Физика и техника полупроводников, 2016, том 50, вып. 8

Температурная зависимость коэффициента Холла в системе $Bi_{1-x}Sb_x$ $(x = 0.06,\ 0.12)$

© Б.А. Таиров, Х.А. Гасанова, Р.И. Селим-заде

Институт физики им. Г.М. Абдуллаева Национальной академии наук Азербайджана,
Az-1143 Баку, Азербайджан

E-mail: btairov@physics.ab.az

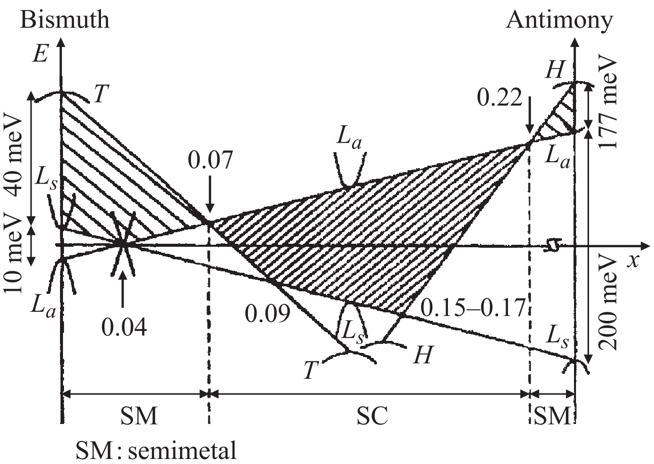
(Получена 1 декабря 2015 г. Принята к печати 17 декабря 2015 г.)

На основе количественных расчетов зависимости коэффициента Холла в $Bi_{1-x}Sb_x$ $(x = 0.06,\ 0.12)$ в интервале температур 77–300 K определены температурные зависимости уровня Ферми, концентраций носителей заряда и отношение их эффективных масс.

1. Введение

Как известно, сплав $Bi_{1-x}Sb_x$ относится к системе полупроводников с инверсией зон типа „полуметалл–полупроводник“. С ростом содержания Sb происходит сближение зон Ls и La. На рис. 1 представлена схема перестройки энергетического спектра носителей заряда в $Bi_{1-x}Sb_x$ [1]. Как видно, в зависимости от содержания Sb меняется энергетический зазор между L-зоной электронов и T-зоной тяжелых дырок. В свою очередь это приводит к изменению эффективных масс носителей заряда, а также к изменению количества сортов носителей заряда: при $x = 0.06$ (полуметаллическая фаза) — тяжелые и легкие дырки, электроны; при $x = 0.12$ (полупроводниковая фаза) — электроны и дырки. Изменение положения уровня Ферми, энергетических зазоров между соответствующими зонами должно естественным образом сказаться на поведении кинетических коэффициентов. В этой статье проведен количественный анализ температурной зависимости коэффициента Холла в системе $Bi_{1-x}Sb_x$ $(x = 0,06,\ 0,12)$ в интервале температур $T = 77{-}300$ K. Исследования гальваномагнитных свойств проводились на монокристаллических образцах антимонида висмута. Известно, что эта система обладает сильной анизотропией, поэтому измерения коэффициента Холла проводились в двух кристаллографических направлениях: измерялись R_{123} и R_{231}. Количественный анализ проводился на усредненных значениях коэффициента Холла согласно

$$R_{\mathrm{av}} = \frac{1}{3}\,(2R_{231} + R_{123}).$$



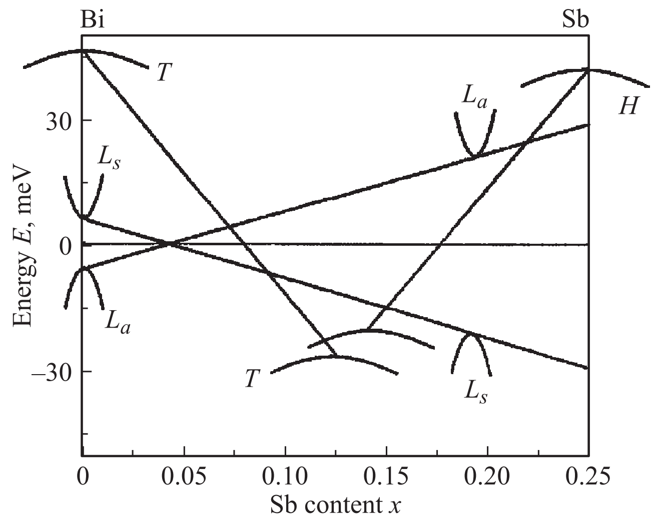


Рис. 1. Схема расположения зон в сплаве $Bi_{1-x}Sb_x$ [1].

2. Методика расчета

Как известно, коэффициент Холла в слабых магнитных полях в случае двух сортов носителей определяется следующим выражением:

$$R = \frac{R_1\sigma_1^2 - R_2\sigma_2^2}{(\sigma_1+\sigma_2)^2} = R_1\frac{R_2\sigma_2^2/R_1\sigma_1^2 + 1}{(\sigma_2/\sigma_1 + 1)^2}$$

$$= \frac{A_1}{en_1}\,\frac{(A_2n_1/A_1n_2)(n_2^2\mu_2^2/n_1^2\mu_1^2) + 1}{(n_2\mu_2)/n_1\mu_1 + 1)^2}$$

$$= \frac{A_1}{en_1}\,\frac{(A_2/A_1)(n_2/n_1)(\mu_2^2/\mu_1^2) + 1}{(n_2\mu_2/n_1\mu_1 + 1)^2}. \qquad (1)$$

Здесь $R = A/en$ — парциальный коэффициент Холла одного типа носителей, $\sigma = en\mu$ — соответствующий парциальный вклад в электропроводность, n — концентрация носителей заряда, μ — подвижность носителей заряда,

$$A = \frac{I^0_{3/2} I^0_{2r+1/2,4}}{(I^0_{r+1,2})^2}$$

— холл-фактор носителей заряда,

$$I^m_{n,k}(\eta^*, \beta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\delta f}{\delta x}\right) \frac{x^m(x+\beta^2 x)^n}{(1+2\beta x)^k}\, dx$$

— двухпараметрический интеграл Ферми в представлении [2], η^* — приведенный химический потенциал, $\beta = k_0T/E_g$ — параметр непараболичности, r — параметр рассеяния.

Дальнейшее преобразование (1) произведено в следующих приближениях [2]:

$$n = \frac{(2m_n^* k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} I^0_{3/2,0}, \tag{2}$$

$$\mu = \frac{e\tau_0}{m} \frac{I^0_{r+1,2}}{I^0_{3/2,0}}$$

(τ — время релаксации носителей заряда),

$$\frac{n_1}{n_2} = \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{3/2} \frac{I^0_{3/2,0}(n_1)}{I^0_{3/2,0}(n_2)},$$

$$\frac{\mu_2}{\mu_1} = \frac{\tau_2 m_1}{\tau_1 m_2} \frac{I^0_{r+1,2}(n_2)}{I^0_{3/2,0}(n_2)} \frac{I^0_{3/2,0}(n_1)}{I^0_{r+1,2}(n_1)},$$

$$\frac{\tau_2}{\tau_1} \sim \left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{r-3/2}.$$

Здесь

$$I^m_{n,k}(n_1) = I^m_{n,k}(\eta^*, \beta) \quad \text{(электроны)},$$

$$I^m_{n,k}(n_2) = I^m_{n,k}(-\eta^* - \Delta, \beta) \quad \text{(дырки)}, \qquad \Delta = \frac{E_g}{(k_0 T)}. \tag{3}$$

Окончательное выражение для коэффициента Холла имеет вид

$$R = \frac{1}{en} \frac{I^0_{3/2,0}(n_1) I^0_{2r+1/2,4}(n_1)}{[I^0_{r+1,2}(n_1)]^2} \times \frac{(m_2/m_1)^{2r-7/2}\left[I^0_{2r+1/2,4}(n_2)/I^0_{2r+1/2,4}(n_1)+1\right]}{\left\{(m_2/m_1)^{r-1}\left[I^0_{r+1,2}(n_2)/I^0_{r+1,2}(n_1)+1\right]\right\}^2}.$$

С учетом (2) и (3) получаем для R (в см/Кл):

$$R = \frac{1718.13}{(mT)^{3/2}} \frac{I^0_{2r+1/2,4}(\eta^*,\beta)}{[I^0_{r+1,2(\eta^*,\beta)}]^2} \times \frac{(m_2/m_1)^{2r-7/2}\left[I^0_{2r/+1/2,4}(-\eta^*-\Delta,\beta)/I^0_{2r+1/2,4}(\eta^*,\beta)+1\right]}{\left\{(m_2/m_1)^{r-1}\left[I^0_{r+1,2}(-\eta^*-\Delta,\beta)/I^0_{r+1,2}(\eta^*,\beta)+1\right]\right\}^2}. \tag{4}$$

Таким образом, можно заключить, что для теоретического расчета температурной зависимости коэффициента Холла надо знать температурную зависимость ширины запрещенной зоны E_g, а также изменение приведенного химического потенциала с температурой.

Согласно [3], $Bi_{1-x}Sb_x$ $(x = 0.12)$ является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны $E_{gL} = 0.13$ мэВ при $T = 80$ K и 0.15 мэВ при $T = 20$ K, с эффективной массой плотности состояний электронов $m_d = 0.02m_0$. Тогда температурная зависимость E_g (в мэВ) имеет вид

$$E_{gL} = 15.6 - 0.03T.$$

Величину приведенного химического потенциала можно определить из условия электронейтральности $n = p$:

$$m_1^{3/2} I^0_{3/2,0}(\eta^*, -\beta) = m_2^{3/2} I^0_{3/2,0}(\eta^* - \Delta, -\beta). \tag{5}$$

Известно, что число электронных и дырочных долин в точке L для B$-$Sb равно 3, причем две компоненты тензора масс имеют порядок $0.01m_0$, а третья компонента массы порядка m_0. Для массы плотности состояний получаем $0.046m_0$, причем она линейно зависит от E_{gL}.

Известно, что закон дисперсии для электронов и дырок в точке L непараболичен, поэтому для усредненных по кристаллографическим направлениям кинетических коэффициентов использованы соотношения, полученные на основе неэллипсоидальной непарабалической модели Коэна [4].

С учетом вышеизложенного (число долин 3, эффективные массы электронов и дырок близки по значениям) и в приближении рассеяния носителей на акустических фононах ($r = 0$) выражение (4) для компьютерных расчетов примет вид

$$R = \frac{572.71}{m_d^{3/2} T^{3/2}} \frac{I^0_{1/2,4}(\eta\beta)}{[I^0_{1,2}(\eta,\beta)]^2} \times \left[1 - \gamma^{7/2} \frac{I^0_{1/2,4}(-\eta-\Delta,\beta)}{I^0_{1/2,4}(\eta,\beta)}\right] \left[1 + \gamma \frac{I^0_{1,2}(-\eta-\Delta,\beta)}{I^0_{1,2}(\eta,\beta)}\right]^{-2}, \tag{6}$$

где $\gamma = m_n/m_p$, $\beta = k_0T/E_{gL}$, $\eta = \xi_F/k_0T$ (ξ_F — уровень Ферми).

Решая уравнение электронейтральности (5), находим величину η для каждой температуры. На основе этих данных и выражения (6) была рассчитана температурная зависимость коэффициента Холла $R(T)$.

На рис. 2 представлена температурная зависимость уровня Ферми, на основе которой были рассчитаны температурные зависимости коэффициента Холла (рис. 3), концентрации электронов (рис. 4) и отношения $\gamma = m_n/m_p$ (рис. 5).

На рис. 3 наблюдается хорошее согласие расчета с экспериментальными данными.

Переходя к расчетам температурной зависимости коэффициента Холла в $Bi_{1-x}Sb_x$ $(x = 0.06)$, мы учли, что

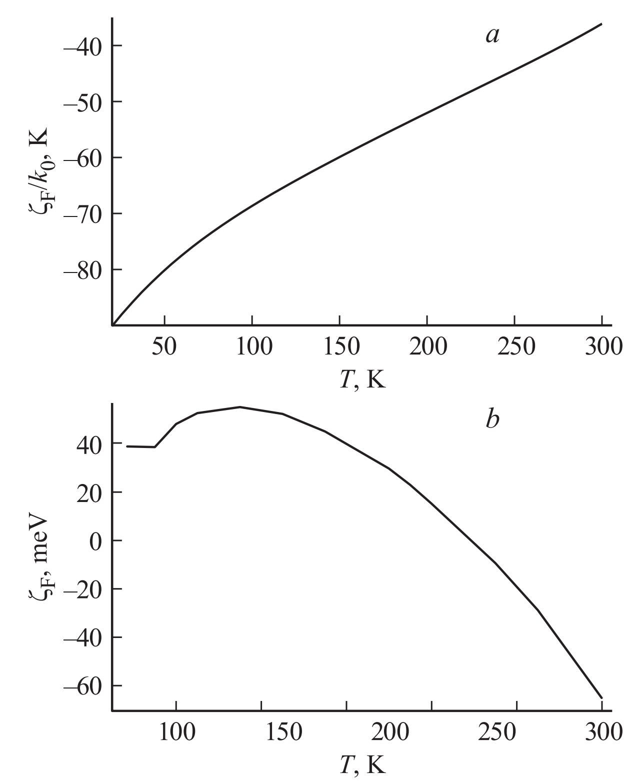


Рис. 2. Температурные зависимости уровня Ферми в $Bi_{1-x}Sb_x$: a — $x = 0.12$ (ξ_F в единицах абсолютной температуры); b — $x = 0.06$.

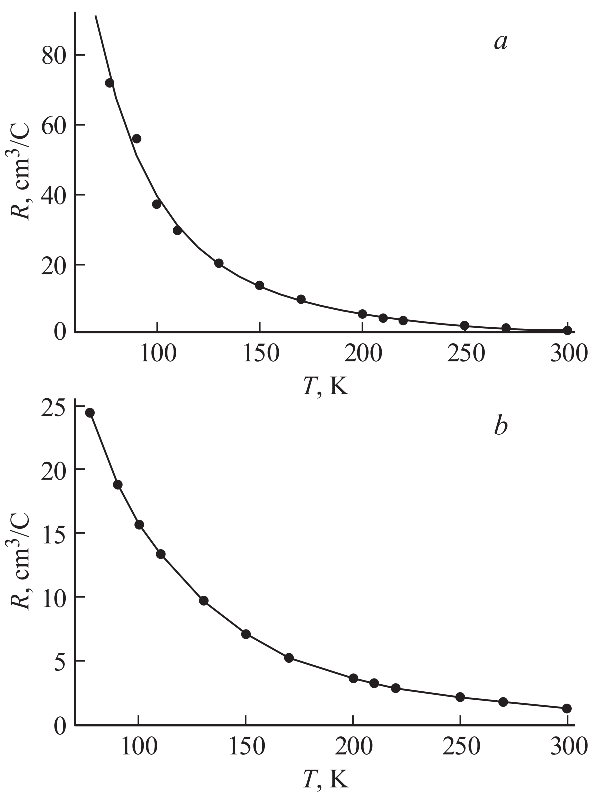


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициента Холла в $Bi_{1-x}Sb_x$: a — $x = 0.12$, b — $x = 0.06$.

проводимость в нем осуществляется двумя сортами дырок (тяжелыми в T-зоне, легкими в L_a-зоне), и легкими электронами (в L_s-зоне). Выражение для коэффициента Холла для трех сортов носителей после преобразований имеет вид

$$R = 1718.13(m_T T)^{-3/2}\Big[3\gamma^{-7/2} I^0_{2r+1/2,4}(\eta,\beta) - I^0_{2r+1/2,4}(-\Delta-\eta,0) - 3\gamma^{-7/2} I^0_{2r+1/2,4}(-\Delta-\eta,\beta)\Big] \times \Big[3\gamma^{-1} I^0_{r+1,2}(\eta,\beta) + I^0_{r+1,2}(-\Delta-\eta,0) + 3\gamma^{-1} I^0_{r+1,2}(-\Delta-\eta,\beta)\Big]^{-2}. \quad (7)$$

Здесь $\beta = k_0T/E_{gL}$, $\Delta = E_{gTL}/k_0T$, E_{gTL} — энергетический зазор между потолком дырочной T-зоны и дном электронной L-зоны, $\gamma = m_L/m_T$ — отношение эффективных масс дырок в L- и T-зонах соответственно.

Эффективные массы электронов и дырок L-зоны предполагаются практически равными, эффективная масса дырок T-зоны принята $m_T = 0.146m_0$ [5,6].

На рис. 6 представлена расчетная зависимость фактора Холла для электронов и дырок (они практически совпадают). Такое резкое изменение этого параметра с температурой обусловлено сильной непараболичностью зон [7].

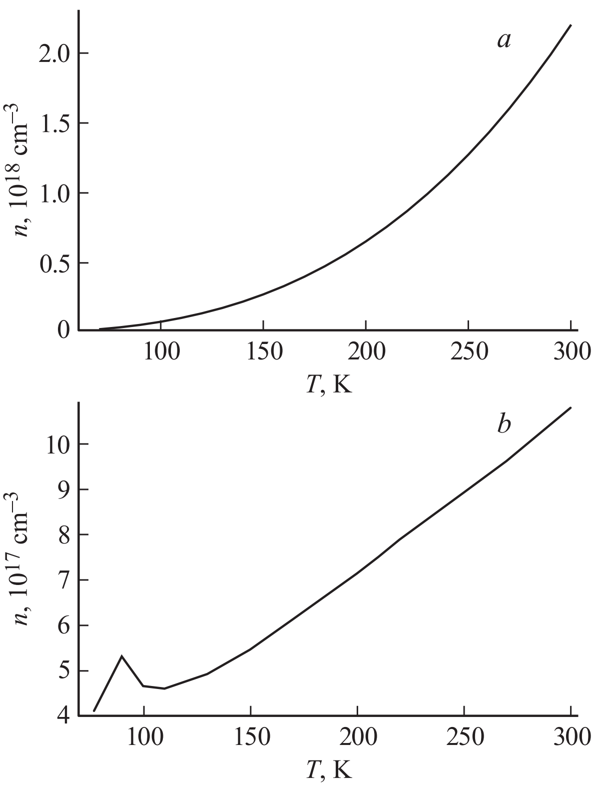


Рис. 4. Температурные зависимости концентрации электронов в $Bi_{1-x}Sb_x$: a — $x = 0.12$, b — $x = 0.06$.

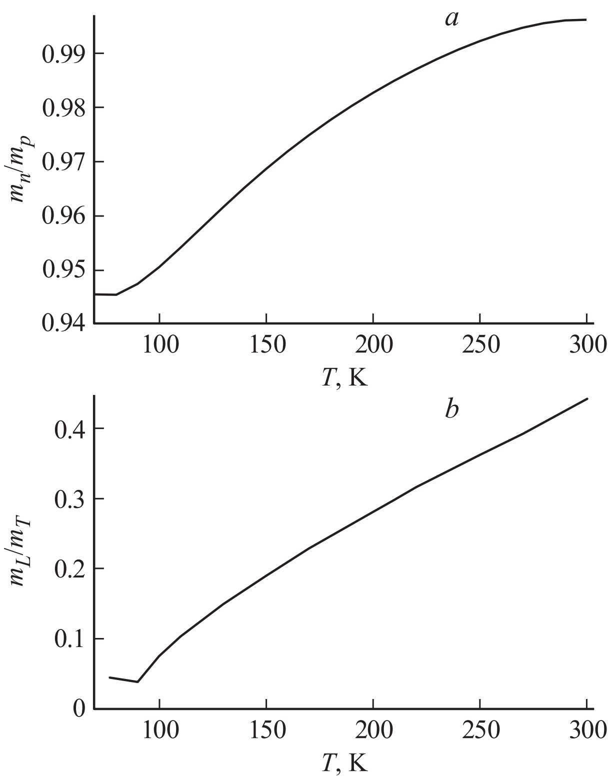


Рис. 5. Температурные зависимости отношения эффективных масс электронов и дырок в $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ (a), легких и тяжелых дырок в $Bi_{0.94}Sb_{0.06}$ (b).

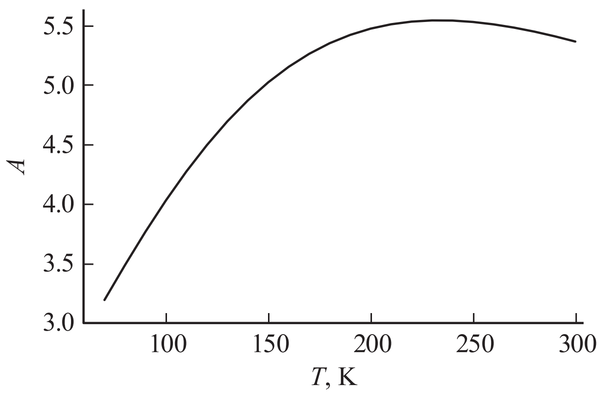


Рис. 6. Температурная зависимость Холл-фактора носителей в $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$.

Величину приведенного химического потенциала η можно найти, решая уравнение электронейтральности для двух сортов дырок и одного сорта электронов (дырочная зона в точке T считается параболической, и ее положение не зависит от температуры),

$$\gamma^{3/2}\big(I^0_{3/2,0}(\eta,\beta) - I^0_{3/2,0}(-\eta-\Delta,\beta)\big) = I^0_{3/2,0}(-\eta-\Delta,0). \tag{8}$$

Согласно схеме на рис. 1, величина перекрытия зоны тяжелых дырок T-зоны и L-зоны электронов составляет ~ 7.6 мэВ (при $T \to 0$ K). Температурная зависимость ширины E_{gL} для этого состава была рассчитана в [8] на основе экстраполяции результатов работы [9]:

$$\beta = \frac{k_0T}{11.5942\cdot \mathrm{Abs}(-3.146-0.0148680T+0.0006229T^2)},$$

$$\Delta = \Big[11.5942 - 9.233 + 0.5\cdot \mathrm{Abs}(-3.146 - 3.146 - 0.014868T + 0.0006229T^2)\Big]/k_0T.$$

Определив η из (8), путем сопоставления расчета зависимости коэффициента Холла $R(T)$ по (7) мы получили температурные зависимости уровня Ферми ξ_{F}, концентрации электронов, концентраций легких p_L и тяжелых дырок p_T (рис. 7), отношение масс γ.

Как видно из представленных рисунков, начальный участок зависимости $\xi_{\mathrm{F}}(T)$ (рис. 2, b) связан с перераспределением дырок между зонами тяжелых и легких дырок. Затем уровень Ферми растет с увеличением перекрытия T-зоны с электронной зоной. Дальнейшее понижение связано с увеличением ширины запрещенной зоны.

Концентрация электронов n сначала растет в области температур, где перекрытие дырочной T-зоны с электронной зоной увеличивается, затем n падает в области температур, где перекрытие уменьшается. После этого n снова возрастает из-за обычного теплового заброса электронов валентных зон в зону проводимости.

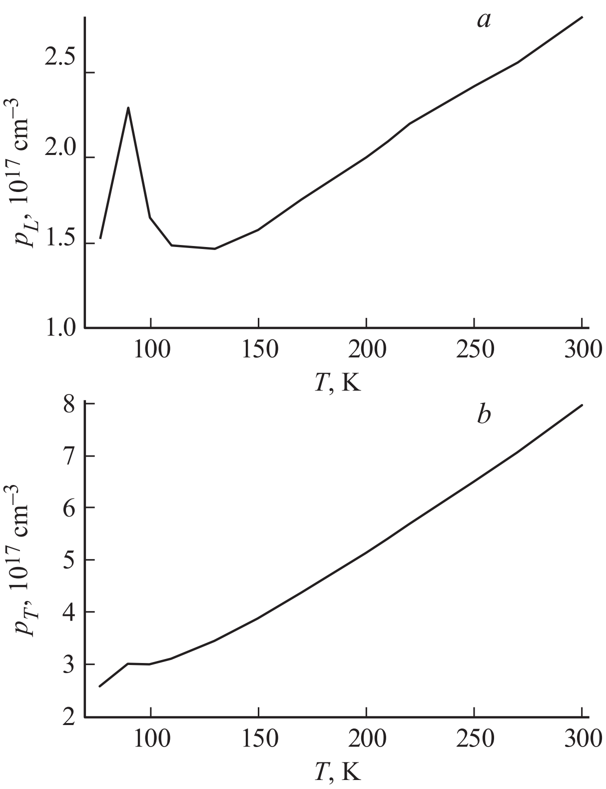


Рис. 7. Температурные зависимости концентраций легких (a) и тяжелых (b) дырок в $Bi_{0.94}Sb_{0.06}$.

Концентрация легких дырок (рис. 7, a) вначале возрастает в области температур, где зазор в точке L уменьшается. Затем падает из-за удаления дырочной зоны из электронной. Дальнейший рост концентрации вызван тепловым забросом электронов из валентной зоны в зону проводимости. Концентрация тяжелых дырок (рис. 7, b) сначала растет с увеличением перекрытия T-зоны с электронной. Затем падает из-за уменьшения перекрытия. Дальнейший рост присходит из-за обычного теплового заброса электронов валентных зон в зону проводимости.

3. Заключение

Количественные расчеты температурной зависимости коэффициента Холла на основе схемы перестройки энергического спектра системы $Bi_{1-x}Sb_x$ ($x = 0.06, 0.12$) позволили установить механизм роста концентраций носителей заряда и отношение их эффективных масс от температуры.

Авторы выражают благодарность академику Ф.М. Гашимзаде за проявленный интерес к работе и помощь в проведении компьютерных расчетов.

Список литературы

[1] N.B. Brandt, S.M. Chudinov, V.G. Karavaev. Zh. Eksp. Teor. Fiz., **70**, 2296 (1976).
[2] Б.М. Аскеров *Электронные явления переноса в полупроводниках* (М., Наука, 1985).
[3] M.P. Vecchi, E. Mendez, M.S. Dresselhaus. *Proc. 13th. Intern. Conf. Phys. Semicond.* (Roma, 1976) p. 459.
[4] E. Kohen. Phys. Rev., **121**, 387 (1961).
[5] G.E. Smit. Phys. Rev. Lett., **9** (12), 487 (1962).
[6] J.K. Galt, W.A. Jager, F.R. Merritt, B.B. Cetlin, A.D. Brailsford. Phys. Rev., **114** (6), 1396 (1959).
[7] *Recent Trends in Thermoelectric Materials Research* I, ed. by T.M. Tritt. Semiconductors and Semimetals, v. 69 (2001).
[8] Э. Юзбашов, Б.А. Таиров, М. Акперов. Изв. НАН Азербайджана, **31** (5), (2011).
[9] M.P. Vecci, M.S. Dresselhaus. Phys.Rev. B, **10** (2), 771 (1974).

Редактор Л.В. Шаронова

Temperature dependence of the Hall coefficient in $Bi_{1-x}Sb_x$ ($x = 0.06, 0.12$)

B.A. Tairov, X.A. Gasanova, R.I. Selim-zade

Institute of Physics,
National Academy of Sciences of Azerbaijan,
Az-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract The temperature dependences of the Fermi level, charge carrier concentrations and effective masses ratio in $Bi_{1-x}Sb_x$ ($x = 0.06, 0.12$) at 77–300 K have been obtained on the base of quantitative analyses of the Hall coefficient temperature dependence.