

О НЕСООТВЕТСТВИИ ЗНАКА КОЭФФИЦИЕНТА ХОЛЛА И ТЕРМОЭДС В $p\text{-Ag}_2\text{Te}$ ПОСЛЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА

АЛИЕВ Ф.Ф., ТАИРОВ Б.А., ГОДЖАЕВ Э.М.*, ОРУДЖЕВ Г.С.*

Институт физики НАН Азербайджанской Республики

**Азербайджанский Технический Университет*

Исследованы электропроводность σ , коэффициент Холла R и термоэдс α_0 в $p\text{-Ag}_2\text{Te}$ в температурном интервале 300-550 К. Обнаружено, что в интервале температур 420-550 К имеется несоответствие знака R и α_0 . Установлено, что несоответствие знака R и α_0 происходит за счет включения механизмов рассеяния с параметрами r_{0ac}, r_{0o}, r_{0d} и увеличения эффективных масс электронов и дырок при $\alpha \rightarrow \beta$ переходе примерно в 1,5 раза.

Нами была опубликована статья [1], которая посвящена изучению температурных зависимостей коэффициента Холла $R(T)$, электропроводности $\sigma(T)$ и термоэдс $\alpha_0(T)$ в $p\text{-Ag}_2\text{Te}$ в интервале температур 4-300 К. Полученные экспериментальные данные о $R(T)$, $\sigma(T)$ и $\alpha_0(T)$ интерпретировались в рамках модели с двумя типами носителей заряда. В работах [2-3] показано, что $\alpha \rightarrow \beta$ переход в Ag_2Te сопровождается дополнительными переходами $\alpha \rightarrow \alpha'$ и $\beta \rightarrow \beta'$ примерно по схеме $\alpha_{385} \rightarrow \alpha'_{405} \rightarrow \beta'_{420} \rightarrow \beta_{440\text{K}}$. Для изучения влияния фазового перехода на электрические и термоэлектрические свойства Ag_2Te , были исследованы серии образцов p -типа в интервале температур 300-550 К и образцы получены по единой технологии [1].

Результаты исследования показывают, что знаки $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ до $\alpha' \rightarrow \beta'$ перехода не изменяются и по обоим эффектам материал показывает n -тип проводимости. После перехода знак R остается по-прежнему, а знак α_0 изменяется с n - на p , т.е. происходит несоответствие знаков R и α_0 (рис. 1). Выявление причины несоответствия R и α_0 требует комплексное проведение расчетов с учетом возможных механизмов рассеяния с вынесением изменения эффективных масс носителей заряда в целом.

В работе [4] установлено, что $\alpha \rightarrow \beta$ переход в Ag_2Te сопровождается возрастанием числа вакансий серебра в междоузлиях, играющих роль акцепторных центров. Поэтому в указанном интервале температур проводимость является смешанной.

Для выявления причины несоответствия знаков R и α_0 проведены расчеты, для двухзонной модели со сферическими изоэнергетическими поверхностями. Выражения σ , R и α_0 в области смешанной проводимости можно представить, как функции отношения дырочной и электронной составляющих проводимости ($a = \sigma_p / \sigma_n$) [5],

$$\sigma = \sigma_1 \frac{b^{1/2}(a+1)}{a^{1/2}(b+1)}, \quad (1)$$

$$R = \frac{A}{n_i e} \frac{(ab)^{1/2}(a/b-i)}{(a+1)^2}, \quad (2)$$

$$\alpha_0 = \frac{k_0}{2e} \left[\frac{\varepsilon_0(a-1)}{(a+1)} + \chi - \ln a \right], \quad (3)$$

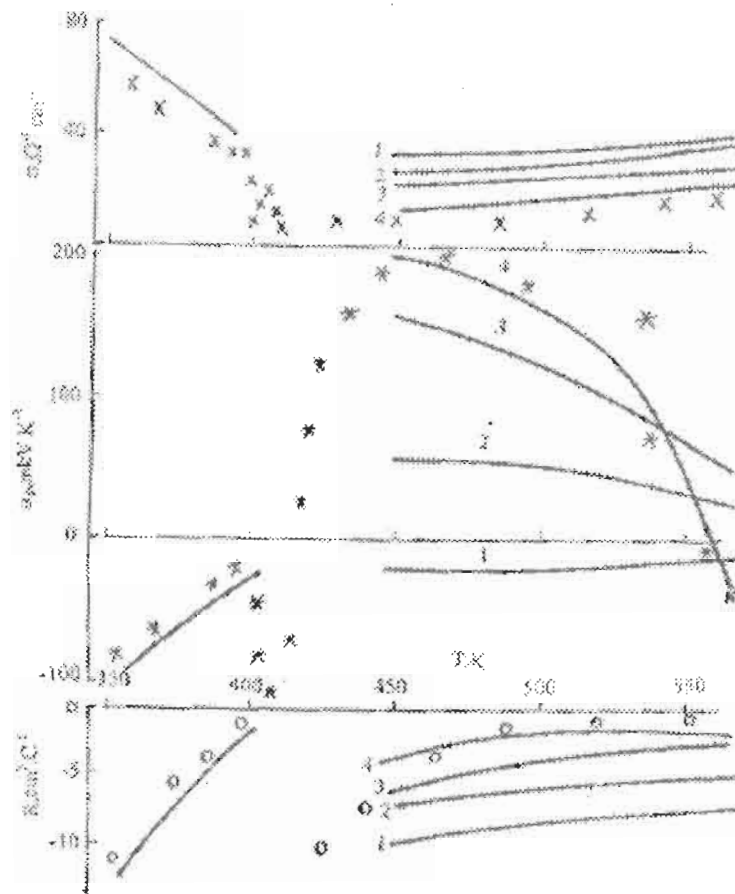


Рис.1 Температурные зависимости электропроводности σ , термоэдс α_0 и коэффициента Холла в p-Ag₂Te. Сплошные линии расчетные.

где $\sigma_i = en_i(U_n + U_p)$, $b = \frac{U_n}{U_p}$, $\varepsilon_0 = \left(\frac{\varepsilon_s}{k_0 T} \right) + r_n + r_p$, $\chi = r_p - r_n + \ln \left[b \left(\frac{m_n}{m_p} \right)^{3/2} \right]$, n_i — собственная концентрация, U_n , U_p , m_n и m_p — подвижности и эффективные массы электронов и дырок, A-фактор Холла (для стандартной зоны $A = \frac{F_{3/2} F_{2r+1/2}}{(F_{r+1})^2}$, для нестандартной зоны $A = I_{3/2,0}^0 I_{2r+1/2,4}^0 (I_{r+1,2}^0)^2$, где $F_r(\mu^*)$ и $I_{n,k}^m(\mu^*, \beta)$ — одна- и двухпараметрические интегралы Ферми, $\beta_0 = k_0 T / \varepsilon_s$ — параметр, характеризующий нестандартность зоны, $\mu^* = \mu / k_0 T$ — приведенный химпотенциал [6]), r_n и r_p — факторы рассеяния.

Температурная зависимость подвижности имеет вид,

$$U = \frac{e}{m^*} \tau(T), \quad (4)$$

где m^* — эффективная масса носителей заряда, τ — время релаксации.

Входящие в (1)–(3) U_n и U_p рассчитаны следующим образом.

При существовании двух механизмов рассеяния с параметрами r_{0i} и r_{0ac} эффективное время релаксации имеет вид [1],

$$\tau_{\text{eff}} = \frac{\tau_{oi}(T)\tau_{oac}(T)\left(\frac{\varepsilon}{k_0 T}\right)^{r_{oac}-1/2}}{\tau_{oi}(T) + \tau_{oac}(T)\left(\frac{\varepsilon}{k_0 T}\right)^{r_{oac}-r_{oi}}}, \quad (5)$$

Для определения $\tau_{oi}(T)$ применима следующая формула

$$\tau_{oi}(T) = \frac{\chi_0 (2m_n)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi e^4 N_i F}, \quad (6)$$

где χ_0 - диэлектрическая постоянная кристалла,

$$F = \ln(1 + \xi) - \frac{\xi}{1 + \xi}; \quad \xi = 4k^2 r_s, \quad (7)$$

r_s - радиус экранировки, который для невырожденных полупроводников определяется как,

$$r_s = \frac{\chi_0 k_0 T}{4\pi e^2 n_0}, \quad (8)$$

n_0 -концентрация носителей заряда (для стандартной валентной зоны $p = \frac{(2m_p k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} F_{3/2}(\mu^*)$, для нестандартной зоны проводимости $n = \frac{(2m_n k_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} I_{3/2}^0(\mu^*, \beta_0)$, (закон дисперсии электронов в β -Ag₂Te подчиняется кейновской модели [7])) и N_i -концентрация ионов примеси [6].

Выражение $\tau_{oac}(T)$ для стандартной и нестандартной зоны имеет вид [1],

$$\tau_{oac}(T) = \frac{9\pi}{2} \frac{\rho U_0^2 \hbar^4}{C^2 (2m_n k_0 T)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T}\right)^{-1/2}, \quad \tau_{oac}(T) = \frac{9\pi}{2} \frac{\rho U_0^2 \hbar^4}{C^2 (2m_p k_0 T)^{3/2}}, \quad (9)$$

где ρ -плотность кристалла, C -константа взаимодействия носителей заряда с колебаниями решетки, U_0 -скорость звука в кристалле. Установлено, что C связана с константой деформационного потенциала $E_d = \frac{2}{3}C$ [1]. Учитывая значения

$$\chi_{0\beta} = 14, \rho_\beta = 7,64 \text{ kg} \cdot \text{cm}^{-3}, \quad U_{0\beta} = 3,5 \cdot 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}, E_d = 10 \text{ eV}, \quad m_{n\beta} = 0,03 \quad [7] \quad \text{и}$$

$$m_{p\beta} = 0,12 [8], \text{ а также } \mu \approx -\frac{\varepsilon_g}{2} + \frac{3}{4} k_0 T \ln \frac{m_n}{m_p} \text{ (пренебрегая малым отклонением). После}$$

вычисления $\tau_{oi}(T)$ (6) F и ξ (7), r_s (8), $\tau_{oac}(T)$ (9) и учитывая их численные значения в формуле (5) определены τ_{eff} (I). Затем с помощью (4) определены $U_n(T)$ (для нестандартной зоны) и $U_p(T)$ (для стандартной зоны) (рис. 2(1)).

Собственная концентрация n_i вычисляется по формуле

$$n_i = 4,9 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_{n\beta} m_{p\beta}}{m_0^2} \right)^{3/4} T^{3/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2k_0 T}\right), \quad (10)$$

где $\varepsilon_g = 0,12 \text{ eV}$ [7].

Подставляя значения $U_n, U_p, n_\beta, p_\beta, n_i$ и ε_g в (1)-(3) рассчитаны $\sigma(T), R(T)$ и $\alpha_\phi(T)$ (рис. 1(1)).

Расчеты показывают, что учёт вклада рассеяния на ионах примеси (ее вклад незначителен) и на акустических колебаниях решетки не приводит к соответствию экспериментальных и теоретических кривых (рис. 1 (1)). Поэтому к расчету прибавляется

рассеяния носителей заряда на оптических колебаниях решетки. При $k_0 T \gg \hbar \omega$ и в случае стандартной зоны время релаксации при рассеянии на оптических фононах выражается [6],

$$\tau_{00}(T) = \frac{\sqrt{2} M \Omega_0 (\hbar \omega_0)^2}{4\pi e^4 (m_p k_0 T)^{1/2}} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T} \right)^{1/2}, \quad (11)$$

где $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ — приведенная масса ионов в элементарной ячейке, Ω_0 — объем элементарной ячейки и ω_0 — предельная частота продольного оптического фонона. Учитывая значения $\tau_{00}(T)$ в (4) определяем U_{00} (рис. 2(2)).

В случае нестандартной зоны при рассеянии на оптических фононах U_{00} определяется как,

$$U_{00} = \frac{3^{1/3} M \Omega_0 \omega_0^2 \hbar^3 n^{1/3}}{16\pi^{4/3} e e^* k_0 T m_n^2 f_{op}} \frac{I}{f_{op}}, \quad (12)$$

где e^* — эффективный заряд, f — фактор, учитывающий влияние на вероятность рассеяния [9].

При существовании смешанных механизмов рассеяния с параметрами Γ_{0ac} и Γ_{00} подвижность носителей заряда

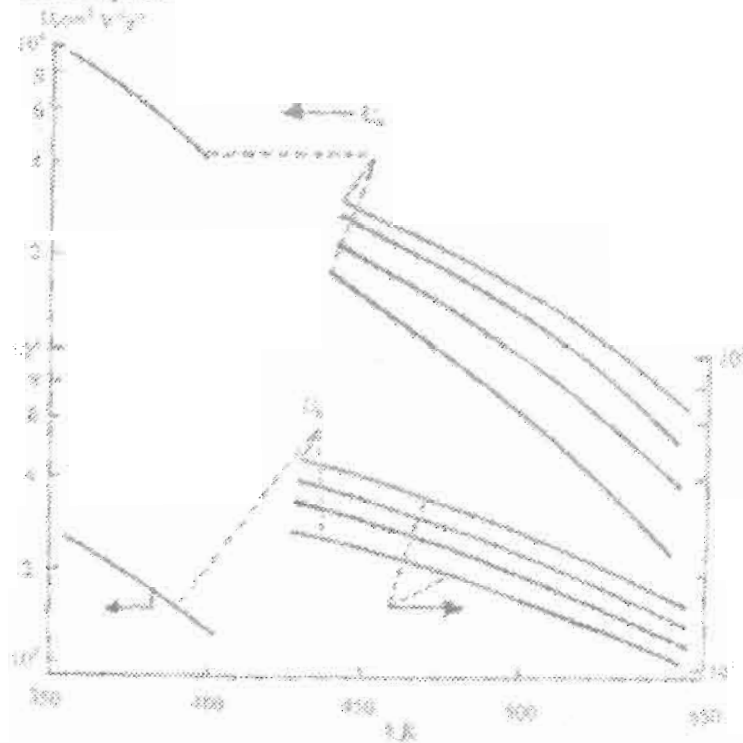


Рис.2 Температурные зависимости подвижности электронов (U_n — для нестандартной зоны) и дырок (U_p — для стандартной зоны). Обозначения те же, что на рис. 1.

$$U = \left(\frac{I}{U_{0ac}} + \frac{I}{U_{00}} \right)^{-1} \quad (13)$$

После учета указанных механизмов рассеяния расчеты по формулам (1)–(3) качественно соответствуют экспериментальным данным (рис. 1 (2)). Анализ вышеприведенных расчетов показывает, что для количественного соответствия экспериментальных и расчетных кривых в (13) надо учитывать новые центры рассеяния.

В работе [4] показано, что скачкообразное изменение кинетических коэффициентов Ag_2Te при $\alpha \rightarrow \beta$ переходе обусловлены не только изменениями зонных параметров, но и с концентрациями электроактивных и нейтральных дефектов. Авторы [10] сообщают, что Ag_2Te характеризуется дефектами (по-видимому, эти дефекты являются точечными) Френкеля, вакансиями Ag в междоузлиях, появляющимися за счет статистически расположенных атомов Ag в подрешетке. Из выводов [4,10,11] вытекают, что ходы $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_o(T)$ при $T > 420$ К также связаны с точечными дефектами, которые образуются при $\alpha \rightarrow \beta$ переходе. Поэтому в (13) можно учесть вклад подвижности U_{od} , рассчитанный с помощью времени релаксации при механизме рассеяния на точечных дефектах в случае стандартной зоны как [6],

$$\tau_{od}(T) = \frac{\pi \hbar^4}{(2m_n k_0 T)^{1/2} m_n V_o^2 N_d} \left(\frac{\varepsilon}{k_0 T} \right)^{-1/2}, \quad (14)$$

где V_o - постоянная, характеризующая амплитуду δ - потенциала, N_d - концентрация точечных дефектов, которая определяется в работе [11]. Учитывая (14) в (4), определена $U_{od}(T)$. При этом U для всех механизмов рассеяния определяется как

$$U = \left(\frac{1}{U_{oac}} + \frac{1}{U_{oo}} + \frac{1}{U_{od}} \right)^{-1}. \quad (15)$$

Расчеты показывают, что с учетом (15) (рис. 1(3)) и при значении $m_{\beta\beta} = 0,18$ получается полное соответствие экспериментальных и теоретических кривых $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_o(T)$ (рис. 1(4)).

На основе вычисленных данных видно, что каждое включение и вычисление новых механизмов рассеяния, а также увеличение эффективной массы дырок приводит к сближению экспериментальных и расчетных кривых. Здесь также играет роль рассеяние фононов на носителях заряда для р-типа проводимости. При этом $m_{\beta\beta}$ максимум увеличивается в 1,5 раза (как $m_{n\beta}/m_{n\alpha}$ [7]), но это увеличение существенно влияет на $\alpha_o(T)$, чем $\sigma(T)$, $R(T)$. Из формулы (2) и (3) видно, что при условии $p > n$ и $U_n > U_p$ получается, что $nU_n^2 > pU_p^2$, тогда из формулы (2) $R < 0$, т.е. в $R(T)$ доминирует знак n . А за счет $m_p > m_n$ по формуле (3) получается, что $\alpha_o(T) > 0$ и доминирует знак p .

Таким образом несоответствие знаков коэффициента Холла и термоэдс в р- Ag_2Te в температурном интервале 420-550 К сопровождается слияниями механизмов рассеяния с параметрами r_{oac} , r_{op} и r_{od} и с увеличением эффективной массы электронов и дырок при $\alpha \rightarrow \beta$ переходе примерно в 1,5 раза.

- [1] Алиев Ф.Ф., Керимова Э.М., Алиев С.А. ФТП. 2002, т.36, №8, pp.932-936.
- [2] Алиев С.А., Алиев Ф.Ф., Пашаев Г.П. Изв. РАН. Неорганич. материалы. 1993, 29, 8, с.1073-1077.
- [3] Алиев С.А., Алиев Ф.Ф., Гасанов З.С. ФТТ. 1998, т.40, №9, с.1693-1697.
- [4] Алиев С.А., Алиев Ф.Ф. Изв. РАН. Неорганич. материалы. 1989, т.25, №2, с.241-246.
- [5] Березин В.М., Вяткин Г.П., Конев В.Н., Карих П.И. ФТП. 1984, т.18, №2, с.312-315.
- [6] Аскеров Б.М. Кинетические эффекты в полупроводниках. Л., Наука. 1970, 303 с.
- [7] Алиев С.А., Алиев Ф.Ф. Изв. АН СССР, Неорганич. материалы. 1985, т.21, №11, с.1869-1872.
- [8] Алиев С.А., Алиев Ф.Ф. Изв. АН СССР, Неорганич. материалы. 1988, т.24, №2, с.341-343.

- [9] Алиев Т.А., Гашимова Ф.М., Алиев С.А., Гаджиев Т.Г., Алиев Э.М., Алиев М.И. ФТП. 1971, т.5, в.2. с.323-325.
- [10] Andre A. and Simon C. J. Phys. Chem. 1983. 42. 2. p. 95-110.
- [11] Алиев Ф.Ф. Док. АН Азерб. 2000. Т. LVI, №1-3. с.85-90.

FAZA KEÇİDİNDƏN SONRA - HOLL ƏMSALI İLƏ TERMO E.H.Q.-NİN İŞARƏLƏRİNİN UYĞUNSUZLUĞU HAQQINDA

ƏLİYEV F.F., TAHİROV B.A., QOCAYEV E.M., ORUCOV Q.S.

p-Ag₂Te-da elektrikkeçirmə σ , Holl R və termoe.h.q. α_0 əmsalları 300-500K temperatur intervalında tədqiq olunmuşdur. 420-550 K temperatur intervalında R və α_0 -ın işarəsinin uyğunlaşmaması müəyyənənmişdir. Alınmış eksperimental nəticələr izoenergetik səthin quruluşunun sferik halı üçün ikizonalı model əsasında izah olunmuşdur.

Hesablama və eksperiment nəticələri, yükdaşıyıcıların akustik, optik qəfəs rəqslərindən və defektlərdən səpilməsi, elektron və deşiklərin $\alpha \rightarrow \beta$ faza keçidində 1,5 dəfə artması nəzərə alınmışda uyğunlaşmışlar.

ABOUT DIFFERENCY OF HALL COEFFICIENT AND THERMAL POWER SIGHS OF p-Ag₂Te AFTER THE PHASE TRANSITION

ALIEV F.F., TAIROV B.A., QODJAEV E.M., ORUDJOV Q.S.

The electrical conductivity σ , Hall coefficient R and thermal power α_0 of p-Ag₂Te in 300-550K-temperature interval were investigated. It was observed, that in 420-550K-temperature interval the Hall coefficient and thermal power signs are different. The obtained results were interpreted in framework of two-bound model with spherical isoenergetic surface. It was established, that the difference of Hall coefficient and thermal power signs are the result of the inclusion of scattering mechanism with r_{ac}, r_{ad}, r_{ad} parameters and by increasing of effective mass of electrons and holes at $\alpha \rightarrow \beta$ transition for one-half time.