

## РЕЗОНАНСНАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРОВ ОТРАЖЕНИЯ $PbSnTe$ , ОБУСЛОВЛЕННАЯ ЭФФЕКТАМИ ЛОКАЛИЗАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Ю.А. Пусеп, М.П. Синюков

Обнаружена резонансная структура в спектрах отражения твердых растворов  $PbSnTe$  в области полосы остаточных лучей, которая связывается с локализованным состоянием свободных носителей.

При исследовании проводимости твердых растворов халькогенидов свинца-олова было установлено, что при высоких температурах ( $T > 300$  К) она уменьшается настолько, что нарушается соотношение Иоффе — Регеля, согласно которому длина свободного пробега электрона должна быть больше его длины волны<sup>1</sup>. Это свидетельствует о локализации части электронных состояний. Локализационные эффекты могут быть обусловлены состояниями, возникающими в результате деформации электроном ближайшего кристаллического окружения собственного дефекта структуры  $PbSnTe$ <sup>2, 3</sup>. Такому взаимодействию электрона с решеткой способствует мягкость фононного спектра твердых растворов  $PbSnTe$ . В них было обнаружено "размягчение" фононных мод, вызывающее структурный фазовый переход<sup>4, 5</sup>. Сообщалось также о наблюдении солитонов решетки<sup>6</sup>, которые сами по себе могут способствовать локализации носителей.

В настоящей работе мы сообщаем о наблюдении резонансной структуры в области полосы остаточных лучей, обусловленной локализованными носителями.

Были исследованы спектры отражения эпитаксиальных пленок и объемных образцов твердых растворов  $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$  в диапазоне длин волн от 25 до 1000 мкм (на фурье-спектрометре Bruker IFS-113V). Спектры записывались при температурах 10 — 500 К на образцах  $p$ -типа с холловскими концентрациями свободных носителей  $10^{16} - 10^{19}$  см<sup>-3</sup> (измерены при  $T = 77$  К). Примеси в образцы специально не вводились.

Изменение спектров отражения с температурой представлено на рис. 1. При низких температурах наблюдается отражение, обусловленное плазменными колебаниями свободных носителей, которое хорошо описывается классической теорией Друде. Осцилляции отражения в области частот, больших плазменной ( $\omega_p$ ) связаны с интерференцией света в пленке. Обращает на себя внимание сильное уменьшение отражательной способности при  $\omega < \omega_p$ , а также появление резонансной структуры, показанной на рисунке стрелкой, в диапазоне температур 200 — 400 К, которая исчезает при дальнейшем повышении температуры.

Появление аналогичной особенности в спектрах прослеживается и с изменением концентрации свободных носителей. На рис. 2 приведены спектры отражения образцов с различной концентрацией носителей, записанные при комнатной температуре. При малой концентрации ( $N = 10^{16}$  см<sup>-3</sup>) в спектре видна полоса остаточных лучей, заключенная в интервале частот ( $\omega_{TO}$ ,  $\omega_{LO}$ ) — поперечных и продольных оптических колебаний решетки. Согласно<sup>7</sup>  $\hbar\omega_{TO} = 0,004$  эВ, а  $\hbar\omega_{LO} = 0,014$  эВ, что хорошо соответствует области остаточных лучей на рис. 2. Образцы с  $N \gtrsim 10^{19}$  см<sup>-3</sup> характеризуется отчетливым плазменным краем отражения без особенностей. В промежуточном случае, при увеличении числа носителей коэффициент отражения в полосе остаточных лучей сначала падает до значения  $\approx 0,4$ , а затем возрастает с появлением резонансной структуры при энергии кванта  $\approx 0,015$  эВ.

Таким образом форма спектров отражения образцов с концентрацией носителей  $10^{17} - 10^{18}$  см<sup>-3</sup> при температурах 200 — 400 К не объясняется с помощью теории Друде, в которой учитывается вклад в диэлектрическую функцию колебаний решетки и плазменных колебаний свободных носителей заряда. Наблюдаемую структуру спектров отражения можно описать путем учета вклада резонансного состояния в качестве которого, в простейшем приближении, можно использовать диэлектрическую функцию линейного осциллятора, характеризуемого параболической формой потенциала. У нас нет оснований рассматривать другую, более сложную модель,

так как нет данных, позволяющих судить о форме локализационного потенциала. В свете результатов, полученных нами в <sup>1</sup> такое резонансное состояние может быть обусловлено локализованными электронами. Тогда диэлектрическая функция кристалла примет вид:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left[ 1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - i\omega/\tau} + \frac{\omega_{LOC}^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \right], \quad (1)$$

где  $\epsilon_{\infty}$  — высокочастотная диэлектрическая постоянная,  $\Gamma$  — затухание решеточных колебаний,  $\tau$  — время релаксации носителей по импульсу. Последнее слагаемое в (1) есть вклад локализованных состояний, характеризуемых частотой  $\omega_{LOC}$ , резонансной частотой  $\omega_0$  и затуханием  $\gamma$ . Спектры отражения, вычисленные с помощью (1) приведены на рис. 1 и 2 штриховыми линиями. Видно, что они хорошо описывают экспериментальные спектры. При этом энергии, соответствующие частотам фонового спектра полагаются равными цитируемым ранее значениям, а резонансная энергия локализованных состояний оказалась равна  $\hbar\omega_0 = 0,014$  эВ. Параметрами расчета, изменяющимися от образца к образцу и с температурой являются значения частот  $\omega_p = \omega_{LOC}$ , а также величины затуханий  $\Gamma$ ,  $\hbar/\tau$ ,  $\gamma$ . Значения  $\Gamma$  и  $\hbar/\tau$  растут с увеличением концентрации свободных носителей и температуры, причем  $\Gamma$  достигает при этом значения  $\hbar\omega_{LO}$  (аналогичное явление наблюдалось при исследовании ИК-отражения PbTe<sup>8</sup>). Затухание, характеризующее локализованное состояние практически не менялось.

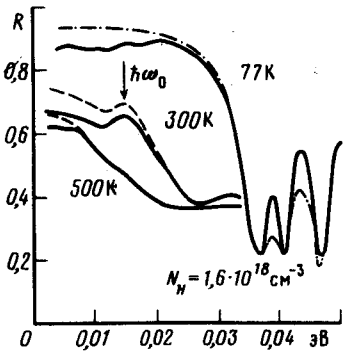


Рис. 1. Спектры ИК-отражения образца Pb<sub>0,8</sub>Sn<sub>0,2</sub>Te с холловской концентрацией  $N_H = 1,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , записанные при различных температурах. Штрих пунктирная кривая рассчитана с помощью теории Друде, штриховые линии — расчет с учетом вклада локализованных состояний

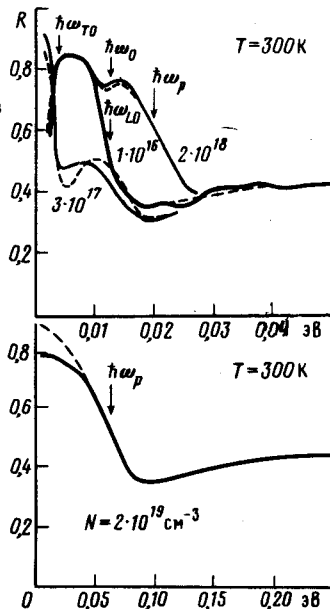


Рис. 2. Спектры ИК отражения Pb<sub>0,8</sub>Sn<sub>0,2</sub>Te, записанные для образцов с различной концентрацией свободных носителей. Цифрами приведены значения холловской концентрации. Штриховые линии рассчитаны с учетом вклада локализованных состояний с помощью выражения (1)

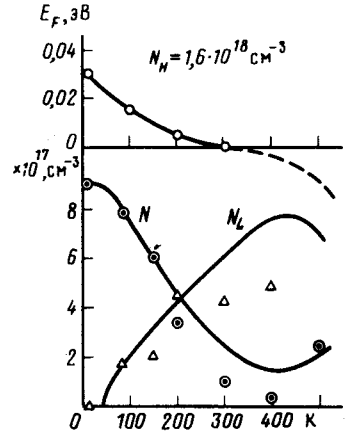


Рис. 3. Температурная зависимость концентрации свободных (кружки) и локализованных (треугольники) носителей заряда, полученная подгонкой спектров, рассчитанных по (1) к экспериментальным спектрам отражения. Кривые вычислены по (2) с параметрами:  $N_{SO} = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $E_0 = 0,04$  эВ. В верхней части рисунка приведена температурная зависимость энергии Ферми, определенная с помощью эффекта Мосса — Бурштейна

Величины  $\omega_p$  и  $\omega_{LOC}$  связаны с числом свободных и локализованных электронов соответственно. Оказалось, что с повышением температуры  $\omega_p$  уменьшается, а  $\omega_{LOC}$  — растет. Наблюдаемое изменение числа свободных и локализованных носителей с температурой свидетельствует, что локальный уровень располагается на фоне разрешенных состояний. Степень его заполнения можно оценить с помощью известного соотношения, определяющего одночастичное заполнение примесного уровня электронами <sup>9</sup>:

$$N_L = \frac{N_{s0}}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_0 - E_F}{kT}\right)}, \quad (2)$$

где  $N_{s0}$  — максимально возможное число локализованных состояний в решетке полупроводника,  $E_0$  — энергия локализованного состояния. Это соотношение, через энергию Ферми ( $E_F$ ), связывает число локализованных электронов с числом свободных электронов. В формуле (2) не учитывается распределение электронов по уровням в яме, которое приводит к незначительному изменению предэкспоненциального множителя при высоких температурах.

На рис. 3 представлены зависимости концентрации свободных ( $N$ ) и локализованных ( $N_L$ ) носителей от температуры, определенные по спектрам отражения и вычисленные согласно (2). Концентрация свободных носителей связана с  $\omega_p$  соотношением  $\omega_p^2 = 4\pi e^2 N / m_s \epsilon_\infty$ , где  $m_s$  — эффективная масса проводимости, температурная зависимость которой была измерена в <sup>10</sup>. Значения  $\epsilon_\infty$  определялись по величине отражательной способности в высокочастотной области спектров, а энергия Ферми — по сдвигу Мосса — Бурштейна. Величины концентрации локализованных носителей приведены на рис. 3 в относительных единицах, так как мы не знаем конкретный вид связи  $\omega_{LOC}$  с  $N_L$  (очевидно, что  $\omega_{LOC}^2 \sim N_L$ ). Как следует из рисунка, с ростом температуры происходит увеличение числа локализованных носителей и, как следствие, уменьшение числа свободных носителей заряда. Зависимости, рассчитанные по (2) удовлетворительно описывают наблюдаемое изменение  $N$  и  $N_L$  с температурой. Таким образом, температурное изменение параметров, определяющих вид спектров ИК-отражения согласуется с предположением о возникновении локализованных электронных состояний в кристаллической решетке PbSnTe.

Благодарим Э.Г. Батыева за полезные обсуждения вопросов, касающихся эффектов локализации, а также А.Г. Белова и А.И. Белогорохова за помощь, оказанную при записи спектров.

#### Литература

1. Неизвестный И.Г., Пусеп Ю.А., Синюков М.П. ФТТ, 1986, **28**, 3197.
2. Каган Ю., Кикоин К.А. Письма в ЖЭТФ, 1980, **31**, 367.
3. Волков Б.А., Панкратов О.А. ДАН СССР, 1980, **255**, 93.
4. Nishi S., Kawamura R., Murase K. Phys. St. Sol. (b), 1980, **97**, 581.
5. Белогорохов А.И., Белов А.Г., Неизвестный И.Г., Пусеп Ю.А., Синюков М.П. ЖЭТФ, 1987, **92**, 869.
6. DeFazio B., Daughton W.J. Phys. Lett., 1977, **62A**, 203.
7. Takaoka S., Hamaguchi T., Shimomura S., Murase K. Sol. St. Comm., 1985, **54**, 99.
8. Perkowitz S. Phys. Rev. B, 1975, **12**, 3210.
9. Зеегер К. Физика полупроводников, М.: Мир, 1977.
10. Neizvestny I.G., Pusep Yu.A., Sinyukov M.P. Sol. St. Comm., 1984, **52**, 485.

Институт физики полупроводников

Академии наук СССР

Сибирское отделение

Поступила в редакцию

8 декабря 1986 г.

После переработки

30 марта 1987 г.