

Энергия примесных резонансных состояний в теллуриде свинца с различным содержанием примеси таллия

© С.А. Немов[¶], Ю.И. Равич, В.И. Корчагин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
195251 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 29 ноября 2010 г. Принята к печати 6 декабря 2010 г.)

Производится расчет фактора Холла с учетом резонансного рассеяния дырок на примеси таллия в PbTe. Вычисленный фактор Холла существенно отличается от единицы при низких температурах ($T \approx 77$ К) и относительно малых содержаниях Tl ($N_{\text{Tl}} \approx 0.5$ ат%). Уточняется энергия резонансных уровней с использованием скорректированного фактора Холла. Оказывается, что энергия примесных резонансных состояний не зависит от концентрации таллия вплоть до 2 ат% Tl, в отличие от ранее полученных результатов.

При легировании теллурида (и других халькогенидов) свинца примесью таллия образуются резонансные примесные состояния, расположенные в валентной зоне на расстоянии порядка 0.2 эВ от края энергетической щели [1–4]. Глубина залегания резонансной полосы обычно определяется по уровню стабилизации химического потенциала, который, в свою очередь, определяется из величины холловской концентрации дырок.

Особенностью резонансных состояний таллия в PbTe является заметная зависимость энергии примесных уровней ε_i от содержания примеси таллия. Эта зависимость, полученная путем анализа результатов холловских измерений, приведена на рис. 1, а. Для сравнения на рис. 1, б представлена соответствующая кривая для PbTe, легированного другой примесью третьей группы — индием [6,7]. Обращает на себя внимание существенное различие между двумя этими кривыми. Энергия резонансных состояний In начинает падать при содержании примеси In порядка 3 ат%, при увеличении концентрации индия скорость падения возрастает. При легировании таллием наиболее заметная зависимость ε_i от содержания примеси наблюдается при значительно более слабом легировании $N_{\text{Tl}} \approx 0.3–0.5$ ат%, при дальнейшем росте N_{Tl} зависимость $\varepsilon_i(N_{\text{Tl}})$ ослабляется и при наибольшем достигнутом содержании Tl, порядка 2 ат%, наблюдается насыщение функции $\varepsilon_i(N_{\text{Tl}})$.

Зависимость $\varepsilon_i(N_{\text{In}})$ можно объяснить ростом перекрытия примесных волновых функций In. (Наблюдаемая нелинейность функции $\varepsilon_i(N_{\text{In}})$ при больших содержаниях In порядка 15–20 ат% обсуждалась в обзоре [7].) Зависимость энергии резонансных состояний от содержания примеси при легировании PbTe таллием до настоящего времени не находила объяснения, в частности относительно сильная зависимость при малых содержаниях Tl и насыщение при больших.

Одним из существенных различий образцов PbTe, легированных таллием и индием, является ярко выраженное резонансное рассеяние дырок в первых [1,4] и отсутствие резонансного рассеяния электронов во вторых [2]. Как было недавно показано [8], сильное резо-

нансное рассеяние может приводить к существенному отклонению фактора Холла (а также числа Лоренца) от универсальных констант, которым они равны при обычных механизмах рассеяния в условиях сильного статистического вырождения носителей тока. Учет резонансного рассеяния при обработке холловских экспериментальных данных заметно уменьшает полученную зависимость $\varepsilon_i(N_{\text{Tl}})$, причем именно в области относительно малых содержаний N_{Tl} [8].

Однако в работе [8] при расчете использовались не вполне точные исходные параметры, что мало влияло на сами вычисляемые величины, но могло проявиться в таких более тонких эффектах, как зависимость фактора Холла от содержания примеси. Поэтому в настоящей работе производится уточнение исходных параметров и перерасчет фактора Холла, что приводит к качественно иным выводам о зависимости энергии резонансных состояний от концентрации, при сохранении основных выводов о величинах фактора Холла.

Самая большая погрешность в [8] была допущена в величине приведенного химического потенциала дырок μ^* . Из качественных соображений следует, что расчетное значение фактора Холла A_r не должно зависеть от величины μ^* при достаточно сильном вырождении. В обычном разложении Зоммерфельда предел сильного вырождения достигается приблизительно при $\mu^* \approx 5$, поэтому в работе [8] использовалась величина $\mu^* \approx 6$ как при комнатной температуре, так и при $T = 77$ К. Это значение μ^* близко к реальному при комнатной температуре, но не при азотной. Впоследствии нами были произведены компьютерные расчеты зависимости фактора Холла от степени вырождения μ^* в более широком интервале изменения $\mu^* \approx 5–100$. Оказалось, что благодаря особенностям резонансного рассеяния фактор A_r приближается к пределу $\mu^* \rightarrow \infty$ при $\mu^* \rightarrow \infty$ при $\mu^* = 12–15$, т.е. при величинах μ^* , значительно превышающих соответствующее значение для случая слабой зависимости времени релаксации от энергии. Таким образом, при низких температурах следует использовать большее значение μ^* , чем $\mu^* = 6$. В данной работе мы считали, что при $T = 77$ К $\mu^* = 30$.

[¶] E-mail: nemov_s@mail.ru

Исходные параметры и результаты численных расчетов фактора Холла для PbTe:Pi

Содержание таллия	Область температур	μ^*	$\Gamma^*/2$	A	M	$A_T(\max)$	$A_T(M)$	$A_R(M)$
Низкое $N_{\text{П}} \approx 0.5 \text{ ат\%}$	$T = 77 \text{ К}$	30	1	31	-1.4	1.9	1.7	1.4
	$T = 300 \text{ К}$	6	1	8	-1.4	1.4	1.3	1.1
Высокое $N_{\text{П}} \approx 2 \text{ ат\%}$	$T = 77 \text{ К}$	30	2.5	10	-0.6	1.2	1.2	1.0
	$T = 300 \text{ К}$	6	2.5	3	-0.6	1.1	1.1	0.9

Коррекция величины μ^* привела к необходимости изменения и других исходных параметров, в частности параметра A , характеризующего относительный вклад резонансного рассеяния при энергии ε_i , соответствующей максимуму плотности резонансных состояний (см. таблицу).

Полуширина резонансной полосы $\Gamma^*/2$ (в единицах $k_B T$) ранее [8] была взята из литературных данных и не

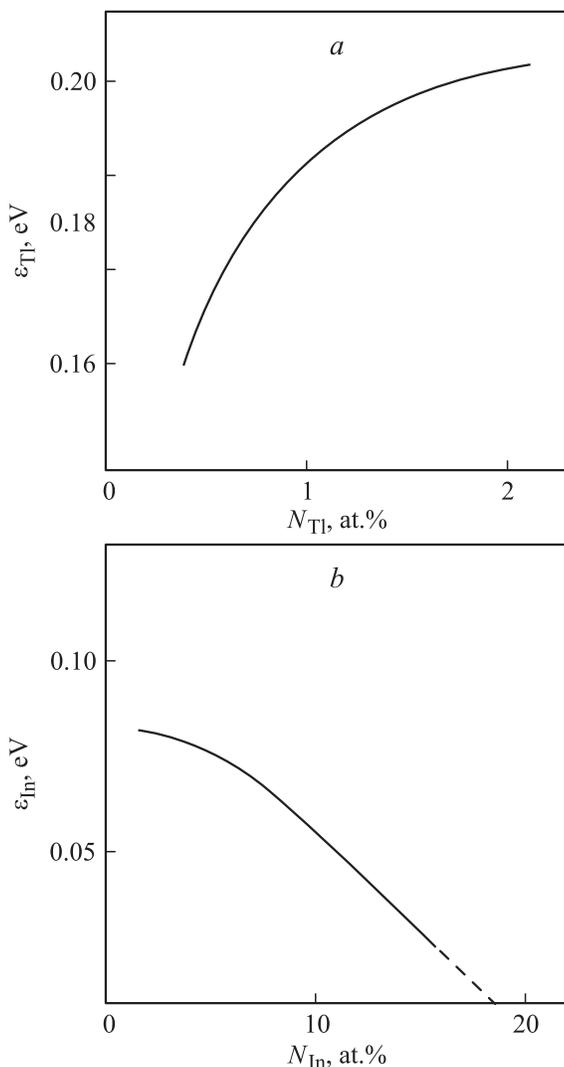


Рис. 1. Зависимости энергии резонансных состояний в PbTe, полученные из холловских измерений, при легировании: *a* — таллием ([5], $T = 77 \text{ К}$), *b* — индием ([6], $T = 4 \text{ К}$).

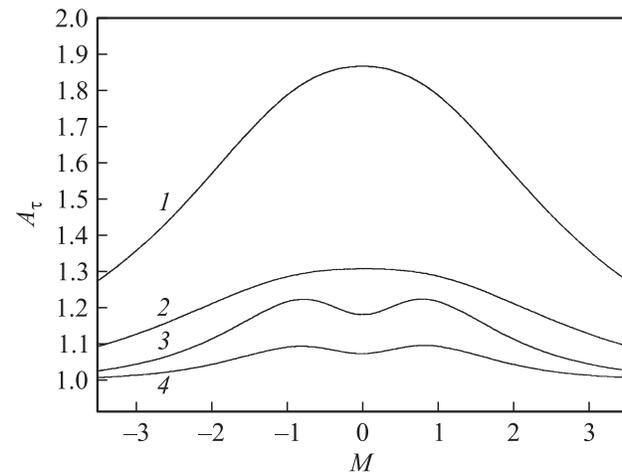


Рис. 2. Расчетные результаты для статистического фактора Холла A_T как функции параметра M . Значения $\Gamma^*/2$ для кривых 1, 2 равны 1, для 3, 4 — 2.5; приведенный химический потенциал μ^* для кривых 1, 3 равен 30, для 2, 4 — 6; параметр A для кривой 1 равен 31, 2 — 6, 3 — 10, 4 — 3.

корректировалась. Учитывая более высокие, чем ранее, требования к точности расчета, мы вычислили параметр

$$M = \frac{\mu - \varepsilon_i}{\Gamma/2}, \quad (1)$$

вместо того чтобы использовать, как в [8], его значение по порядку величины. Параметр M связан с коэффициентом заполнения примесной полосы дырками через формулы, приведенные во многих статьях [3–5,8]. Его значения оказались несколько ниже тех, которые использовались в [8] при $N_{\text{П}} \approx 0.5 \text{ ат\%}$ (см. таблицу).

Статистический фактор Холла A_T , обусловленный энергетической зависимостью времени релаксации, был получен путем компьютерного расчета по формулам [8]

$$A_T = \frac{I_{0.2}}{I_{0.1}^2}, \quad (2)$$

$$I_{n,m} = \int_{-\mu^*}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial x} \right) x^n \left[1 + \frac{A}{1 + \left(\frac{x}{\Gamma^*/2} + M \right)^2} \right]^{-m} dx, \quad (3)$$

как функция M при параметрах A , μ^* , $\Gamma^*/2$, приведенных в таблице. Результаты расчета A_T представлены на рис. 2, а также в таблице. Расчет показал, что фактор A_T

благодаря резонансному рассеянию значительно (почти вдвое при низких содержаниях Тl) превышает единицу в максимуме кривой $A_T(M)$.

При получении концентрации дырок из экспериментального коэффициента Холла необходимо $A_T(M)$ умножить на фактор A_K , обусловленный анизотропной многоэллипсоидной структурой валентной зоны PbTe. Как и ранее [8], мы считаем $A_K \approx 0.8$ и после перемножения $A_T(M)$ и A_K получаем полный фактор A_R , который используем далее при определении концентрации дырок вместо значения $A_R = 1$, принятого в работе [5]. Из таблицы видно, что фактор A_R заметно отличен от 1 только при относительно низких содержаниях Тl и температурах вблизи азотной. В этом случае $A_R = 1.4$, и мы скорректируем полученные в [5] величины ε_i , введя в расчет фактор A_R .

В работе [5] на рисунке приведены значения $\varepsilon_i = 0.17$ эВ при $N_{\text{Tl}} = 0.5$ ат% и $\varepsilon_i = 0.20$ эВ при $N_{\text{Tl}} = 2$ ат%; как указано выше, пересмотра требует лишь первая из величин. Пользуясь полученной выше величиной $M = -1.4$, из значения $\varepsilon_i = 0.17$ эВ находим химический потенциал μ , который на 0.01 эВ меньше ε_i , т.е. $\mu = 0.16$ эВ.

В процессе расчета связи химического потенциала с концентрацией дырок многоэллипсоидную валентную зону можно заменить зоной с изотропным законом дисперсии при использовании эффективной массы плотности состояний m_d^* . Чтобы учесть непараболичность в случае простой двухзонной (кейновской) модели, энергию ε следует заменить на $\varepsilon(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g})$, где ε_g — энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Тогда для химического потенциала как функции величины волнового вектора на уровне Ферми имеем уравнение

$$\mu \left(1 + \frac{\mu}{\varepsilon_g} \right) = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_d^*}. \quad (4)$$

Используя полученную выше величину $\mu = 0.16$ эВ и $\varepsilon_g = 0.2$ эВ находим, что по данным [5] правая часть (4) равна 0.288 эВ. Учитывая, что $k_F \approx p^{1/3}$, где p — концентрация свободных дырок,

$$p = \frac{A_R}{eR}, \quad (5)$$

R — коэффициент Холла, мы должны при введении поправки на отличие A_R от 1 умножить правую часть (4) на $A_R^{2/3} = 1.25$, получив вместо 0.288 эВ величину 0.36 эВ. Таким образом, для вычисления исправленного значения μ следует решить квадратное уравнение (4) с величиной 0.36 эВ в правой части, что дает $\mu = 0.186$ эВ. Учитывая, что ε_i на 0.01 эВ больше μ , находим значение ε_i , близкое 0.2 эВ, т.е. практически то же значение ε_i , что и при содержании таллия $N_{\text{Tl}} = 2$ ат%.

Таким образом, зависимость ε_i от N_{Tl} , найденная в [5] и изображенная на рис. 1, а, является кажущейся, вызванной использованием неправильного значения

фактора Холла $A_R = 1$. С этой точки зрения понятно, почему кажущаяся зависимость $\varepsilon_i(N_{\text{Tl}})$ наблюдалась [5] при низких концентрациях $N_{\text{Tl}} \approx 0.5$ ат%. Именно при таких величинах N_{Tl} фактор Холла при резонансном рассеянии существенно отличается от 1.

Список литературы

- [1] В.И. Кайданов, С.А. Немов. ФТП, **15**, 542 (1981).
- [2] В.И. Кайданов, Ю.И. Равич. УФН, **145**, 51 (1985).
- [3] С.А. Немов, Ю.И. Равич. УФН, **168**, 817 (1998).
- [4] В.И. Кайданов, С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП, **26**, 201 (1992).
- [5] Т.Р. Машкова, С.А. Немов. ФТП, **19**, 1864 (1985).
- [6] В.В. Голубев, Н.И. Гречко, С.Н. Лыков, Е.П. Сабо, И.А. Черник. ФТП, **11**, 1704 (1977).
- [7] Ю.И. Равич, С.А. Немов. ФТП, **36**, 3 (2002).
- [8] Л.В. Прокофьева, А.А. Шабалдин, В.А. Корчагин, С.А. Немов, Ю.И. Равич. ФТП, **42**, 1180 (2008).

Редактор Л.В. Беляков

Energy of impurity resonance states in lead telluride with various contents of thallium impurity

S.A. Nemo, Yu.I. Ravich, V.A. Korchagin

St. Petersburg State Polytechnical University,
195251 St. Petersburg, Russia

Abstract The Hall factor has been calculated in PbTe with taking into account the resonance scattering of holes on thallium impurity. The obtained Hall factor essentially differs from unit at low temperatures ($T \approx 77$ K) and relatively small contents of Tl ($N_{\text{Tl}} \approx 0.5$ ат%). The energy of resonance levels has been corrected with employment of the calculated Hall factor. It turns out, that the energy of the impurity resonance states does not depend on thallium concentration up to 2 ат% Tl, in contradistinction to the results obtained earlier.