \mathrm{K}$ , химический потенциал  $\mu$  в PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> только в кристалле с  $p_{\min}$  не входит в дополнительный экстремум ( $\mu < \Delta E_v$ ) при низких температурах,  $\mu^* = \mu/k_0 T \approx 25 \gg 1 \ (k_0 - \text{постоянная})$ Больцмана), что позволяет использовать вырожденную

<sup>¶</sup> E-mail: nemov\_s@mail.ru

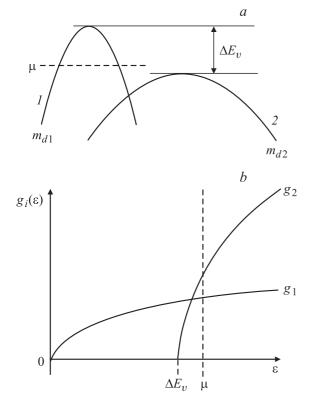


Рис. 1. Качественный вид энергетического спектра валентной зоны  $PbSb_2Te_4$  (a) и плотности состояний (b) в двухзонной модели.  $\varepsilon$  — энергия носителей тока, отсчитывается в шкале дырок от вершины основного (1) экстремума,  $\Delta E_v$  — энергетический зазор между основным (1) и дополнительным (2) экстремумами валентной зоны,  $\mu$  — химический потенциал,  $m_{d1}$  и  $m_{d2}$  — эффективные массы плотности состояний в (1) и (2) зоне соответственно,  $g_i(\varepsilon)$  — функция плотности состояний в i-ой зоне (i = 1, 2).

статистику при описании вклада легких дырок в основном экстремуме валентной зоны в кинетические коэффициенты.

# Кинетические коэффициенты в двухзонной модели

Как известно из теории явлений переноса (см., например, [4,10]), кинетические коэффициенты электропроводности  $(\sigma)$ , термоэдс (S), Холла (R) и поперечного эффекта Нернста—Эттингсгаузена (Q) определяются вкладами носителей тока обоих экстремумов в соответствии с выражениями:

$$\int \sigma = \sigma_1 + \sigma_2, \tag{1}$$

$$\begin{cases} S = \frac{\sigma_1}{\sigma} S_1 + \frac{\sigma_2}{\sigma} S_2, \\ R = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma}\right)^2 R_1 + \left(\frac{\sigma_2}{\sigma}\right)^2 R_2, \end{cases}$$
 (2)

$$R = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma}\right)^2 R_1 + \left(\frac{\sigma_2}{\sigma}\right)^2 R_2,\tag{3}$$

$$Q = \frac{\sigma_1}{\sigma} Q_1 + \frac{\sigma_2}{\sigma} Q_1 + \frac{\sigma_1 \sigma_2}{\sigma} Q_{12}, \tag{4}$$

где индексы 1 и 2 — обозначают соответствующие парциальные кинетические коэффициенты обеих зон, а  $Q_{12}$  — смешанный член, равный

$$Q_{12} = (S_1 - S_2)(u_1 - u_2), (5)$$

где  $u_1$  и  $u_2$  — холловские подвижности дырок в первом и во втором экстремумах соответственно.

При изменении температуры полная концентрация носителей тока р в валентной зоне постоянна, носители лишь перераспределяются между экстремумами:

$$p = p_1(T) + p_2(T) = \text{const.}$$
 (6)

В общем случае она выражается через интеграл Ферми  $F_{1/2}$  [см., например, 11]:

$$F_{1/2}(\mu^*) = \int_0^\infty f_0(x, \mu^*) x^{1/2} dx, \tag{7}$$

$$p_1 = \frac{4\pi}{h^3} (m_{d1}, k_0 T)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}}(\mu_1^*), \tag{8}$$

$$p_2 = \frac{4\pi}{h^3} \left( m_{d2}, k_0 T \right)^{\frac{3}{2}} F_{\frac{1}{2}} (\mu_1^* - \Delta E_v^*), \tag{9}$$

где  $f_0$  — равновесная функция распределения Ферми— Дирака,  $\bar{x}=arepsilon/k_0 T$ ,  $\Delta E v^*=\Delta E_v/k_0 T$ ,  $\mu_1^*=\mu_1/k_0 T$ ,  $\mu_1$  — химический потенциал, отсчитанный от вершины основного (1-го) экстремума (шкала дырок).

Все парциальные кинетические коэффициенты в случае степенной зависимости времени релаксации ( au)от энергии  $(\varepsilon)$ , т.е. когда  $\tau \propto \varepsilon^{r-1/2}$  (r — параметр рассеяния, равный r = 0 для акустического и r = 2 для примесного рассеяния), выражаются через интегралы Ферми с индексом n:

$$F_n(\mu^*) = \int_0^\infty f_0(x, \mu^*) x^n dx.$$
 (10)

#### Оценки параметров тяжелых дырок в PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>

Для проведения расчетов в двухзонной модели формулы (1)—(4) удобно выразить через отношения концентраций дырок  $\eta = p_1/p_2$  и их подвижностей  $b = u_1/u_2$ :

$$1 = \left(\frac{\eta b}{1 + \eta b}\right) + \left(\frac{1}{1 + \eta b}\right),\tag{11}$$

$$S = S_1 \left(\frac{\eta b}{1 + \eta b}\right) + S_2 \left(\frac{1}{1 + \eta b}\right), \tag{12}$$

$$\begin{cases} R = R_1 \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right)^2 + R_2 \left(\frac{1}{1+\eta b}\right)^2, \end{cases} \tag{13}$$

$$Q = Q_1 \left( \frac{\eta b}{1 + \eta b} \right) + Q_2 \left( \frac{1}{1 + \eta b} \right) + Q_{12} \left( \frac{\eta b}{(1 + \eta b)^2} \right).$$
 (14)

Коэффициент Холла в относительных единицах равен:

$$\frac{R}{R_0} = \left(1 + \frac{A_1/A_2}{\eta}\right) \left(\frac{\eta}{1+\eta b}\right)^2 + \left(1 + \frac{\eta}{A_1/A_2}\right) \left(\frac{1}{1+\eta b}\right)^2, \tag{15}$$

где  $R_0$  — низкотемпературное значение, полученное экстраполяцией R(T) к нулевой температуре,  $A_1$  и  $A_2$  — холл-факторы для носителей в основном и дополнительном экстремумах.

Термоэдс для носителей одного типа описывается выражением

$$S = \frac{k_0}{e} \left[ \frac{r+2}{r+1} \frac{F_{r+1}}{F_r} - \mu^* \right], \tag{16}$$

$$F_n(\mu^*) = \int_{0}^{\infty} \frac{x^n dx}{e^{x - \mu^*} + 1},$$
 (17)

где r — эффективный параметр рассеяния.

В  $PbSb_2Te_4$  расчеты удобно делать, используя экспериментальные данные для компонент тензоров кинетических коэффициентов в плоскости скола. Дело в том, что, как показано в работах [3,12] на основании анализа данных по анизотропии термоэдс и коэффициента Нернста—Эттингсгаузена, в плоскости скола кристаллов  $PbSb_2Te_4$  доминирует акустический механизм рассеяния дырок и эффективный параметр рассеяния  $r_{\rm eff}$ , определяемый в вырожденных образцах соотношением

$$r_{\text{eff}} = \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \varepsilon} \Big|_{\varepsilon = \mu} + 0.5, \tag{18}$$

имеет значение, близкое к нулю, что характерно для рассеяния на длинноволновых продольных акустических фононах (r=0).

В формуле (15) величины холл-факторов точно не известны и в расчетах кинетических коэффициентов принято полагать их отношение равным единице [10,13]. Это предположение оправдано, поскольку в основном экстремуме при обычных механизмах рассеяния ( $\tau \propto \varepsilon^{r-1/2}$ ) в случае сильного вырождения коэффициент  $A_1 = 1$ , а величина  $A_2$  немного отличается от 1 для невырожденной статистики при рассеянии на акустических фононах ( $A \approx 1.17$ ). Отметим, что акустический механизм рассеяния обычно доминирует в полупроводниках при комнатной и более высоких температурах, поэтому в расчетах обычно полагают отношение  $A_1/A_2 = 1$ , при этом формула (15) принимает вид

$$\frac{R}{R_0} = \frac{\eta^2 b^2 + \eta b^2 \eta + 1}{(\eta b + 1)^2}.$$
 (19)

Максимум коэффициента Холла отвечает условию  $\sigma_1 = \sigma_2$  или эквивалентному ему соотношению  $\eta b = 1$ , а величина максимального значения коэффициента Холла равна

$$\frac{R_{\text{max}}}{R_0} = \frac{(b+1)^2}{4b},\tag{20}$$

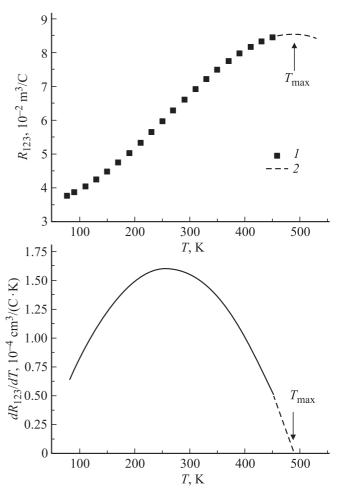
и определяется отношением подвижностей  $b = u_1/u_2$ .

Экспериментальные данные по температурным зависимостям коэффициента Холла R(T) и производной dR/dT=f(T) для кристалла  $PbSb_2Te_4$  с минимальной концентрацией дырок (см. рис. 2) свидетельствуют, что R достигает максимального значения  $R_{\rm max}/R_0\approx 2.3$  при температуре вблизи T=500 К. Из формулы (20) находим параметр  $b\approx 7$ .

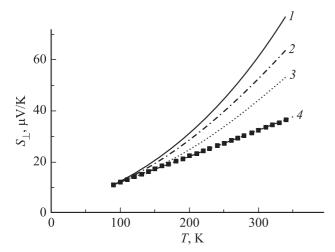
Численный расчет по формуле (19) показал, что температурная зависимость коэффициента Холла слабо чувствительна к вариациям параметра b в пределах от 4 до 9, а определяется в основном величиной и температурной зависимостью отношения концентраций дырок  $\eta(T)$ . Из экспериментальной зависимости R(T) по формуле (19) с найденным значением b была рассчитана зависимость  $\eta(T)$ , а из значения b в случае доминирующего акустического механизма рассеяния легких и тяжелых дырок была оценена эффективная масса тяжелых дырок по формуле [4,13,14]

$$b \approx \left(\frac{m_{d1}}{m_{d2}}\right)^{\frac{5}{2}} \left(\frac{\Xi_{11}}{\Xi_{22}}\right)^2,$$
 (21)

где  $\Xi_{11}$  и  $\Xi_{22}$  — константы деформационного потенциала для легких и тяжелых дырок соответственно (это



**Рис. 2.** Температурные зависимости коэффициента Холла  $R_{123}$  и производной  $dR_{123}/dT$  в PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> для кристалла с  $p=p_{\min}=1.6\cdot 10^{20}~\mathrm{cm}^{-3}$ .



**Рис. 3.** Температурная зависимость коэффициента Зеебека  $S_{\perp}$  в плоскости скола в кристалле  ${\rm PbSb_2Te_4}$  с концентрацией дырок  $p=1.6\cdot 10^{20}$  см $^{-3}$ . Точки — эксперимент, линии — расчет в двухзонной модели: I — без учета межзонного рассеяния,  $\Delta E_v \approx 0.23$  эВ; 2 — с учетом межзонного рассеяния,  $\Delta E_v(T) \approx 0.24 - 0.05 (T/100-1)$  эВ; 3 — с учетом межзонного рассеяния,  $A_1/A_2=1$ ; 4 — с учетом межзонного рассеяния,  $A_2=1$ ,  $A_1=f(T)$ .

близкие величины, входящие в вероятности внутризонного рассеяния дырок в основном и дополнительном экстремумах). При отношении  $\Xi_{11}/\Xi_{22}\approx 1$  из (21) получаем  $m_{d2}\approx m_0$ .

При известных эффективных массах  $m_{d1}$ ,  $m_{d2}$  и  $\Delta E_v$ , используя уравнение (6), формулы (7), (8) и найденную из R(T) зависимость  $\eta(T)$ , были вычислены химический потенциал и его температурная зависимость  $\mu(T)$ , а затем по формуле (12) — температурная зависимость термоэдс (см. рис. 3). Из рис. 3 видно, что расчет (линия I) не согласуется с экспериментальной почти линейной зависимостью S(T). Учет температурной зависимости энергетического зазора  $\Delta E_v(T)$  между неэквивалентными экстремумами существенно не улучшает согласия расчета с экспериментом (кривая 2 на рис. 3).

Таким образом, выполненные расчеты свидетельствуют о том, что необходим учет факторов, существенно уменьшающих величину полной термоэдс и ее парциальных составляющих. Подобным фактором в двухзонной модели является межзонное рассеяние.

# 5. Учет межзонного рассеяния в двухзонной модели

Представления о межзонном рассеянии носителей тока впервые были использованы в работе [15] для объяснения аномалий температурных и концентрационных зависимостей термоэлектрических свойств образцов p-SnTe. Коломоец в работе [16] вывел формулы для термоэдс, электропроводности и электронной теплопроводности (æ) в предположении, что энергетический спектр характеризуется двумя зонами легких и тяжелых

носителей (см. рис. 1). Межзонное рассеяние, обусловленное переходами электронов между неэквивалентными экстремумами, учитывалось во времени релаксации  $\tau$  (частоте переходов  $\tau^{-1}$ ) только для легких носителей тока. Вклад в проводимость тяжелых носителей в работе [16] не учитывался. В этом приближении обратное время релаксации имеет вид

$$\begin{cases} \frac{1}{\tau} \infty |M_1|^2 g_1(\varepsilon), & \varepsilon < \Delta E_v \\ \frac{1}{\tau} \infty |M_1|^2 g_1(\varepsilon) + |M_{12}|^2 g_2(\varepsilon), & \varepsilon \ge \Delta E_v, \end{cases}$$
(22)

где  $M_1$  и  $M_{12}$  — матричные элементы переходов между состояниями внутри 1-го экстремума и между 1 и 2 экстремумами.

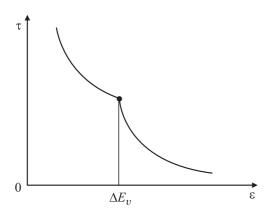
Подстановка  $\tau$  в виде (22) в формулу (16) для термоэдс легких носителей позволила качественно и достаточно хорошо количественно объяснить экспериментальные зависимости коэффициента термоэдс от состава в сплавах переходных металлов со слабо заполненной d-полосой, в частности, данные по термоэдс для Ni и сплава Ni—Cu [16].

Развитые Коломойцом в работе [16] представления о межзонном рассеянии были с успехом использованы авторами работы [17] для качественного объяснения особенностей термоэдс и коэффициента поперечного эффекта Нернста-Эттингсгаузена в легированном р-РьТе, валентная зона которого характеризуется наличием двух зон — легких и тяжелых дырок. Выполненные в модели Коломойца авторами работы [17] расчеты качественно подтвердили существенное влияние межзонного рассеяния дырок на величину и характер температурной и концентрационной зависимостей коэффициента Зеебека в p-PbTe и показали, что коэффициент Нернста-Эттингсгаузена также весьма чувствителен к этому механизму рассеяния. Однако количественного описания экспериментальных данных по S(T) и Q(T) в дырочном теллуриде свинца получить не удалось.

Следует отметить, что межзонное рассеяние играет важную роль не только при низких температурах, но и при более высоких. В недавней работе [18] рассмотрено влияние межзонного рассеяния на термоэлектрические свойства полупроводников и полуметаллов. Расчеты [18] делались в модели Коломойца [16] в предположении, что основным механизмом внутризонного рассеяния и легких, и тяжелых носителей тока является рассеяние на акустических фононах. В этом случае время релаксации легких носителей имеет вид

$$\tau^{-1} = \tau_0^{-1} \begin{cases} \sqrt{x}, & x < \Delta E_v^* \\ \sqrt{x} + w_{12} \sqrt{x - \Delta E_v^*}, & x > \Delta E_v^*, \end{cases}$$
(23)

где  $au_0$  — постоянный коэффициент в выражении для времени релаксации,  $w_{12}=(m_{d2}/m_{d1})^{3/2}(\Xi_{12}/\Xi_{11})^2$  — вероятность межзонного перехода,  $\Xi_{11},\Xi_{12}$  — константы деформационного потенциала для случаев внутризонного и межзонного рассеяния носителей тока.



**Рис. 4.** Качественный вид энергетической зависимости времени релаксации au(arepsilon) в двухзонной модели с межзонным рассеянием.

Термоэдс рассчитывалась по формулам [18]:

$$S_1 = \frac{k_0}{e} \left( \frac{I_1(\mu_1^*)}{I_0(\mu_1^*)} - \mu_1^* \right), \tag{24}$$

$$S_2 = \frac{k_0}{e} \left( \frac{I_1(\mu_1^* - \Delta E_v^*)}{I_0(\mu_1^* - \Delta E_v^*)} - (\mu_1^* - \Delta E_v^*) \right), \tag{25}$$

где  $I_1(\mu^*), I_0(\mu^*)$  — модифицированные интегралы Ферми:

$$I_i(\mu^*) = \int_0^\infty -\left(\frac{\partial}{\partial x}(1 + e^{(x - \mu^*)})^{-1}\right)\tau^*(x)x^{i + 3/2}dx, \quad (26)$$

где  $\tau^*(x) = \tau(x)/\tau_0$ .

Выполненные в работе [18] расчеты показали, что межзонное рассеяние в двухзонной модели с  $\Delta E_v > 0$  уменьшает термоэдс и термоэлектрическую эффективность Z полупроводников в согласии с экспериментом. Однако количественное описание температурных зависимостей кинетических коэффициентов отсутствует [18].

Наш расчет температурных зависимостей S и R в модели Коломойца [17] и модифицированной в [18] даже с учетом вклада в проводимость тяжелых дырок не согласуется с экспериментальными данными для  $PbSb_2Te_4$  (см. рис. 3, линия 3). На наш взгляд, это связано с тем, что энергетическая зависимость времени релаксации  $\tau(\varepsilon)$  имеет особенность при энергии носителей  $\varepsilon = \Delta E_v$  (см. рис. 4), связанную с появлением канала межзонного рассеяния. В этом случае при расположении уровня Ферми ( $\mu$ ) вблизи  $\Delta E_v$  нельзя использовать приближение Зоммерфельда и холл-фактор  $A_1 = \langle \tau_1^2 \rangle \langle \tau_2 \rangle^2$  [19], где угловые скобки обозначают усреднение, описываемое формулой

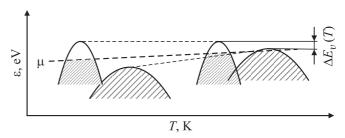
$$\langle \tau \rangle = \frac{\int\limits_{0}^{\infty} \tau \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{\int\limits_{0}^{\infty} \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon},\tag{27}$$

для носителей в первой зоне  $A_1 \neq 1$  в общем случае даже для сильно вырожденного газа носителей тока.

Аналогичный эффект наблюдается при резонансном рассеянии дырок в полосу резонансных состояний таллия, расположенную на фоне спектра зонных состояний в валентной зоне PbTe [20]. Как показали численные расчеты [21], холл-фактор в образцах с уровнем Ферми, расположенным в пределах примесной полосы Тl, при сильном резонансном рассеянии может существенно отличаться от единицы и достигать значения, близкого к 3.

По нашему мнению, учет температурной зависимости холл-фактора должен привести к улучшению согласия расчетов с экспериментальными данными для  $PbSb_2Te_4$ . При этом следует отметить, что выполненный нами расчет носит приближенный характер, поскольку отсутствует информация о величинах ряда параметров (таких как константы деформационного потенциала) и о температурных зависимостях эффективных масс и отношения подвижностей (мы их полагали постоянными).

Поэтому в приведенных далее расчетах мы считали, что холл-фактор тяжелых дырок  $A_2 = 1$ , а холл-фактор легких дырок  $A_1$  был подгоночным параметром, определяемым из наилучшего согласия расчетных температурных зависимостей термоэдс и коэффициента Холла с экспериментальными данными. Подобный расчет был выполнен для кристалла PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> с минимальной концентрацией дырок. Результат расчета приведен на рис. 3 (штриховая линия 4). Как видно из рис. 3, изменение холл-фактора от 1 при 77 К (межзонного рассеяния еще нет) до 1.5 при 300 К позволяет согласовать результаты расчетов с экспериментом. Таким образом, в нашей модели рост коэффициента Холла с температурой обусловлен не только перераспределением дырок между двумя зонами, но и увеличением холл-фактора. Это привело к необходимости корректировки полученных ранее значений параметров дополнительного экстремума. Наилучшее согласие расчетов с экспериментальными данными по термоэдс в диапазоне температур 77-300 К (штриховая линия 4 и точки на рис. 3) достигается при следующих значениях параметров зонной структуры PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>:  $m_{d1} \approx 0.5 m_0$ ,  $m_{d2} \approx 0.9 m_0$ . Энергетический зазор  $\Delta E_v$  уменьшается при увеличении температуры в соответствии с соотношением  $\Delta E_v(T) \approx 0.23 - 4.5 \cdot 10^{-2} (T/100 - 1)$  эВ (см. рис. 5), отношение подвижностей легких и тяжелых дырок  $b \approx 4$ .



**Рис. 5.** Качественное изменение энергетического спектра и положения химического потенциала с температурой в  $PbSb_2Te_4$ .  $\mu_1=\mu;~\mu_2=\mu-\Delta E_v$ .

#### 6. Заключение

Выполненный анализ температурных зависимостей удельной электропроводности и коэффициентов Холла, Зеебека и Нернста—Эттингсгаузена в *p*-PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> подтвердил участие в явлениях переноса разных групп дырок с различающимися эффективными массами и подвижностями и важную роль межзонного рассеяния.

Совместное решение системы уравнений для электропроводности, коэффициентов Холла, Зеебека и Нернста—Эттингсгаузена в двухзонной модели с учетом межзонного рассеяния и уравнения электронейтральности с использованием экспериментальных данных в плоскости скола позволило описать температурные зависимости коэффициентов Холла и термоэдс в диапазоне температур  $77-350~{\rm K}$  и сделать оценки параметров двухзонной модели:  $b\approx 4,~m_{d1}\approx 0.5m_0,~m_{d2}\approx 0.9m_0,~\mu_1\approx 0.22~{\rm 3B},~\Delta E_v(T)\approx 0.23-0.04(T/100-1)~{\rm 3B}.$ 

#### Список литературы

- Л.Е. Шелимова, О.Г. Карпинский, П.П. Константинов, Т.Е. Свечникова, Е.С. Авилов, М.А. Кретова, В.С. Земсков. Перспективные материалы, № 3, 5 (2006).
- [2] Л.Е. Шелимова, О.Г. Карпинский, Т.Е. Свечникова, Е.С. Авилов, М.А. Кретова, В.С. Земсков. Неор. матер., 40 (12), 1440 (2004).
- [3] М.К. Житинская, С.А. Немов, Л.Е. Шелимова, Т.Е. Свечникова, П.П. Константинов. ФТТ, **50**, 8 (2008).
- [4] Б.М. Аскеров. Кинетические эффекты в полупроводниках (Л., Наука, 1970).
- [5] L.E. Shelimova, M.K. Zhitinskaya, S.A. Nemov, T.E. Svechnikova, P.P. Konstantinov, E.S. Avilov, M.A. Kretova, V.S. Zemskov. 5<sup>th</sup> Eur. Conf. on Thermoelectrics (Odessa, Ukraine, 2007).
- [6] Л.Е. Шелимова, О.Г. Карпинский, П.П. Константинов, Т.Е. Свечникова, М.К. Житинская, Е.С. Авилов, М.А. Кретова, В.С. Земсков. Неогр. матер., **43**, (2), 28 (2008).
- [7] С.А. Немов, Н.М. Благих, Н.С. Дёма, М.К. Житинская, В.И. Прошин, Т.Е. Свечникова, Л.Е. Шелимова. ФТП, 46, 463 (2012).
- [8] С.А. Немов, Н.М. Благих, Л.Е. Шелимова. Матер. IV Междунар. науч.-практ. конф. "Инновационные технологии в технике и образовании" (Чита, ЗабГГПУ, 2012) с. 57.
- [9] С.А. Немов, Н.М. Благих, Л.Е. Шелимова. ФТП, **47**, 18 (2013).
- [10] Б.М. Гольцман, З.М. Дашевский, В.И. Кайданов. Пленочные термоэлементы: физика и применение (М., Наука. 1985).
- [11] Л.С. Стильбанс. Физика полупроводников (М., Сов. радио, 1967).
- [12] С.А. Немов, М.К. Житинская, Л.Е. Шелимова, Т.Е. Свечникова. ФТТ, **50**, 1166 (2008).
- [13] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнова. *Методы* исследования полупроводниковых материалов в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe и PbS. (М., Наука, 1968).
- [14] К. Зеегер. Физика полупроводников (М., Мир, 1977).
- [15] Б.А. Ефимова, Л.А. Коломоец. ФТТ, 7, 424 (1965).
- [16] Н.В. Коломоец. ФТТ, 8, 997 (1966).

- [17] В.И. Кайданов, И.А. Черник, Б.А. Ефимова. ФТП, 1, 869 (1967).
- [18] Д.А. Пшенай-Северин, М.И. Федоров. ФТТ, **52**, 1257 (2010).
- [19] П.С. Киреев. Физика полупроводников: учебное пособие для втузов (М., Высш. шк. 1975).
- [20] С.А. Немов, Ю.И. Равич. УФН, 168, 817 (1998).
- [21] Л.В. Прокофьева, А.А. Шабалдин, В.А. Корчагин, С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП, 42, 1180 (2008).

Редактор Т.А. Полянская

# Influence on interband scattering phenomena in the *p*-PbSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>

S.A. Nemov\*+, N.M. Blagikh\*, M.B. Dzhafarov\*

- \* Saint Petersburg State Polytechnical University, 195251 St. Petersburg, Russia
- <sup>+</sup> Zabaykalsky State University, 672039 Chita, Russia
- Azerbaydzhansky Technological University, Az-2011 Ganja, Azerbaijan

**Abstract** Experimental data on the transport phenomena in p-PbSb $_2$ Te $_4$  qualitatively and quantitatively explained in the two-band model with interband scattering in the temperature range 77–300 K. The parameters of the two-band model: effective mass density of states of light and heavy holes  $m_{d1} \approx 0.5 m_0$ ,  $m_{d2} \approx 0.9 m_0$  ( $m_0$  — the free electron mass), the energy gap between nonequivalent extremes  $\Delta E_v(T) \approx 0.23-4.5 \cdot 10^{-2} (T/100-1) \, \text{eV}$ .