

ОБЪЯСНЕНИЕ "ИЗОСТРУКТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА" В $Pb_{1-x}Sn_xTe(In)$

В. С. Виноградов

Резкое уменьшение постоянной решетки $Pb_{0,78}Sn_{0,22}Te(In)$ в интервале 0,7 – 0,8 ат.% In объясняется деформацией решетки при заполнении электронами уровня In. Определен потенциал деформации $E_1 \cong 15$ эВ.

В [1 – 3] исследовалось влияние примеси индия на различные характеристики $Pb_{0,78}Sn_{0,22}Te$. Было установлено [1], что при критической концентрации $c = 0,6$ ат.% In происходит изменение типа проводимости от дырочного ($c < 0,6$ ат.%) к электронному. При несколько большей концентрации (в интервале $c = 0,7 – 0,8$ ат.%) наблюдалось резкое уменьшение постоянной решетки a , которая до этого медленно увеличивалась с ростом концентрации In. Внутри интервала (при $c = 0,72$ ат.%) обнаружены две фазы, различающиеся значениями a . Другим характерным изменением, которое наблюдалось только в области $c > 0,7$ ат.%, было расщепление в оже-спектрах линий In на две компоненты [2]. Так как скачок постоянной решетки не сопровождался изменением симметрии, то это явление было названо в [1] изоструктурным фазовым переходом.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы объяснить скачок постоянной решетки в $Pb_{1-x}Sn_xTe(In)$ с помощью новой модели состояний In [4, 5]. Согласно [4, 5], уровень In отщепляется от р-зон теллура слабой периферической частью потенциала возмущения, возникающего при замене Pb на In. Волновая функция состояния представляет собой симметричную комбинацию шести р-функций атомов Te, окружающих In. Уровень может содержать $n = 0, 1$ и 2 электрона. Все эти возможности схематически изображены на рис. 1. Состояние с $n = 1$ является нейтральным относительно решетки.

Когда примесный уровень заполняется одним или двумя электронами, решетка вокруг примеси деформируется, и уровень заглубляется. Эксперимент свидетельствует, что наименьшей энергией обладает состояние с $n = 2$ [6].

Деформацию решетки вокруг примеси можно рассчитать, минимизируя полную энергию системы по смещениям ионов. В рассматриваемом случае волновая функция (ВФ) In ортогональна ВФ зоны проводимости, и конфигурационная кривая для примесного состояния имеет вид параболы [4, 5, 7]. Учитывая взаимодействие электронов с акустическими модами, получим в минимуме параболы для смещений решетки $u(r)$

$$\operatorname{div} u(r) = -n(E_1/\rho v_{||}^2) \cdot \Psi^2(r), \quad (1)$$

где ρ – плотность, $v_{||}$ – скорость продольного звука, E_1 – потенциал деформации, $n = 1, 2$, $\Psi(r)$ – нормированная на единицу ВФ примесного состояния. Основной вклад в нее дают зона легких (lh) и тяжелых (hh) дырок. Если вклад одной из них преобладает, вероятнее всего hh , то $\Psi(r) \approx (a/2\pi)^{1/2} r^{-1} \exp(-ar)$, $a \approx [2m_{hh}(E_c - E_{hh})/\hbar^2]^{1/2}$. При выводе (1) электрон-электронным взаимодействием (при $n = 2$) пренебрегалось. Выражение вида (1) возникает также в теории акустического полярона [8].

Перечисленные экспериментальные факты можно объяснить следующим образом. При увеличении c в области $c < 0,6$ ат.% In преимущественно замещает ионы Pb, и концентрация дырок уменьшается приблизительно линейно с c . Начиная с $c \sim 0,6$ ат.% заполняются вакансии Pb, концентрация дырок резко уменьшается, и происходит инверсия знака носителей. Примеси In переходят из состояния с $n = 0$ в состояние, в котором половина из них пуста, а другая имеет по два электрона. Происходит расщепление линий In в оже-спектрах, а также сжатие решетки, которое, в свою очередь, может увеличивать энергию и, следовательно, уменьшать вероятность образования вакансий. Вблизи критического значения $c \sim 0,6 – 0,7$ ат.% из-за флуктуаций распределения In могут наблюдаться две фазы с различными a .

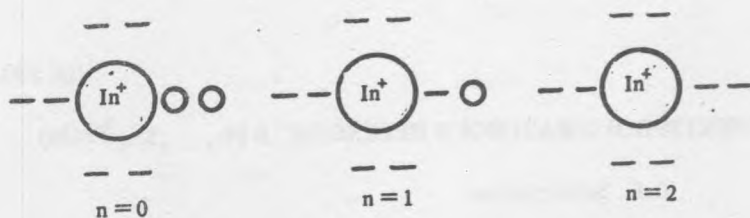


Рис. 1. Схематическое изображение примесных состояний In с различным числом электронов на уровне $n=0, 1, 2$.

Изменение объема при заполнении состояний In равно $\Delta V = 0,5 N_{In} \int dr \operatorname{div} u(r)$. Воспользовавшись (1) и введя концентрацию c , получим

$$\Delta a/a = -4E_1 c/3a^3 \rho v_{||}^2. \quad (2)$$

Взяв из эксперимента /1, 3/ $\Delta a = -0,0075 \text{ \AA}$, $c = 0,7 \cdot 10^{22}$, $a = 6,50 \text{ \AA}$, $\rho = 7,84 \text{ г/см}^3$, $v_{||} = 3 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ /9/, получим $E_1 \approx 15 \text{ эВ}$. Это значение E_1 совпадает с полученными в /9, 10/. Таким образом, модель /4, 5/ согласуется с экспериментальными фактами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Александров О. В., Киселева К. В. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 4, 13 (1984).
2. Александров О. В., Киселева К. В. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 1, 60 (1985).
3. Калюжная Г. А., Киселева К. В. Труды ФИАН, 177, 5 (1987).
4. Виноградов В. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 1, 6 (1987).
5. Виноградов В. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 10, 3 (1988).
6. Кайданов В. И., Равич Ю. И. УФН, 145, 51 (1985).
7. Виноградов В. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, № 9, 11 (1986).
8. Toyozawa Y. Proc. Int. School of Physics "Enrico Fermi", Course LXXXIX, 1985, p. 798.
9. Chattopadhyay D., Aichman H., Nimitz Gt. Sol. St. Comm., 51, 151 (1984).
10. Das A. K., Nag B. R. J. Phys. Chem. Soi., 39, 259 (1978).

Поступила в редакцию 15 июня 1988 г.