

03

Влияние межзонного рассеяния на кинетические коэффициенты и оценки параметров зонного спектра Sb_2Te_3

© С.А. Немов^{1–3}, Н.М. Благих⁴, Л.Д. Иванова⁵

¹ Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, Санкт-Петербург, Россия

² Забайкальский государственный университет, Чита, Россия

³ Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“, Санкт-Петербург, Россия

⁴ ООО „Атлантис“, Санкт-Петербург, Россия

⁵ Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

E-mail: nemov_s@mail.ru

(Поступила в Редакцию 6 марта 2014 г.)

Показано, что неопределенности в интерпретации экспериментальных данных по явлениям переноса в Sb_2Te_3 преодолеваются в двухзонной модели при последовательном учете межзонного рассеяния дырок. Выполненный расчет количественно согласуется с экспериментальными данными в диапазоне температур 77–400 К при следующих значениях параметров зонного спектра: эффективной массы плотности состояний легких дырок $m_{d1} \approx 0.6 m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), тяжелых дырок $m_{d2} \approx 1.8 m_0$, энергетическом зазоре между неэквивалентными экстремумами валентной зоны $\Delta E_v(T) \approx 0.15–2.5 \cdot 10^{-4} \cdot T$ eV.

1. Введение

Теллуриды висмута и сурьмы являются основными компонентами термоэлектрических материалов, используемых в термоэлектрических преобразователях энергии, работающих в диапазоне температур 300–600 К.

Bi_2Te_3 изучен более подробно. Это связано с тем, что варьированием отклонения от стехиометрического состава и параметров технологии удается получить образцы n - и p -типа с концентрациями носителей тока до $1.2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [1].

Электронные свойства Sb_2Te_3 менее изучены. Дело в том, что теллурид сурьмы кристаллизуется с отклонением от стехиометрического состава в сторону избытка Sb. Образуются собственные дефекты акцепторного типа (предположительно антиструктурные, когда часть избыточных атомов Sb занимают места теллура Sb_{Te}). В итоге кристаллы Sb_2Te_3 имеют большую концентрацию дырок $p \sim 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ [2]. Варьированием состава и легированием Sb_2Te_3 удается изменять концентрацию дырок в узком интервале $(0.8–1.2) \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ [3], уровень Ферми μ при этом мало изменяется. Значительная анизотропия электрофизических свойств кристаллов Sb_2Te_3 (кристаллическая решетка относится к ромбоэдрической сингонии, точечная группа D_3^d) также затрудняет исследование зонной структуры и механизмов рассеяния носителей тока.

Имеющаяся совокупность экспериментальных данных по электронным свойствам теллурида сурьмы неоднозначна. Часть экспериментальных данных находит объяснение в рамках шестизеллипсоидной однозонной модели валентной зоны (как и в Bi_2Te_3 [1]). Вместе с тем

имеются данные, свидетельствующие о сложном строении валентной зоны Sb_2Te_3 . В частности, неоднозначна картина явлений переноса. Температурные зависимости электропроводности $\sigma(T)$ и термоэдс $S(T)$ не имеют особенностей и имеют вид, характерный для участия в кинетических явлениях одного сорта носителей тока. Коэффициент Нернста–Эттингсгаузена $Q(T)$ также не имеет ярко выраженных аномалий. Температурные зависимости σ , S , Q качественно объясняются в однозонной модели [4]. Попытки количественного описания кинетических явлений, в том числе слабополюсных гальваномагнитных и термомагнитных эффектов [5], наталкиваются на трудности. Для их преодоления предлагается использовать представления либо о непараболичности зонного спектра дырок [5], либо о сложном строении валентной зоны, характеризующейся наличием двух экстремумов с различными эффективными массами и подвижностями (например, [3,6,7]).

В настоящей работе показано, что имеющиеся неопределенности в интерпретации экспериментальных данных по кинетическим явлениям в Sb_2Te_3 удается разрешить, если последовательно использовать двухзонную модель и межзонное рассеяние дырок.

2. Эксперимент

В настоящей работе выполнены исследования температурных зависимостей удельной электропроводности, термоэдс, коэффициентов Холла и Нернста–Эттингсгаузена и их анизотропии на монокристалле Sb_2Te_3 , выращенном методом Чохральского [7], в диапазоне

температур 77–450 К. Кристалл имеет холловскую концентрацию дырок $p_H \approx 8.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, определенную из большей компоненты тензора Холла R_{321} (см. рис. 1) при температуре $T = 77 \text{ K}$ по формуле

$$p_H = (eR_{321}(77 \text{ K}))^{-1}. \quad (1)$$

Оси OX_1, OX_2 расположены в плоскости скола кристалла, а ось OX_3 направлена вдоль тригональной оси c_3 .

Полученные нами температурные зависимости удельной электропроводности (σ_{11}, σ_{33}), коэффициентов Зеебека (S_{11}, S_{33}), Холла (R_{123}, R_{321}) и Нернста–Эттингсгаузена ($Q_{123}, Q_{132}, Q_{321}$) подобны опубликованным в работах [6,7], поэтому весь набор исследованных кинетических коэффициентов мы не приводим. Данные по коэффициенту Холла и отношению коэффициента термоэдс к температуре (S_{kk}/T), а также эффекту Нернста–Эттингсгаузена и их анизотропии приведены на рис. 1–3.

3. Качественный анализ экспериментальных данных

Прежде всего отметим, что высокая концентрация дырок $p \sim 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ в кристалле Sb_2Te_3 позволяет использовать формулы для вырожденной статистики.

Обсуждение экспериментальных данных начнем с поперечного эффекта Нернста–Эттингсгаузена. Как известно, в однозонной модели в случае сильного вырождения коэффициент Нернста–Эттингсгаузена имеет вид

$$Q_{ikl} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} (R_{ikl} \sigma_{kk}) \left. \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu}, \quad (2)$$

где μ — химический потенциал (уровень Ферми при низкой температуре в случае вырожденной статистики), T — абсолютная температура, k_0 — постоянная Больцмана, $R\sigma$ — холловская подвижность носителей тока, τ — время релаксации, ε — энергия носителей тока.

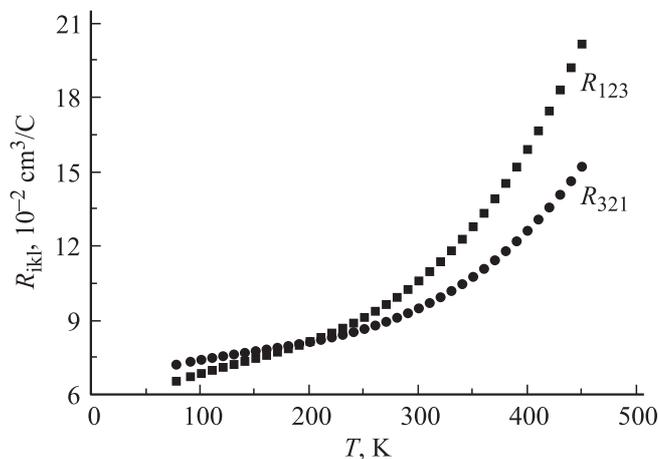


Рис. 1. Температурные зависимости компонент тензора Холла R_{ikl} в Sb_2Te_3 .

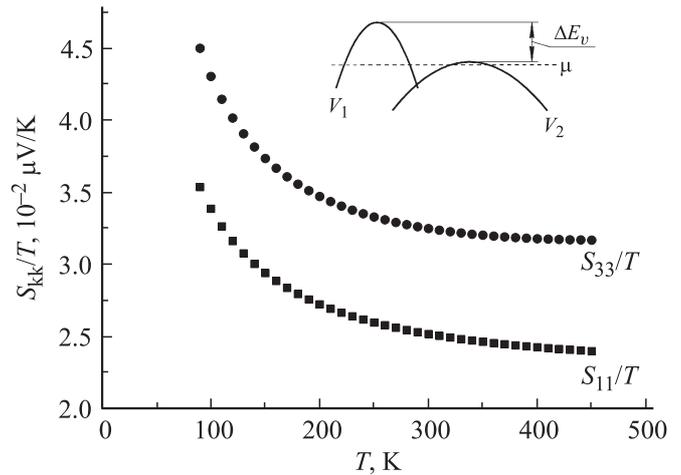


Рис. 2. Температурные зависимости отношения коэффициента термоэдс к температуре S_{kk}/T в Sb_2Te_3 в плоскости скола (S_{11}/T) и вдоль тригональной оси (S_{33}/T). На вставке картина структуры валентной зоны: V_1, V_2 — экстремумы основных и дополнительных носителей тока, отделенных зазором ΔE_v , μ — химический потенциал.

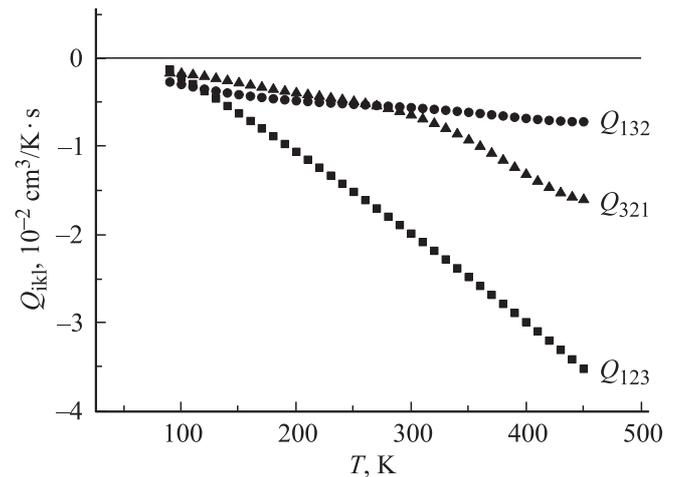


Рис. 3. Температурные зависимости независимых компонент тензора Нернста–Эттингсгаузена Q_{ikl} в Sb_2Te_3 .

Для основных механизмов рассеяния носителей тока время релаксации описывается степенной функцией энергии

$$\tau \sim \varepsilon^{r-1/2}, \quad (3)$$

где r — параметр рассеяния, равный 0 для рассеяния на акустических фононах и 2 для примесного рассеяния.

Как видно из рис. 3, все три независимые компоненты тензора коэффициента Нернста–Эттингсгаузена Q_{ikl} отрицательны в исследованном температурном интервале. В соответствии с формулой (2) это означает, что вдоль всех направлений в кристалле Sb_2Te_3 доминирует рассеяние с параметром $r < 0.5$. Обычно отрицательный знак Q_{ikl} свидетельствует о доминирующем механизме рассеяния на акустических фононах ($r = 0$), поскольку

у других стандартных механизмов рассеяния параметр рассеяния $r \geq 0.5$ [8].

Существенной особенностью кристаллов Sb_2Te_3 является значительная анизотропия термоэдс. Это достаточно редкое явление и для его наблюдения требуются специальные условия. Наиболее вероятными причинами возникновения анизотропии термоэдс являются смешанный механизм рассеяния (обычно это рассеяние на акустических фононах и примесное рассеяние), характеризующийся разными вкладами в рассеяние вдоль различных кристаллографических направлений с разной анизотропией, или участие в явлениях переноса двух типов носителей тока с различной анизотропией подвижностей [9].

Рассмотрим возможные причины возникновения анизотропии термоэдс применительно к Sb_2Te_3 . В случае сильного вырождения коэффициент термоэдс определяется выражением

$$S_{kk} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} (r_{kk}^{\text{eff}} + 1). \quad (4)$$

В случае смешанного механизма рассеяния и вырожденной статистики вводится эффективный параметр рассеяния r_{kk}^{eff} соотношением

$$r_{kk}^{\text{eff}} = \left. \frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} + 0.5. \quad (5)$$

Анизотропия термоэдс определяется разностью параметров рассеяния вдоль тригональной оси (r_{33}) и в плоскости скола (r_{11})

$$\Delta S = S_{33} - S_{11} = \frac{k_0}{e} \frac{\pi^2}{3} \frac{k_0 T}{\mu} (r_{33}^{\text{eff}} - r_{11}^{\text{eff}}). \quad (6)$$

Из данных по эффекту Нернста–Эттингсгаузена следует, что при низких температурах ($T \approx 100$ К) все три независимые компоненты тензора Нернста–Эттингсгаузена $Q_{ikl} < 0$ в диапазоне температур 77–450 К имеют близкие, малые по модулю значения, и поэтому малые значения параметров рассеяния r_{kk}^{eff} вдоль разных направлений в кристалле. Эти результаты свидетельствуют в пользу того, что смешанный механизм рассеяния дырок на акустических фононах и ионах примеси не сможет качественно объяснить наблюдаемую значительную величину анизотропии термоэдс в Sb_2Te_3 и ее температурную зависимость, поскольку с ростом температуры роль акустического механизма рассеяния возрастает, параметры рассеяния r_{33}^{eff} и r_{11}^{eff} и их разность Δr должны уменьшаться и стремиться к нулю. ΔS в соответствии с формулой (6) также должна уменьшаться в противоречии с экспериментом.

Таким образом, не исключая полностью смешанного механизма рассеяния дырок, для объяснения анизотропии термоэдс и ее температурной зависимости в Sb_2Te_3 необходимо предположить, что в явлениях переноса участвуют носители с разными подвижностями (например, легкие и тяжелые дырки), характеризующимися

различной анизотропией вдоль тригональной оси c_3 и в плоскости скола кристаллов. Характер температурных зависимостей отношения S_{ii}/T (рис. 2) также свидетельствует в пользу сложного строения валентной зоны (см. подробнее в работе [10]).

4. Межзонное рассеяние

Из комбинации четырех основных кинетических коэффициентов (σ, S, R, Q) были сделаны оценки эффективных параметров рассеяния r_{ikl}^{eff} вдоль различных направлений в кристалле Sb_2Te_3 с помощью соотношения, следующего из формул (2), (4), (5) [1]:

$$\frac{Q_{ikl}}{R_{ikl} S_{kk} \sigma_{kk}} = \frac{r_{ikl}^{\text{eff}} - 0.5}{r_{ikl}^{\text{eff}} + 1}. \quad (7)$$

Найденные по формуле (7) величины r_{ikl}^{eff} приведены на рис. 4, из которого видно, что все три коэффициента r_{ikl}^{eff} при низких температурах ($T < 200$ К) положительны (при отрицательном значении всех компонент тензора коэффициента Нернста–Эттингсгаузена Q_{ikl}) и быстро уменьшаются при увеличении температуры от 80 до 450 К, причем два из них даже изменяют знак на отрицательный. Полученные результаты, на наш взгляд, свидетельствуют о существенном вкладе нового эффективного механизма рассеяния дырок с сильной, убывающей с ростом ε энергетической зависимостью времени релаксации $\tau(\varepsilon)$ и об участии в явлениях переноса по крайней мере еще одного сорта дырок. Таким вероятным механизмом рассеяния носителей тока в двухзонной модели является межзонное рассеяние [11].

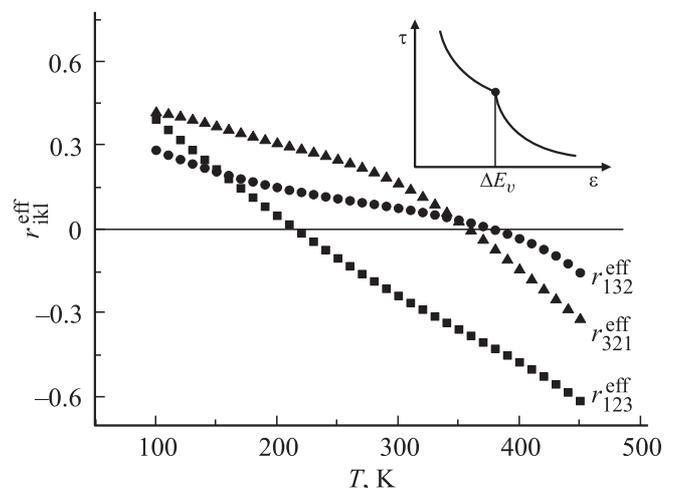


Рис. 4. Температурные зависимости эффективных параметров рассеяния r_{ikl}^{eff} в Sb_2Te_3 . На вставке изображен качественный вид энергетической зависимости времени релаксации легких дырок с учетом межзонного рассеяния.

5. Модель и основные формулы

Выполненный ранее анализ экспериментальных данных показал, что наиболее вероятной моделью строения валентной зоны Sb_2Te_3 , на наш взгляд, является двухзонная модель, предложенная Миддендорфом и др. [3], с двумя неэквивалентными экстремумами с различными эффективными массами плотности состояния дырок и энергетическим зазором между ними ΔE_v .

В двухзонной модели кинетические коэффициенты электропроводности, термоэдс, Холла и поперечного эффекта Нернста–Эттингсгаузена определяются вкладом дырок из обоих экстремумов в соответствии с выражениями [1,8]

$$\begin{cases} \sigma = \sigma_1 + \sigma_2, \\ S = \frac{\sigma_1}{\sigma} S_1 + \frac{\sigma_2}{\sigma} S_2, \\ R = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma}\right)^2 R_1 + \left(\frac{\sigma_2}{\sigma}\right)^2 R_2, \\ Q = \frac{\sigma_1}{\sigma} Q_1 + \frac{\sigma_2}{\sigma} Q_2 + \frac{\sigma_1 \sigma_2}{\sigma} (S_1 - S_2)(u_1 - u_2), \end{cases} \quad (8)$$

где индексы 1 и 2 обозначают соответствующие парциальные кинетические коэффициенты обоих экстремумов, u_1 и u_2 — холловские подвижности дырок в первом и во втором экстремумах соответственно.

Все парциальные кинетические коэффициенты в случае степенной зависимости времени релаксации (τ) от энергии (ε) (см. формулу (3)) выражаются через интегралы Ферми с индексом n :

$$F_n(\mu^*) = \int_0^\infty f_0(x, \mu^*) x^n dx, \quad (9)$$

где f_0 — равновесная функция распределения Ферми–Дирака, $x = \varepsilon/k_0T$.

Температурные зависимости всех исследованных кинетических коэффициентов в диапазоне температур 77–450 К не имеют особенностей, свидетельствующих об изменении полной концентрации дырок в Sb_2Te_3 . С ростом температуры наблюдается только перераспределение дырок между основным и дополнительным экстремумами валентной зоны

$$p = p_1(T) + p_2(T) = \text{const}. \quad (10)$$

Парциальные концентрации дырок p_1 и p_2 в общем случае выражаются через интеграл Ферми $F_{1/2}$ (9) (см., например, [8])

$$p_k = \frac{4\pi}{h^3} (m_{dk} \cdot k_0T)^{3/2} F_{1/2}(\mu_k^*), \quad (11)$$

где $k = 1, 2$, m_{dk} — масса плотности состояния в первом или втором экстремуме валентной зоны, $\mu_k^* = \mu_k/k_0T$, μ_k — химический потенциал, отсчитанный от вершины основного (первого) или дополнительного (второго) экстремума ($\mu_2^* = \mu_1^* - \Delta E_v^*$) (шкала энергий дырок).

Формулы кинетических коэффициентов в двухзонной модели (8) для практических расчетов удобнее выразить через отношения концентраций дырок $\eta = p_1/p_2$ и их подвижностей $b = u_1/u_2$

$$1 = \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right) + \left(\frac{1}{1+\eta b}\right), \quad (12)$$

$$S = S_1 \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right) + S_2 \left(\frac{1}{1+\eta b}\right), \quad (13)$$

$$R = R_1 \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right)^2 + R_2 \left(\frac{1}{1+\eta b}\right)^2, \quad (14)$$

$$Q = Q_1 \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right) + Q_2 \left(\frac{1}{1+\eta b}\right) + Q_{12} \left(\frac{\eta b}{(1+\eta b)^2}\right). \quad (15)$$

Коэффициент Холла в относительных единицах равен

$$\begin{aligned} \frac{R}{R_0} = & \left(1 + \frac{A_1/A_2}{\eta}\right) \left(\frac{\eta b}{1+\eta b}\right)^2 \\ & + \left(1 + \frac{\eta}{A_1/A_2}\right) \left(\frac{1}{1+\eta b}\right)^2, \end{aligned} \quad (16)$$

где R_0 — низкотемпературное значение, полученное экстраполяцией зависимости $R(T)$ к нулевой температуре, A_1 и A_2 — Холл-факторы для носителей в первом и втором экстремумах.

Величина отношения подвижностей $b = u_1/u_2$ может быть определена из максимального значения коэффициента Холла R_{max} , который отвечает условию $\sigma_1 = \sigma_2$ или эквивалентному ему соотношению $\eta b = 1$, по формуле

$$\frac{R_{\text{max}}}{R_0} = \frac{(b+1)^2}{4b}. \quad (17)$$

При известных величинах факторов Холла, а также величине b , используя выражения (16) и (10), рассчитаны температурные зависимости $\eta(T)$ и концентрации дырок в первом p_1 и втором p_2 экстремумах соответственно. Следует отметить, что при расположении уровня Ферми (μ) вблизи дополнительного экстремума ($\mu \approx \Delta E_v$) должно наблюдаться межзонное рассеяние, обусловленное переходами электронов между неэквивалентными экстремумами с сильной энергетической зависимостью времени релаксации $\tau(\varepsilon)$ при энергии носителей вблизи $\varepsilon = \Delta E_v$ (см. вставку к рис. 4). В этом случае использование приближения Зоммерфельда некорректно и холл-фактор $A_1 = \langle \tau_1^2 \rangle / \langle \tau_1 \rangle^2$ [12] может быть не равен единице. Угловые скобки $\langle \tau \rangle$ обозначают усреднение, описываемое формулой

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) \varepsilon^{3/2} d\varepsilon}, \quad (18)$$

которое для носителей в первой зоне в общем случае может заметно отличаться от 1 даже для сильно вырожденного газа носителей тока, как это показано в работе [13] в случае резонансного рассеяния дырок в полосу квазилокальных примесных состояний таллия

(расположенную на фоне разрешенного спектра валентной зоны) в РbTe:Тl [14].

Термоэдс для дырок в первом и втором экстремумах рассчитывалась по формулам [15]

$$S_1 = \frac{k_0}{e} \left(\frac{I_1(\mu_1^*)}{I_0(\mu_1^*)} - \mu_1^* \right), \quad (19)$$

$$S_2 = \frac{k_0}{e} \left(\frac{I_1(\mu_1^* - \Delta E_v^*)}{I_0(\mu_1^* - \Delta E_v^*)} - (\mu_1^* - \Delta E_v^*) \right), \quad (20)$$

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

$$I_i(\mu^*) = \int_0^\infty - \left(\frac{\partial}{\partial x} (1 + e^{(x-\mu^*)})^{-1} \right) \tau^*(x) x^{i+3/2} dx, \quad (21)$$

где $i = 0, 1$, $\tau^*(x) = \tau(x)/\tau_0$.

Время релаксации при межзонном рассеянии, согласно работам [11,15], описывается выражением

$$\tau^{-1} = \tau_0^{-1} \begin{cases} \sqrt{x}, & x < \Delta E_v^* \\ \sqrt{x} + w_{12} \sqrt{x - \Delta E_v^*}, & x > \Delta E_v^* \end{cases} \quad (22)$$

где τ_0 — постоянный коэффициент в выражении для времени релаксации, $w_{12} = (m_{d2}/m_{d1})^{3/2} (\Xi_{12}/\Xi_{11})^2$ — параметр, характеризующий вероятность межзонного перехода, Ξ_{11} , Ξ_{12} — константы деформационного потенциала для случаев внутризонного и межзонного рассеяния носителей тока.

6. Результаты расчетов и их обсуждение

Миддендорфом и др. [3] на кристаллах соединения Sb_2Te_3 с холловской концентрацией носителей около $1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ из данных по квантовым осцилляциям Шубникова—де-Гааза определена эффективная масса плотности состояний дырок в одном эллипсоиде в основном экстремуме валентной зоны

$$m_{d1_{\text{ell}}} \approx 0.18m_0. \quad (23)$$

В работе [16] показано, что основной экстремум валентной зоны Sb_2Te_3 описывается шестиэллипсоидной моделью (J.R. Drabble, R. Wolfe), поэтому полная эффективная масса плотности состояний, описываемая формулой

$$m_{d1} = N^{2/3} m_{d1_{\text{ell}}}, \quad (24)$$

где N — число эквивалентных долин (6 в модели Дребла—Вульфа), оказывается равной $m_{d1} \approx 0.6m_0$. Это значение эффективной массы мы использовали в дальнейших расчетах. Другие необходимые для расчетов параметры оценивались следующим образом.

Согласно [17], коэффициент Холла достигает максимального значения $R_{\text{max}}/R_0 \approx 4$ вблизи 600 К, что соответствует отношению подвижностей $b \approx 14$ (см. формулу (17)) и эффективной массе плотности состояний

в дополнительном экстремуме $m_{d2} \approx 1.8m_0$, которая оценивалась по формуле [2]:

$$b \approx \left(\frac{m_{d2}}{m_{d1}} \right)^{\frac{5}{2}}, \quad (25)$$

справедливой в предположении, что при высоких температурах доминирует акустический механизм рассеяния и легких и тяжелых дырок.

Следует отметить, что изменение величины b в интервале от 10 до 15 не приводит к существенным изменениям величины η и ее температурной зависимости, рассчитываемой из температурной зависимости $R(T)/R_0$ по формуле (16). Используя этот факт, мы сделали допущение, что отношение подвижностей дырок в неэквивалентных экстремумах валентной зоны не зависит от температуры в исследованном нами температурном диапазоне (77–450 К) и его величина равна ранее найденной по формуле (17) из отношения R_{max}/R_0 .

Температурные зависимости химических потенциалов для дырок из первого и второго экстремума рассчитывались из найденных температурных зависимостей соответствующих концентраций дырок $p_1(T)$ и $p_2(T)$ с использованием ранее оцененных величин эффективных масс плотности состояний.

Обычно в двухзонной модели величины факторов Холла, входящие в выражение (16), предполагаются равными единице ($A_1 = A_2 = 1$). Отметим, что в этом приближении даже при учете межзонного рассеяния расчетную температурную зависимость термоэдс не удается согласовать с экспериментальной. Одной из возможных причин такого расхождения, как отмечалось выше, может быть отличие величины фактора Холла от единицы из-за расположения μ_1 вблизи вершины дополнительного экстремума (см. вставку на рис. 2). Однако недостаток знаний о картине механизмов рассеяния и соответствующих величинах времен релаксации

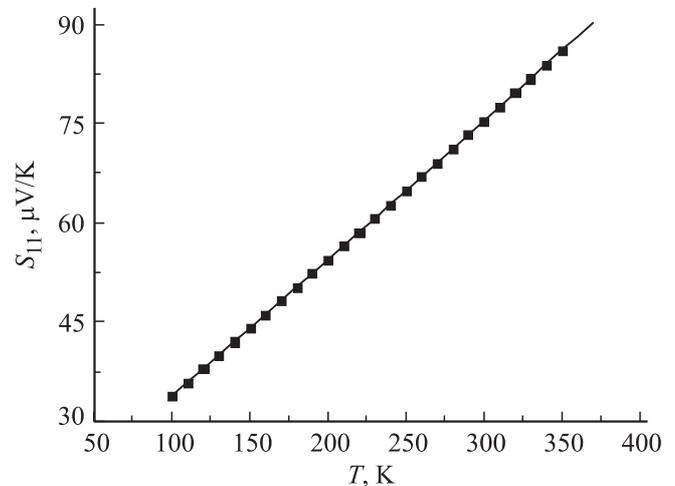


Рис. 5. Температурная зависимость компоненты термоэдс в плоскости скола S_{11} в Sb_2Te_3 . Точки — эксперимент, линия — расчет.

не позволяет корректно выполнить расчет величин A_1 и A_2 . Поэтому мы считали отношение A_1/A_2 подгоночным параметром, определяемым из наилучшего согласия расчетных температурных зависимостей термоэдс и коэффициента Холла с экспериментальными данными.

Выполненный согласованный расчет температурных зависимостей коэффициентов Холла и Зеебека (рис. 5) по представленным выше формулам показал, что наилучшее согласие расчетных зависимостей с экспериментальными наблюдается при следующих параметрах: $m_{d1} \approx 0.6 m_0$, $m_{d2} \approx 1.8 m_0$, $b \approx 14$, μ_1 (100 К) ≈ 0.13 eV. Ширина энергетического зазора между первым и вторым экстремумом уменьшается с ростом температуры в первом приближении линейно: $\Delta E_v(T) \approx 0.15 - 2.5 \cdot 10^{-4} \cdot T$ eV.

7. Заключение

Показано, что для объяснения особенностей температурных зависимостей электропроводности, коэффициентов Холла, Зеебека и Нернста–Эттингсгаузена в Sb_2Te_3 необходимо учитывать сложное строение валентной зоны, участие в явлениях переноса дырок с разными эффективными массами и подвижностями, а также межзонное рассеяние дырок. Последовательный учет межзонного рассеяния дырок позволяет уточнить параметры зонного спектра и описать в согласии с экспериментом температурные зависимости коэффициентов Холла и термоэдс в диапазоне температур 77–400 К. Наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных зависимостей наблюдается при следующих значениях параметров зонного спектра: эффективная масса плотности состояний легких дырок $m_{d1} \approx 0.6 m_0$, тяжелых дырок $m_{d2} \approx 1.8 m_0$, энергетический зазор между неэквивалентными экстремумами валентной зоны $\Delta E_v(T) \approx 0.15 - 2.5 \cdot 10^{-4} \cdot T$ eV.

Список литературы

- [1] Б.М. Гольцман, З.М. Дашевский, В.И. Кайданов. Пленочные термоэлементы: физика и применение. Наука, М. (1985). 232 с.
- [2] Л.Д. Иванова, Ю.В. Гранаткина, Ю.А. Сидоров. Неорганические материалы **35**, 44 (1999).
- [3] A. von Middendorff, K. Dietrich, G. Landwehr. Solid State Commun. **13**, 443 (1973).
- [4] И.В. Гасенкова, М.К. Житинская, С.А. Немов, Л.Д. Иванова. ФТТ **44**, 1766 (2002).
- [5] M. Stordeur. Phys. Status Solidi (B) **124**, 79 (1984).
- [6] М.К. Житинская, С.А. Немов, Л.Д. Иванова. ФТТ **44**, 41 (2002).
- [7] С.А. Немов, Г.Л. Тарангасов, В.И. Прошин, М.К. Житинская, Л.Д. Иванова, Ю.В. Гранаткина. ФТП **43**, 1629 (2009).
- [8] Л.С. Сильбанс. Физика полупроводников Сов. радио, М. (1967) 451 с.
- [9] А.Г. Самойлович. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. Изд-во ЛКИ, М. (2007) 224 с.
- [10] С.А. Немов, Н.М. Благих, Л.Е. Шелимова. ФТП **47**, 18 (2013).
- [11] Н.В. Коломоец. ФТТ **8**, 997 (1966).
- [12] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. Методы исследования полупроводниковых материалов в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe и PbS. Наука, М. (1968) 383 с.
- [13] Л.В. Прокофьева, А.А. Шабалдин, В.А. Корчагин, С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП **42**, 1180 (2008).
- [14] С.А. Немов, Ю.И. Равич. УФН **168**, 817 (1998).
- [15] Д.А. Пшеннай-Северин, М.И. Федоров. ФТТ **52**, 1257 (2010).
- [16] V.A. Kulbachinskii, Z.M. Dashevskii, M. Inoue, M. Sasaki, H. Negishi, W.X. Gao, P. Lostak, J. Horak, A. de Visser. Phys. Rev. B **52**, 10915 (1995).
- [17] А.А. Андреев, И.А. Смирнов, В.А. Кутасов. ФТТ **10**, 1728 (1968).