ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 7, № 3 (2006) С. 423-429

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 7, № 3 (2006) P. 423-429

УДК 621.315.592

ISSN 1729-4428

Л.І. Никируй, О.В. Ільків

Домішкове розсіювання у легованих талієм кристалах телуриду свинцю (PbTe:Tl)

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76025, E-mail: lyubomyr@mail.ru

Досліджено внесок домішкового розсіювання у кристалах телуриду свинцю, легованого акцепторною домішкою талію у сумарне розсіювання. Визначено характер поведінки рівня Фермі у легованому PbTe:Tl.

Ключові слова: PbTe:Tl, механізми розсіювання, енергія Фермі, домішкове розсіювання.

Стаття поступила до редакції 15.03.2006; прийнята до друку 15.06.2006.

Вступ

Халькогеніди свинцю відносяться до перспективних матеріалів для створення термоелектричних перетворювачів енергії, а також приладових структур, що функціонують в інфрачервоній області оптичного спектру [1-10]. Оптимізація кінетичних параметрів халькогенідів свинцю, детальне дослідження зонної структури і нові підходи у поясненні існуючих механізмів розсіювання носіїв струму є необхідними умовами для створення більш ефективних матеріалів та оптимізації характеристик активних елементів на їх основі.

Кінетичні параметри напівпровідникових матеріалів у значній мірі визначаються механізмами розсіювання носіїв струму [1, 2, 4, 11-30]. Відомо, що при низьких температурах, порядку гелієвих, в явищах переносу домінує розсіювання на вакансіях, а при високих – на теплових коливаннях кристалічної ґратки [1, 2, 4, 11-15]. Детальний теоретичний розрахунок внеску кожного із видів розсіювання носіїв струму суттєво залежить від вибору закону дисперсії [1, 2, 4, 12, 22, 23].

Про переважаючі механізми розсіювання в напівпровідниках звичайно говорять по визначеним із різних кінетичних ефектів залежностей часу релаксації від енергії, концентрації носіїв і температури. У сильно вироджених напівпровідниках (напівметалах) залежність рухливості від концентрації визначається зміною часу релаксації при заповненні зони, а термо-е.р.с. – похідної часу релаксації по енергії.

Перша інформація про механізми розсіювання у халькогенідах свинцю отримана із вимірювань рухливості, термоелектричної потужності, коефіцієнта Нернста-Еттінгаузена [2, 4]. На той час виходили із того, що знак коефіцієнта Нернста-Еттінгаузена більше відповідав розсіюванню на акустичних, ніж на оптичних фононах. Пізніше В.А. Шендеровський та П.М. Горлей [18] розрахували коефіцієнт нелінійності теплих електронів β і отримали, що β міняє знак з від'ємного при низьких температурах на додатній в області температур, вищих за температуру Дебая. Така залежність β(T) має місце при домінуванні розсіювання носіїв струму на оптичних полярних фононах. Крім того, ними було встановлено, що при температурах, близьких до кімнатної, величина коефіцієнта β помітно залежить від інтенсивності акустичного розсіювання.

З аналізу експериментальних даних по термо-е.р.с. для халькогенідів свинцю отримано строгу температурну залежність ефективної маси [19, 20]. Вважаючи переважаючим розсіювання на акустичних фононах та враховуючи температурну залежність ефективної маси, Волков та ін. [20] отримали закони $T^{-5/2}$ для температурної залежності рухливості у інтервалі температур 77-300 К. Це підтверджувало, що при температурах, вищих за азотні, явища переносу добре описуються розсіюванням на акустичних фононах, з часом релаксації, який відповідає $\sim \varepsilon^{-1/2}$ [4, 17].

Дослідження температурних та концентраційних залежностей рухливості носіїв в кристалах PbSe [21] дозволили отримати співвідношення між часом релаксації та концентрацією носіїв $\tau \sim n^{-1/3}$, яку пояснили розсіюванням вільних носіїв на акустичних фононах при температурах 0 - 800 К та на йонізованих домішках при низьких температурах.

Вивчення впливу непараболічності на час релаксації, проведене у [22] показало, що при

температурі 120 К значення параметра розсіювання найкраще пояснюється розсіюванням носіїв на акустичних фононах, тоді як при 293 К цей параметр пояснюється комбінацією акустичного розсіювання та розсіювання на полярних коливаннях кристалічної ґратки.

Але обмежуючись розсіюванням на акустичних фононах (а також розсіюванням на домішках при низьких температурах) не можна було пояснити значення коефіцієнта Нернста-Еттінгаузена, температурної залежності коефіцієнта Холла та рухливості при температурах, нижчих за 77 К [17], залежності термо-е.р.с. у робочих магнітних полях [4] та значення магнетоопору [4, 14] (виміряні та розраховані значення якого відрізняються у 2-4 рази).

Іншим сильно непружним механізмом розсіювання є електрон-електронні зіткнення, які порушують закон Відемана-Франца і зменшують число Лоренца. Це має теоретичне та експериментальне підтвердження [13, 14, 28, 29].

Міждолинні переходи дають у загальне розсіювання дуже малий внесок лише в області високих концентраціях ($\sim 10^{20}$ см$^{-3}$) і ніколи не є домінуючим видом розсіювання [4]. У певній мірі розсіювання на короткохвильових фононах із обміном електронів між еквівалентними долинами слід враховувати в халькогенідах свинцю р-типу провідності [1].

Іншим механізмом розсіювання, який можливий в халькогенідах свинцю і внесок якого можна оцінити є розсіювання на деформаційному потенціалі оптичних фононів, яке дає внесок при високих температурах і концентраціях носіїв [12], але у цій області енергетична залежність часу релаксації схожа до тієї, яка є при розсіюванні на акустичних фононах. Так, стала деформаційного потенціалу, отримана із вимірювань рухливості, може включати у себе деяку частку сталої неполярного оптичного деформаційного потенціалу [12].

На сьогодні можна говорити про картину домінуючих механізмів розсіювання, як систематизовану і завершену щодо нелегованих халькогенідів свинцю [22-30]. Зокрема, для основних видів розсіювання носіїв струму отримано:

а) розсіювання на кулонівському потенціалі вакансій при 4,2 К проявляється в області концентрацій носіїв $1\cdot10^{17}$-$2\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ (PbTe), $1\cdot10^{16}$-$2\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, $7\cdot10^{18}$-$1\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ (PbSe), $1\cdot10^{16}$-$5\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, $5\cdot10^{18}$-$1\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ (PbS); причому для сульфіду свинцю цей вид розсіювання суттєвий і при 77 К для концентрацій $1\cdot10^{16}$-$5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$. Така поведінка розсіювання носіїв струму на екрануючому кулонівському потенціалі вакансій пов'язана із високим значенням статичної діелектричної постійної ε_0 та її зміною у ряді ε_0(PbTe) > ε_0(PbSe) > ε_0(PbS);

б) розсіювання на деформаційному потенціалі оптичних фононів дає суттєвий внесок при 300 К для всіх кристалів халькогенідів свинцю n-типу провідності: $5\cdot10^{18}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$ (PbS), $1\cdot10^{19}$-$2{,}5\cdot10^{19}$ см$^{-3}$ (PbSe), $8\cdot10^{18}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$ (PbTe);

в) розсіювання носіїв струму на деформаційному потенціалі акустичних фононів проявляється у всіх досліджуваних кристалах при T = 4,2-300 К та n = $1\cdot10^{16}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$: PbS (4,2 К – $5\cdot10^{18}$-$5\cdot10^{19}$ см$^{-3}$, 77 К – $1\cdot10^{16}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 300 К – $5\cdot10^{18}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$), PbSe (4,2 К – $1\cdot10^{16}$-$8\cdot10^{19}$см$^{-3}$, 77 К – $1\cdot10^{17}$-$7\cdot10^{19}$ см$^{-3}$, 300 К – $6\cdot10^{17}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$), PbTe (4,2 К – $1\cdot10^{16}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 77 К – $8\cdot10^{17}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$). Даний механізм розсіювання завжди слід враховувати у комбінації з одним чи кількома іншими видами розсіювання;

г) розсіювання носіїв на поляризаційному потенціалі оптичних фононів для всіх кристалів халькогенідів свинцю реалізується в інтервалах: PbS (77 К – $1\cdot10^{16}$-$8\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, 300 К – $1\cdot10^{16}$-$1\cdot10^{18}$ см$^{-3}$), PbSe (77 К – $1\cdot10^{16}$-$1\cdot10^{18}$ см$^{-3}$, 300 К – $1\cdot10^{16}$-$6\cdot10^{17}$ см$^{-3}$), PbTe (77 К – $1\cdot10^{16}$-$8{,}5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$, 300 К – $1\cdot10^{16}$-$7\cdot10^{18}$ см$^{-3}$); встановлено концентраційні області екранування носіїв оптичними фононами;

д) розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій домінує при високих значеннях концентрацій у всіх кристалах халькогенідів свинцю: PbS (4,2 К – $1\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 77 К – $2\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 300 К – $8\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$), PbSe (4,2 К – $2\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 77 К – $5\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 300 К – $8\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$), PbTe (4,2 К – $1\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 77 К – $8{,}5\cdot10^{19}$-$1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$, 300 К – > $1\cdot10^{20}$ см$^{-3}$).

Завданням даної роботи є вивчення впливу домішкового розсіювання у легованих талієм кристалах телуриду свинцю.

Домішки III групи Періодичної таблиці надають напівпровідникам типу $A^{IV}B^{VI}$ своєрідні властивості, які виникають в основному завдяки утворенню глибоких резонансних домішкових станів електронів. Загальним ефектом є стабілізація хімічного потенціалу на домішкових рівнях. Однак електронні властивості напівпровідників легованих тими чи іншими елементами Ш групи в різних сполуках вказаного типу не призводять до однакових результатів. Відмінності виникають в залежності від того, в якій області електронного енергетичного спектру розміщені домішкові рівні. Так, індій в PbTe чи інших халькогенідах свинцю створює різні стани в зоні провідності поблизу її краю, хімічний потенціал стабілізується в цій частині спектру, і тому індій здійснює донорну дію. Талій в халькогенідах свинцю і той же індій, але в SnTe, утворюють резонансні стани всередині валентної зони і являються акцепторами.

I. Елементи варіаційного методу

Якщо розсіювання не є пружним, функція розподілу носіїв отримується шляхом розв'язку інтегрального рівняння. Однак і в цьому випадку нерівноважну частину функції розподілу носіїв можна формально виразити через функції, що відіграють роль часу релаксації. Таких функцій можна ввести дві: одну для ізотермічних ефектів, іншу – як доданок до функції розподілу, пов'язаної із градієнтом температури.

Альтернативою застосування наближення часу

релаксації є використання варіаційного методу.

Розглянемо напівпровідник з однократно зарядженою домішкою. Взаємодію електрона з такою домішкою можна описати екрануючим кулонівським потенціалом

$$V(r) = \frac{e_0}{\chi_0 R}\exp\left(-\frac{r}{d}\right), \qquad (1)$$

де d – дебаївський радіус екранування, χ – статична діелектрична проникність. На великих відстанях такий іон буде створювати потенціал

$$V(r) = \frac{e_0}{\chi_0 r}. \qquad (2)$$

Необхідно зазначити, що розсіювання носіїв на іонізованих домішках у кристалах групи D_3 суттєво анізотропне. Останнє зумовлене не тільки анізотропією електронного спектру носіїв (як, наприклад, в алмазоподібних напівпровідниках) , але і діелектричною сталою χ_{ij}. Вираз виходу носіїв із початкового стану k у довільний інший $k`$ при розсіюванні в борнівському наближенні

$$W_{pp`} = 32\pi^3 e_0^4 \hbar^3 \left\{\chi_{II}^0 g_{II}^2 + \chi_{\perp}^0 g_{\perp}^2 + v^2\right\}^{-2} \delta(\varepsilon`-\varepsilon). \qquad (3)$$

Тут $\chi_{\perp,II}^0$ – компоненти тензора діелектричної сталої, $g = p`-p$, а $v^2 = \frac{\hbar^2}{a^2} = \frac{\pi n_i e_0^2 \hbar^2}{2m_{II}\chi_{II}^{\infty} T_0^2}$ – параметр екранування.

Використовуючи вираз (2), для члену зіткнення, зумовленого домішковим розсіюванням, одержуємо:

$$\left(\frac{\partial f(p)}{\partial t}\right)_1 = 4e_0^4 N \int dp`\varphi_1\left(|p`-p|\right)\delta(\varepsilon`-\varepsilon)\left[f(p`)-f(p)\right], \qquad (4)$$

де $\varphi_i(|g|) = \left\{\chi_{II}^0 g_{II}^2 + \chi_{\perp}^0 g_{\perp}^2 + v^2\right\}^{-2}$, N – концентрація домішкових іонів.

Підставляючи у (4.20) із виразу $f(p`)$, знаходимо

$$\left(\frac{\partial f(p)}{\partial t}\right)_i = \hat{L}_I \Phi = 4e_0^4 N \int dp`\varphi_i\left(|p`-p|\right)\delta(\varepsilon`-\varepsilon)\left[\Phi(p`)-\Phi(p)\right], \qquad (5)$$

Звідси видно, що оператор $\hat{L}_I$ також являється знакосталим і самоспряженим, а його матричні елементи мають вигляд

$$\left(\hat{L}_I\right)_{kk`}^{\beta\beta`} = -2e_0^4 N \iint dp dp`\varphi_I\left(|p`-p|\right)\delta(\varepsilon`-\varepsilon)\varepsilon^{k+k`} \times \left(p_{\beta`}-p_{\beta}\right)\left(p`_{\beta`}-p_{\beta`}\right) f_0(\varepsilon)$$

Обчислення в (5) схоже до обчислення матричних елементів при розсіянні носіїв на оптичних коливаннях гратки. Отже, відмінні від нуля матричні елементи при розсіянні на іонах домішки такі :

$$\left(\hat{L}_I\right)_{xx}^{kk`} = \left(\hat{L}_I\right)_{yy}^{kk`} = \left(\hat{L}_I\right)_{\perp}^{kk`} = -\frac{N}{n_i} Q_I T_0^{k+k`}\left(\frac{\chi_{IiI}^0}{\chi_{\perp}^0}\right)^2 \sum_{\perp}^{(k+k`)}\left(v^2\right), \qquad (6)$$

$$\left(\hat{L}_I\right)_{zz}^{kk`} = \left(\hat{L}_I\right)_{II}^{kk`} = -\frac{N}{n_i} Q_I T_0^{k+k`}\left(\frac{\chi_{II}^0}{\chi_{\perp}^0}\right)\sum_{II}^{(k+k`)}\left(v^2\right).$$

Тут $Q_I = \left(\frac{2\pi m_{II}}{T_0}\right)^{1/2} \frac{e_0^4 n_i^2}{\left(\chi_{II}^0\right)^2}$, а вираз для $\sum_{II,\perp}^{(k+k`)}\left(v^2\right)$ одержано в роботі (1) шляхом розкладу по параметру малості v^2, який , наприклад при $n_i = 5\cdot 10^{15}\ см^{-3}$ і $T_0 \geq 50^{\circ}K$ для p-Te рівний 0,004 [2]. Оскільки всі коефіцієнти $P_{\perp,II}(\alpha), W_{\perp,II}(\alpha), Q_{\perp,II}(\alpha)$ і $\Gamma_{\perp,II}(\alpha)$, які визначають $\sum_{\perp,II}^{k+k`}\left(v^2\right)$, залежать тільки від параметра $\alpha = \left(\frac{m_{\perp}\chi_{\perp}^{II}}{m_{II}\chi_{II}^0 - m_{\perp}\chi_{\perp}^0}\right)^{1/2}$, то для даного напівпровідника вони є відомими. Аналогічний вигляд цих коефіцієнтів наведено у роботі [6], а тут ми даємо тільки їх числові значення для $p-Te$:

$$P_{\perp}(\alpha) = 0.374, W_{\perp}(\alpha) = -0.801, Q_{\perp}(\alpha) = 2.407, \Gamma_{II}(\alpha) = -1.665,$$
$$P_{II}(\alpha) = 0.477, W_{II}(\alpha) = -0.779, Q_{II}(\alpha) = 1,922, \Gamma_{II}(\alpha) = -0.506, \alpha = 0.590. \qquad (7)$$

При низьких температурах ймовірність іонізації некомпенсованих домішок зменшується. Виникає деяка доля нейтральних домішок. Розсіювання електронів цими домішками при енергіях електрона менших за четвертину енергії іонізації [7], можна описати в наближенні часу релаксації

$$\frac{1}{\tau} = \frac{20 N_n \hbar a^*}{m^*}, \qquad (8)$$

де a^* – ефективний борівський радіус $\left(a^* = \frac{\hbar^2\chi}{m^* e_0^2}\right)$.

II. Поведінка рівня Фермі

Кристали PbTe:Tl у визначеній області температур задовольняють умові виродження носіїв при невеликій компенсації. Це дає можливість в теоретичних розрахунках використовувати статистику виродженого електронного газу, що означає, що при знаходженні кінетичних коефіцієнтів рівноважну функцію розподілу $f_0(E)$ можна вважати ступінчастою, тобто вважати енергію всіх носіїв, які дають вклад в електричний струм, рівною енергії Фермі E_F. В цьому випадку функція

розподілу носіїв $f\left(\vec{k}\right)$ помітно відхиляється від рівноважної тільки у вузькому енергетичному інтервалі поблизу рівня Фермі. Тому, використовуючи звичайну варіаційну процедуру, доцільно нерівноважний доданок $\Phi(k) = f(k) - f_0(E)$ шукати у вигляді ряду по степенях $(E - E_F)$, тобто $\Phi(k) = \hbar \sum_n C_n k (E - E_F)^n$, де $\hbar$ – стала Планка, C_n C_n – варіаційні параметри. Рухливість носіїв при цьому

$$\mu = -\frac{e a_0^2}{n\theta}\left(L_{00}\right)^{-1}. \qquad (9)$$

Тут e – заряд електрона, k_0 – стала Больцмана, $\theta = k_0 T$ – температура решітки в енергетичних одиницях, a_0 і L_{00} – варіаційні коефіцієнти (матричні елементи), причому для кейнівського закону дисперсії $a_0 = n\theta$, де n – концентрація носіїв заряду. У випадку пружних зіткнень $\left(L_{00}^{i}\right)_{\text{пружн}} = -\frac{n\theta_{m^*}(E_F)}{\tau_i}$, де $m^*(E_F) = m_0^*\left(1 + \frac{2E_F}{E_g}\right)$ – ефективна маса носіїв на рівні Фермі, m_0^* – ефективна маса на дні зони, τ_i – час релаксації для відповідного і-го пружного механізму розсіювання.

Для подальших розрахунків потрібно встановити характер поведінки рівня Фермі в PbTe, легованому акцепторною домішкою. Енергію Фермі розраховано на основі класичного рівняння електронейтральності для напівпровідника, легованого акцепторною домішкою:

$$p_0 = n_a = N_a - p_a, \qquad (10)$$

де p_0 – концентрація дірок, n_a, p_a – концентрації електронів та дірок на акцепторному рівнях, N_a – концентрація акцепторної домішки.

Розв'язок рівняння електронейтральності дає відомий вираз для рівня Фермі

$$F = E_c \Delta E_g + kT \ln\left[\frac{N_v}{2N_a} + \sqrt{\left(\frac{N_v}{2N_a}\right)^2 + \beta \frac{N_v}{N_a} e^{\frac{E_a - E_v}{kT}}}\right]. \qquad (11)$$

В області низьких температур, де виконується

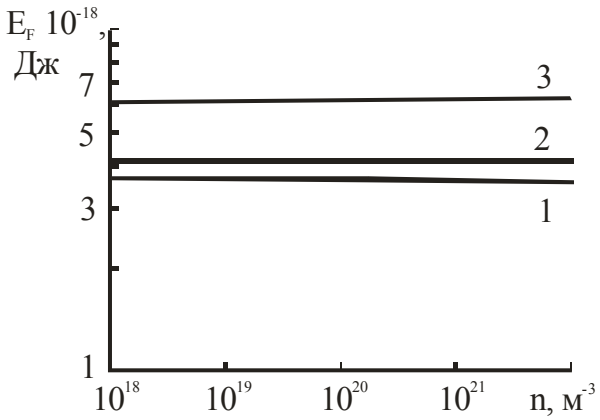


Рис. 1. Залежність енергії Фермі від концентрації легуючої домішки у PbTe:Tl при температурах: 1 – 4,2 К, 2 – 77 К, 3 – 300 К.

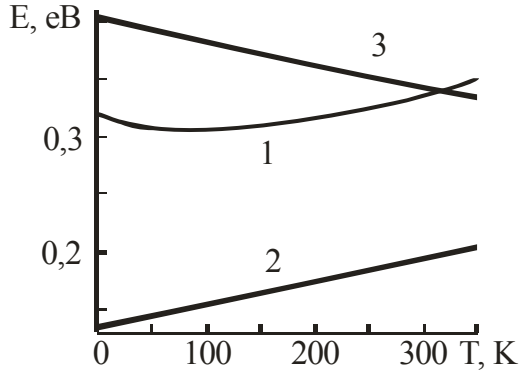


Рис. 2. Температурна діаграма енергетичної зони для телуриду свинцю легованого акцепторною домішкою: 1 – енергія Фермі, 2 – енергія зони провідності, 3 – енергія валентної зони.

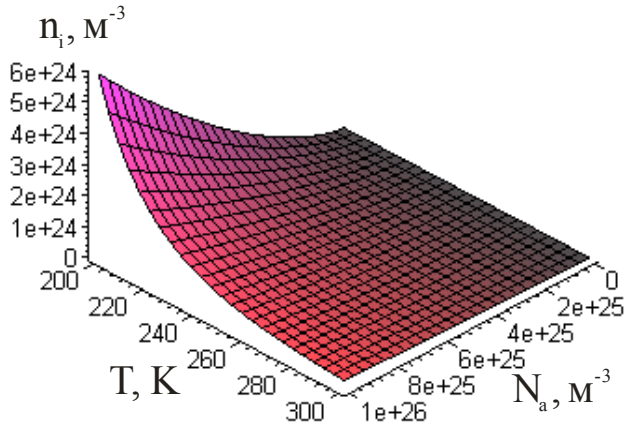


Рис. 3. Тривимірна діаграма залежності власної концентрації n, температури T та концентрації акцепторної домішки N_a для PbTe:Tl.

умова $e^{\frac{E_a - E_v}{kT}} >> \frac{N_v}{N_a}$, (11) спрощується і положення рівня Фермі буде визначатися співвідношенням

$$F = E_c - E_g + \frac{E_a - E_v}{2} + \frac{kT}{2}\ln\frac{\beta N_v}{N_a} = \\ = \frac{E_v + E_a}{2} + \frac{kT}{2}\ln\frac{\beta N_v}{N_a}, \quad (12)$$

та зображене на рис. 2.

При подальшому підвищенні температури концентрація електронів в зоні провідності стає порівняною із концентрацією домішки N_a, і вираз (12) не застосовний. Для достатньо високої температури виконується нерівність $e^{(E_a - E_v)/kT} << N_v / N_a$. При цьому (11) виражається виразом

$$F = E_c - \Delta E_g + kT\ln\frac{N_v}{N_a}, \quad (13)$$

Із умови повної іонізації акцепторної домішки ($p_0 = N_a$) отримано температуру насичення для Tl: T_s=43,9 К. Вона тим нижча, чим менша енергія іонізації $E_c - E_a$, концентрація N_a акцепторної домішки і чим більша маса електронів, яка визначає величину N_v. При малих значеннях $E_c - E_a$ насичення наступає при достатньо низьких температурах.

Аналогічно розраховано температуру іонізації для акцепторної домішки: T_i = 205 К (умова F = E_i).

Видно, що температура T_i, при якій настає власна провідність у акцепторному напівпровіднику, тим нижча, чим менша ширина забороненої зони і концентрація домішки і чим більше значення ефективних мас носіїв заряду.

Таким чином, використовуючи описані наближення, можна дослідити зміни концентрації електронів і положення рівня Фермі в забороненій зоні електронного напівпровідника по всій області зміни температури.

На рис. 1-3 наведено концентраційні та температурні залежності поведінки рівня Фермі для PbTe:Tl.

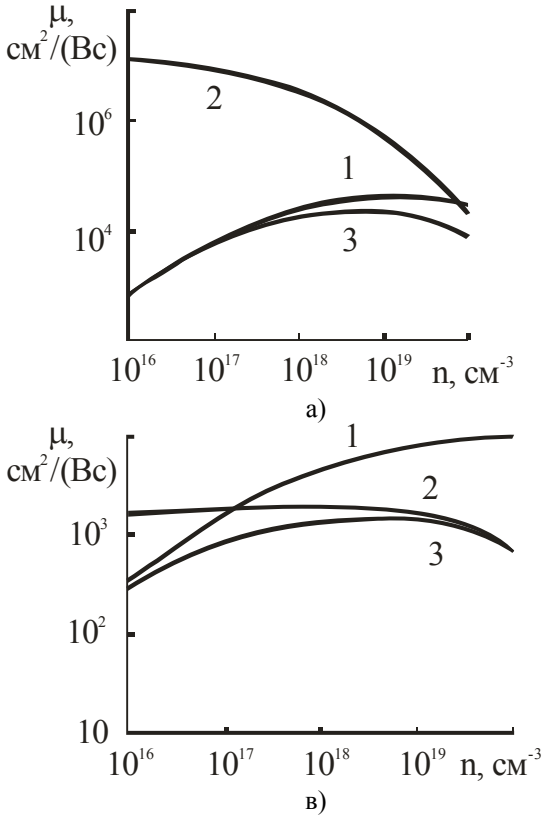
III. Результати та їх обговорення

Розрахований на основі (9) вплив розсіювання на домішці в сумарне розсіювання для кристалів PbTe показано на рис. 4. Крива 1 на цьому рисунку розрахована згідно правила Маттісена:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (14)$$

і враховує сумарне розсіювання всіх механізмів, які мають місце у нелегованому кристалі PbTe. Детальний розрахунок та порівняння з експериментальними значеннями кривої 1 наведено у [22, 28]. Тут індекс і вказує на механізм розсіювання, τ – сумарний час релаксації, τ_i – час релаксації і-ого механізму.

Із аналізу наведених діаграм видно, що внесок розсіювання носіїв на іонах домішки у сумарне розсіювання зменшується при зменшенні



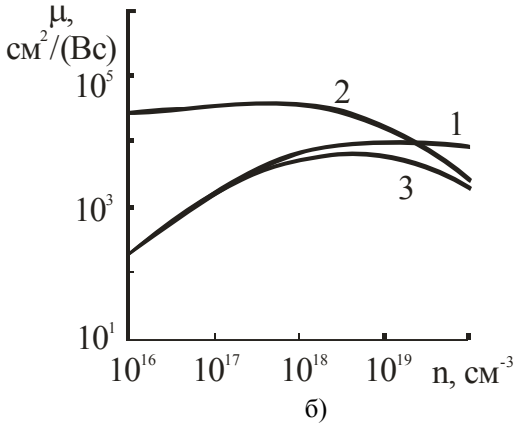


Рис. 4. Залежність рухливості у PbTe від концентрації легуючої домішки при температурі 4,2 К (а), 77 К (б) та 300 К (в) з врахуванням розсіювання:
1 – сумарного згідно правила Маттісена для нелегованого PbTe, 2 – окремо домішкового для PbTe:Tl, 3 – сумарного згідно правила Маттісена для PbTe:Tl.

температури. Це пояснюється тим, що із збільшенням температури кристалу зростає теплова швидкість носіїв заряду, що призводить до послаблення взаємодії носіїв з іонізованими атомами домішки, оскільки зменшується тривалість взаємодії. Крім того, при даній температурі рухливість зменшується з ростом концентрації домішок, яка підсилює ефект розсіювання.

При низьких температурах, коли енергія оптичних фононів недостатня для їх збудження, розсіювання на нейтральних атомах талію у телуриді свинцю разом із розсіюванням на акустичних фононах визначає кінетичні властивості матеріалу. При зростанні температури внесок розсіювання на нейтральних атомах різко зменшується, натомість вплив на сумарне розсіювання дають йонізовані атоми талію, причому цей вплив тим більший, чим вища концентрація домішкового Tl. До температур, порядку температури Дебая, такий внесок у сумарне розсіювання теж зменшується, а в області кімнатних температур він на 3-4 порядки менший від загального вкладу всіх решти видів розсіювання.

Звісно, що вклад різних механізмів розсіювання в сумарний час релаксації залежить від температури кристалу. В процесі зміни енергії носіїв заряду роль одних механізмів розсіювання зменшується, а роль інших зростає, тому характер руху носіїв заряду під дією зовнішнього поля залежить від того, який із механізмів розсіювання є переважаючим у даному інтервалі температур. При дуже низьких температурах можна враховувати тільки розсіювання на нейтральних домішках та на дислокаціях. З підвищенням температури роль цих механізмів зменшується у порівнянні із розсіюванням на іонах домішки. Останній механізм розсіювання, як видно, стає переважаючим, і суттєво впливає на поведінку сумарної рухливості носіїв заряду.

Висновки

1. Приведено елементи варіаційного методу для розрахунку розсіювання носіїв на іонізованих домішках.
2. Досліджено характер поведінки енергії Фермі у телуриді свинцю, легованому акцепторною домішкою талію.
3. Встановлено домінування розсіювання носіїв на йонізованих домішках в області високих концентрацій. Показано, що такий вид розсіювання переважає у більш широкому інтервалі концентрацій (від $5\cdot10^{17}$ см$^{-3}$ і вище) в області високих температур (300 К), і від 10^{19} см$^{-3}$ і вище області низьких температур при 4,2 К.

Автори вдячні проф. Фреїку Д.М. за постановку задач дослідження та інтерес до роботи.

Робота виконана за підтримки проекту ДФФД МОН України № 10/030 (державний реєстраційний номер 0105U007494).

Никируй Л.І. – к.ф.-м.н., завідувач відділом з питань інтелектуальної власності та інновацій, асистент кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Ільків О.В. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла.

[1] Н.П. Гавалешко, П.Н. Горлей, В.А. Шендеровский. *Узкозонные полупроводники: получение и физические свойства*. Наук.думка, Киев. 256 с. (1984).
[2] П.Н. Горлей, В.А. Шендеровский. *Вариационный метод в кинетической теории*. Наукова думка, Киев. 296 с. (1992).
[3] Л.И. Анатычук. *Термоэлементы и термоэлектрические устройства*: *Справочник*. Наукова думка, К. 676 с. (1979).
[4] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbSe, PbSe, PbS*. Наука, М. 384 с. (1968).
[5] *Lead Chalcogenides: Physics and Applications (Optoelectronic Properities of Semiconductors and Superlattices)*. ed. by D.Khokhlov. Taylor & Francis. 720 p. (2002).
[6] Н.Х. Абрикосов, Л.Е. Шелимова. *Полупроводниковые материалы на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$*. Наука, М. 195 с. (1975).
[7] Ф.Ф. Сизов. Твердые растворы халькогенидов свинца и олова и фотоприемники на их основе // *Зарубеж. электрон. Техника*, **24**, сс. 31-48 (1977).
[8] F.F. Sizov. IV-VI narrov-gap superlattice // *Acta Physika Polonica A*, **79**(1), pp. 83-96 (1990).
[9] В.М. Шперун, Д.М. Фреїк, Р.І. Запухляк. *Термоелектрика телуриду свинцю та його аналогів*. Плай, Івано-Франківськ, 250 с. (2000).
[10] П.М. Томчук, И.И. Пинчук. *Вариационный метод в теории кинетических коэффициентов.* Препр. АН УССР, Ин-т физики, **19**, 40 с. (1974).
[11] П.М. Томчук, И.И. Пинчук. *Применение вариационного метода в теории электрон-фононного увлечения в полупроводниках и металах.* Препр. АН УССР, Ин-т физики, **8**. 40 с. (1976).
[12] Д.М. Заячук. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния в теллуриде свинца // *ФТП*, **31**(2), сс. 217–220 (1997).
[13] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. Scattering of current carriers and transport phenomena in lead chalkogenides. I. Theory // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **43**(1), pp. 11-33 (1971).

[14] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. Scattering of current carriers and transport phenomena in lead chalkogenides. II. Experiment // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **43**(2), pp. 453-469 (1971).
[15] Ф.Ф. Сизов, Г.В. Лашкарев, М.В. Радченко, В.Б. Орлецкий, Е.Т. Григорович. Особенности рассеяния носителей тока в узкощелевых полупроводниках // *ФТП*, **10**(6), сс. 1801-1808 (1976).
[16] W. Shimanska, T. Dietl. Electron scattering and transport phenomena in small-gap zinc-blend semiconductors // *J. Phys. and Chem. Solids*, **39**(10), pp. 1025-1040 (1978).
[17] Е. Патли. Сульфид, селенид и теллурид свинца // *Материалы используемые в полупроводниковых приборах*. Мир, М. с. 271-305 (1968).
[18] V.A. Shenderovskii, P.N. Gorley. Warm Electron Conductivity in Lead Chalcogenides // *Phys. Stat. Sol (a)*, **53**(2), pp. K189-K194 (1979).
[19] В.Л. Волков. Электрон-фононное взаимодействие в узкощелевых полупроводниках // *ФТП*, **12**(2), сс. 396-398 (1978).
[20] В.Л. Волков, И.В. Кучеренко, В.Н. Моисеенко, А.П. Шотов. Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах $Pb_{1-X}Sn_XSe$ (x=0,06) p-типа // *ФТП*, **9**(9), сс. 1824-1826 (1975).
[21] И.К. Смирнов. К вопросу о характере непараболичности зоны проводимости и механизме рассеяния носителей тока в сульфиде свинца // *ФТП*, **12**(3), сс. 573-574 (1978).
[22] Л.І. Никируй. Механізми розсіювання носіїв струму та оптимізація термоелектричних властивостей кристалів PbTe, PbSe, PbS n-типу провідності. *Автореферат канд. дис…* Плай, Івано-Франківськ, 18 с. (2004).
[23] Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, Л.Й. Межиловська, В.М. Кланічка, М.О. Галущак, В.М. Шперун. Закони дисперсії та механізми розсіювання носіїв заряду у кристалах n-PbSe // *Український фізичний журнал,* **46**(10), сс. 1083-1086 (2001).
[24] Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, М.А. Рувінський, В.М. Шперун, В.В. Нижникевич. Розсіювання носіїв струму у кристалах халькогенідів свинцю n-типу // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(4), сс. 99-102 (2001).
[25] Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, В.В. Нижникевич. Електрон-електронне розсіювання носіїв у кристалах халькогенідів свинцю n-типу // *Вісник Прикарпатського університету. Фізика. Математика*, **2**, сс. 71-78 (2001).
[26] Д.М. Фреик, Л.И. Никируй, В.М. Кланичка, В.М. Шперун, И. Петрович. Влияние механизмов рассеяния и зонной структуры на термоэлектрические свойства монокристалов халькогенидов свинца // *Термоэлектричество*, **4**, сс. 45-52 (2001).
[27] Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, І.В. Калитчук, В.В. Нижникевич. Особливості зонної структури та механізми розсіювання носіїв заряду електронних кристалів халькогенідів свинцю // *Науковий вісник ЧНУ: Фізика. Електроніка*, **102**, сс. 78-81 (2001).
[28] Freik D.M., Nykyruy L.I., V.M. Shperun. Scattering Mechanisms of Electrons on Monocrystalline PbTe, PbSe and PbS // *Semiconductor physics, quantum electronics and optoelectronics*, **5**(4), pp. 362-367 (2002).
[29] Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, В.В. Нижникевич. Розсіювання електронів на коливаннях гратки у кристалах халькогенідів свинцю // *Фізика і хімія твердого тіла*, **3**(2), сс. 215-220 (2002).
[30] В.М. Кланічка, Л.І. Никируй, А.В. Лисак, С.А. Галігузова. Енергія Фермі халькогенідів свинцю у моделях енергетичних зон Кейна і Діммока та виродження носіїв // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(2), сс. 307-310 (2004).

L.I. Nykyruy, O.V. Iljkiv

Doping Scattering in Lead Telluride Crystals Doped by Thallium (PbTe:Tl)

Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University,
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, E-mail: lyubomyr@mail.ru

The influence of doping scattering on sum scattering in lead telluride crystals doped by thallium are calculated. It is received Fermy energy behavior on doped PbTe:Tl.