

УДК 621.315.592

Б.К.Остафійчук, Л.І.Никируй, В.М.Кланічка, В.М.Шперун
**Про механізми розсіювання носіїв струму
в кристалах n-PbS**

*Фізико-хімічний інститут при Прикарпатському університеті імені Василя Стефаника,
76025 м.Івано-Франківськ, вул.Шевченка, 57
E-mail: freik@pu.if.ua*

Досліджено вплив закону дисперсії та характеру розсіювання носіїв струму в монокристалах n-PbS на рухливість носіїв у концентраційному інтервалі 10^{16} - 10^{20} см⁻³ при температурах 4,2К, 77К та 300К. На основі порівняння одержаних теоретичних результатів з експериментальними даними уточнено межі використання квадратичного та неквадратичного законів дисперсії Кейна. Оцінено внесок у загальний механізм розсіювання короткодіючого і кулонівського потенціалів вакансій та оптичних і акустичних фононів.

Ключові слова: PbS, зонна структура, механізми розсіювання, рівень Фермі.

Стаття поступила до редакції 17.10.2000; прийнята до друку 13.11.2000

1. Халькогеніди свинцю, що відносяться до вузькощілинних напівпровідникових сполук типу $A^{IV}B^{VI}$, зарекомендували себе перспективними матеріалами для приладів інфрачервоної техніки, термоелектричних перетворювачів енергії [1-3]. Зонна структура та механізми розсіювання у цих сполуках активно досліджувались раніше різними авторами [1-16]. Аналіз цих результатів показує, що на даний час немає вичерпного пояснення характеру розсіювання носіїв струму та границь використання того чи іншого закону дисперсії. В даній роботі представлено спробу пояснити механізми розсіювання носіїв струму для монокристалів PbS n-типу провідності, виходячи із закону дисперсії, одержаного на основі 2-зонної моделі Кейна у наближенні часу релаксації при температурах 4,2К, 77К та 300К.

2. Для розрахунків використано два закони дисперсії, одержані на основі моделі Кейна: квадратичний закон зі змінною

ефективною масою та неквадратичний закон зі змінною ефективною масою, відповідно [14]:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (1)$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{1}{2} \varepsilon_G + \sqrt{\varepsilon_G^2 + \frac{4\hbar^2}{m^{*2}} k^2 p^2}. \quad (2)$$

Вираз для обчислення рухливості Холла було одержано, використовуючи міркування [16]:

$$\mu_H = \frac{e}{m^*} \tau \frac{I_{3/2,1}^{1/2}(0;0,10)}{I_{3/2,0}^{1/2}(0;0,10)}, \quad (3)$$

де m^* – ефективна маса носіїв, $I_{n,k}^m(z;\beta)$ – двопараметричні інтеграли Фермі, τ – час релаксації, який показує, наскільки швидко система перейде в рівноважний стан після зняття зовнішніх впливів, причому перехід в рівноважний стан відбувається через процеси зіткнення частинок системи.

Згідно сучасних уявлень, носії заряду у PbS при розглядуваних температурному та

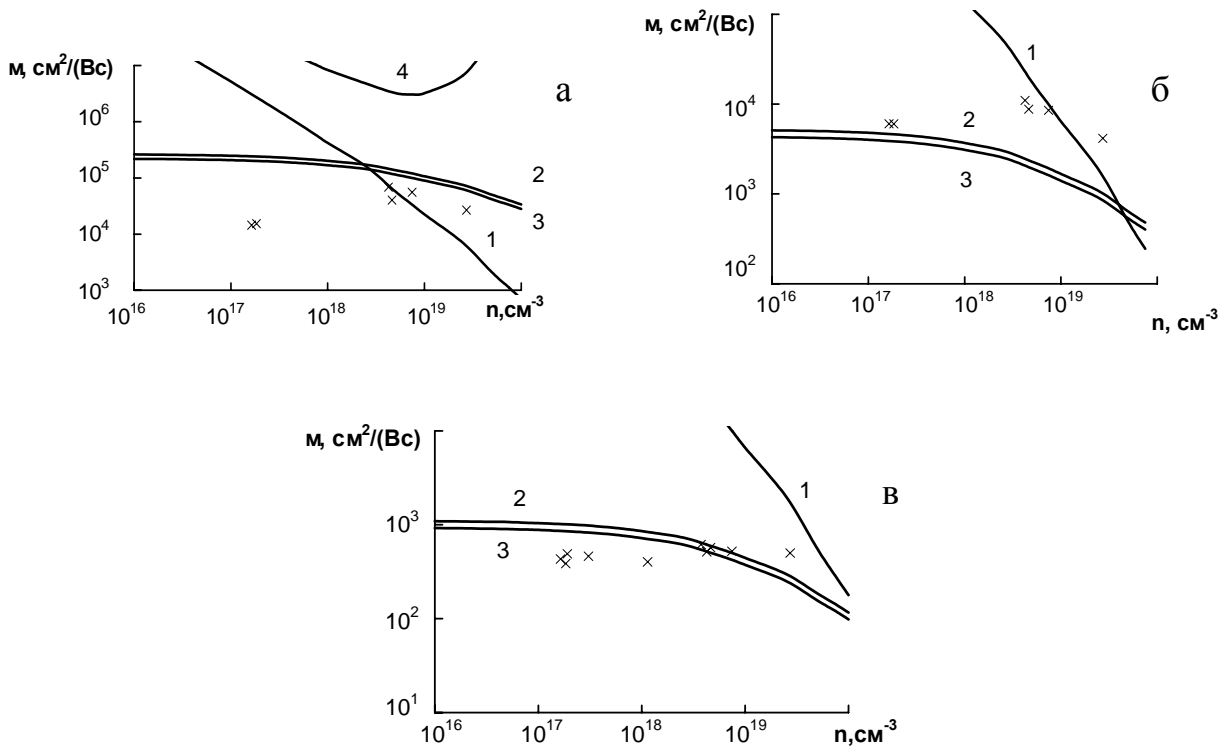


Рис. 1. Залежність холлівської рухливості носіїв заряду від концентрації у n-PbS для температур: а – 4,2К, б – 77К, в – 300К; суцільні лінії – теоретично розраховані криві для розсіювання носіїв на : 1 – короткодіючому потенціалі вакансій, 2 – деформаційному потенціалі акустичних фононів, 3 – деформаційному потенціалі оптичних фононів, 4 – кулонівському потенціалі вакансій. Експериментальні дані взято з роботи [3].

концентраційному інтервалах розсіюються на власних точкових дефектах та коливаннях ґратки. Серед цих механізмів виділяють розсіювання на: заряджених вакансіях (короткодіючий потенціал; кулонівський потенціал вакансій), акустичних і, особливо, на оптичних фононах. Вирази часу релаксації для кожного окремого механізму розсіювання обчислювали на основі співвідношення Мансфілда [16].

3. На рис. 1 показано залежності холлівської рухливості носіїв заряду від концентрації при температурах 4,2К, 77К та 300К відповідно. Попередній аналіз отриманих результатів показав, що при гелієвих температурах чіткіше співпадання з експериментом дає квадратичний закон дисперсії (рис. 1, а); при вищих температурах експериментальні значення краще пояснюються, якщо враховувати ще вклад лінійних по **k** доданків, тобто,

неквадратичний закон дисперсії (рис.1, б, в). Рівень Фермі досліджуваних кристалів, як і для всіх матеріалів n-типу провідності із зростанням температури наближається до зони провідності. З представлених залежностей видно, що починаючи з концентрацій $\sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ і вище, криві, побудовані для різних температур, різко розмежовуються: крива 1 ($T=4,2\text{K}$, виконується квадратичний закон дисперсії зі змінною ефективною масою) у порівнянні з кривими 2 і 3 менш різко зростає. Тобто, неквадратичний закон дисперсії виконується для станів з більш чутливим до температури рівнем Фермі. Оскільки, із зростанням концентрації та із спаданням температури функція Больцмана переходить в функцію Фермі-Дірака, то можна казати, що квадратичний закон дисперсії краще виконується для вироджених напівпровідників, і, навпаки,

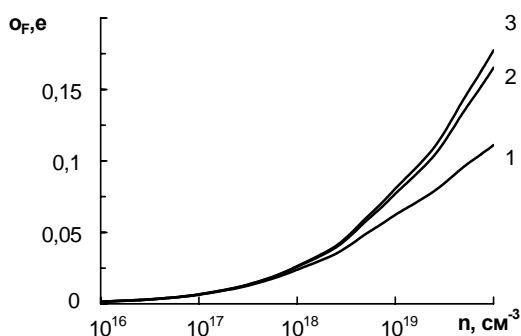


Рис. 2. Залежність рівня Фермі від концентрації носіїв в n-PbS для температур: 1 – 4,2К, 2 – 77К, 3 – 300К

неквадратичний закон дисперсії слід враховувати для провідників, які описуються класичною статистикою (невироджені напівпровідники).

4. Аналіз впливу окремих механізмів розсіювання на характер руху носіїв струму показує, що для всіх розглянутих температур чітко проявляє себе розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фонових (криві 2 на рис.1, а, б, в). При низьких температурах (4,2К) ефективно

реалізується розсіювання носіїв на заряджених вакансіях, серед яких переважають розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій. Із зростанням температури вакансійні механізми менш чітко себе проявляють, розсіювання на короткодіючому потенціалі відіграє суттєву роль лише в області високих концентрацій (криві 1 на рис.1 а, б, в). Відхилення теоретично одержаних значень рухливості Холла від експериментальних даних можна пояснити вкладом непружних механізмів розсіювання [1, 17, 18]. Роль непружних механізмів у більшості робіт зводилась лише до розсіювання на поляризаційному потенціалі оптичних фонових [19-22]. Внеском деформаційного потенціалу оптичних фонових у загальний механізм розсіювання не можна нехтувати, особливо для кристалів із низькими концентраціями.

Автори висловлюють щире вдячність проф. Фреїку Д.М., проф. Рувінському М.А. і доц. Возняку О.М. за інтерес до роботи та цінні зауваження.

- [1] Ю.И.Равич, Б.А.Ефимова, Н.А.Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbSe, PbS, PbTe.* – М.: Наука, (1968).
- [2] Н.Х.Абрикосов, Л.Е.Шелимова. *Полупроводниковые материалы на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$.* – М.: Наука, 1975.
- [3] Н.П.Гавалешко, П.Н.Горлей, В.А.Шендеровский. *Узкозонные полупроводники: получение и физические свойства.* – Киев: Наук.думка, (1984).
- [4] R.S.Allgaier, W.W.Scanlon. Mobility of Electrons and Holes in PbS, PbSe, and PbTe between Room Temperature and 4.2K // *Phys. Rev.* **111**(4), pp. 1029-1037 (1958).
- [5] R. Dalven. Energy-Gap Anomaly in the Semiconductor Sequence PbS, PbSe, and PbTe // *Phys. Rev. B.* **3**(10), pp.3359-3367 (1970).
- [6] В.П.Зломанов, А.В.Новосёлова. *P-T-x- диаграммы состояний системы металл-халькогены.* – М.:Наука, (1987).
- [7] А.Д.Андреев, А.А.Липовский. Влияние анизотропии зонной структуры на оптические переходы в сферических квантовых точках на основе сульфида и селенида свинца // *ФТП* **33**(12), сс. 1450-1455 (1999).
- [8] Д.М.Фреїк, В.В.Прокопів, М.О.Галушак, М.В.Пиц, Г.Д.Матеїк. *Кристалохімія і термодинаміка атомних дефектів у сполуках $A^{IV}B^{VI}$.* – Івано-Франківськ: Плай, (1999).
- [9] Д.М. Заячук, В.А.Шендеровський. // *УФЖ* **36**(11), сс.1692-1713 (1991)
- [10] М.Грин. *Поверхностные свойства твёрдых тел.* – М.:Мир, (1972).
- [11] Д.М.Заячук. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния в теллуриде свинца // *ФТП*, **31**(2), сс.217–220(1997).
- [12] E.O.Kane. The k-p method // *Semiconductors and semimetals.*– New York: Acad.Press, **1** pp. 75–100(1970).
- [13] E.O.Kane. Band structure of narrow gap semiconductors // *Lect Notes Phys*, **133**, pp.13-31(1980).
- [14] Б.М.Аскеров. *Кинетические эффекты в полупроводниках..* – Л.: Наука, (1970).

- [15] Д.М.Фреїк, Л.І.Никируй, Я.П.Салій, Л.Й.Межиловська, О.Я.Довгий. Зонна структура і механізм розсіювання носіїв струму в n-PbTe при 4,2К // *Фізика і хімія твердого тіла*, **1**(1), сс.95-100 (2000).
- [16] Д.М.Фреїк, Л.І.Никируй, В.М. Кланічка, В.М.Шперун, Р.І.Собкович, О.Я.Довгий. Зонна структура та механізми розсіювання у кристалах n-PbSe при 77К // *Фізика і хімія твердого тіла*, **1**(2), сс.245-249 (2000).
- [17] И.М.Цидилковский. *Электроны и дырки в полупроводниках*. – М.: Наука, (1972).
- [18] А.И.Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. – М.: Наука, (1978).
- [19] В.Г.Половинкин, Є.М.Скок. К теории кинетических коэффициентов при неупругом рассеянии на оптических фононах // *ФТП*, **8**(6), сс.1134-1140 (1974)
- [20] Б.И.Давыдов, И.М.Шмушкевич. // *ЖЭТФ*, **10**, сс.1043 (1940).
- [21] В.Л.Гуревич, Ю.А.Фирсов. // *ЖЭТФ*, **40**, сс.199 (1961).
- [22] В.Л.Коломов, И.Н.Яснеевич. Функция распределения электронов, разогретых светом, при взаимодействии с оптическими фононами // *ФТП*, **8**(6), сс.1125-1133 (1974).

В.К. Ostafiychuk, L.I.Nykyruy, V.M.Klanichka, V.M.Shperun

About scattering of charge carriers at the n-PbS crystals

*Physics-Chemical Institute at the Vasyl Stefanyk Prekarpathian University
Shevchenko str., 57, Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine*

The law of a dispersion and scattering of charge carriers in single crystals n-PbS in a concentration interval 1016-1020 cm⁻³ is investigated at temperatures 4,2, 77 and 300. At the compare obtained theoretical results with experimental data is updated the application of the quadratic and nonquadratic Kane laws of a dispersion The estimation of the contribution of a deformation potential of optical phonons in the general scattering is shown.