

УДК 621.315.592

А.Н.Литвинов (5 курс, каф. ФППиНЭ), А.Н.Вейс, д.ф.-м.н., проф.

ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ В ОБЛАСТИ КРАЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ПОЛОСЫ

Bi_2Te_3 и твердые растворы на его основе широко используются в термоэнергетике и обладают лучшими термоэлектрическими свойствами в интервале температур 200-600 К. Именно этим объясняется интерес к изучению энергетического спектра этих соединений. Однако до настоящего времени не удалось выработать единых представлений об особенностях их зонной структуры, адекватно отражающих накопленные экспериментальные данные. В частности, обнаруженная в Bi_2Te_3 непараболичность закона дисперсии электронов и дырок вблизи абсолютных зонных экстремумов плохо согласуется с существующими представлениями о существовании в Bi_2Te_3 и в его аналогах “непрямой” запрещенной зоны [1].

С целью устранения этого противоречия в работе выполнено детальное исследование оптического поглощения α в твердом растворе $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ с $x=0.75$ в области края фундаментальной полосы. Результаты исследования проанализированы совместно с экспериментальными данными для Bi_2Te_3 , полученными авторами [2], которые, насколько нам известно, до сих пор количественно не анализировались.

Объектами исследования служили эпитаксиальные пленки, приготовленные методом дискретного испарения на подложках из слюды и КВг. Технология их приготовления и электрофизические

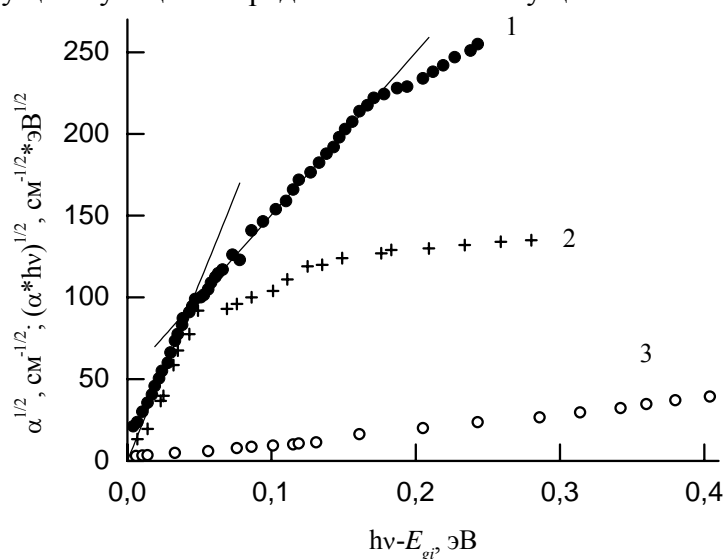


Рис. 1. Зависимости $\alpha^{1/2}$ в Bi_2Te_3 (1), PbS (2) и $(\alpha \cdot hv)^{1/2}$ в Si (3) от $(hv - E_{gi})^{1/2}$ при $T=300$ К. При построении рисунка использованы данные: 1 – [2], 2,3 – [4].

свойства подробно описаны в [3]. Все образцы обладали проводимостью p -типа. Концентрация дырок в них не превышала $7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Измерения выполнены при 300 К.

Результаты, полученные для пленок $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$, и данные [2] для монокристаллов Bi_2Te_3 оказались качественно подобными. В $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ наблюдалось лишь незначительное смещение края собственного поглощения в коротковолновую область, свидетельствующее о возрастании ширины запрещенной зоны при увеличении содержания сурьмы x . Этот

результат согласуется с существующими представлениями о трансформации зонного спектра $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ [1].

Анализ экспериментальных данных показал, что зависимости $\alpha(h\nu)$, полученные как в $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$, так и в Bi_2Te_3 [2], не могут быть истолкованы в предположении о том, что минимальный энергетический зазор, разделяющий валентную зону и зону проводимости, является непрямым. В рамках подобного представления невозможно понять причину появления неаддитивных составляющих в зависимостях $\alpha(h\nu)$ для невырожденных образцов $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ и Bi_2Te_3 , построенных в координатах $\alpha^{1/2} - h\nu$ (рис. 1). При этом скорость возрастания α вблизи порога в $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ и Bi_2Te_3 оказывается существенно более высокой, чем в таком типичном непрямозонном полупроводнике, как кремний, и соответствует имеющимся экспериментальным данным для соединений A^4B^6 , в частности PbS [4]. Отметим, что наличие участков спектральных зависимостей $\alpha(h\nu)$ в соединениях A^4B^6 , которые, при желании, можно связать с непрямыми межзонными переходами, никогда не рассматривалось в качестве доказательства непрямозонности этих материалов. Более того, было показано в [5], наблюдаемое в PbTe возрастание α при $h\nu < E_g$ может быть обусловлено “хвостами” плотности состояний, простирающимися в запрещенную зону.

На основании сказанного выше можно предположить, что соединения $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ в действительности являются прямозонными полупроводниками. Как показал выполненный анализ, в этом случае зависимости $\alpha(h\nu)$ в $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ могут быть представлены в виде суперпозиции двух аддитивных составляющих (I и II), обладающих различными частотными зависимостями, соответствующими прямым (I) и непрямым (II) разрешенным оптическим переходам. При этом наименьший энергетический зазор, отделяющий зону проводимости от валентной зоны, является прямым и равным (0.155 ± 0.010) эВ при $x=0$, $T=300$ К и (0.218 ± 0.013) эВ при $x=0.75$, $T=300$ К. Для порогов не прямых переходов получены значения: (0.17 ± 0.01) эВ в Bi_2Te_3 и (0.275 ± 0.020) эВ в $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$, $T=300$ К. Заметим, что сложный характер зависимостей $\alpha(h\nu)$, выявленный в $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$, указывает на возможность существования дополнительного экстремума хотя бы в одной из зон изучаемых соединений, расположенного на шкале энергий в непосредственной близости от основного.

В заключение следует отметить, что результаты, полученные в пленках, выращенных на подложках из слюды и бромистого калия, в пределах экспериментальных ошибок оказались одинаковыми. Это согласуется с существующими представлениями [1] о наличии слабой ван-дер-ваальсовской связи между квинтетами $\text{Te-Bi(Sb)-Te-Bi(Sb)-Te}$, образующими кристаллическую решетку в изучаемых соединениях. Благодаря этому напряжения, возникающие в пленках, обусловленные различиями в величинах коэффициентов термического расширения пленок и подложек, релаксируют в пределах нескольких квинтетов.

Таким образом, на основании выполненных экспериментов и анализа экспериментальных данных можно заключить, что соединения $(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_3$ при $x \leq 0.75$ являются прямозонными полупроводниками, а оптические переходы между основными экстремумами зоны проводимости и валентной зоны разрешены.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Гольцман Б.М., Кудинов В.А., Смирнов И.А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 .// М.: Наука, 1972, 320 с.
2. Greenaway D.L., Harbeke G. J. Phys. and Chem. of Solids, 1965, V. 26. P. 1585-1604.
3. Гольцман Б.М., Дашевский З.М., Кайданов В.И., Коломоец Н.В. Пленочные термоэлементы: физика и применение.// М.: Наука, 1985, 232 с.

4. Уханов Ю.И. Оптика полупроводников. Конспект лекций по курсу «Физика полупроводников», ч. II.// Л.: Изд-во ЛПИ им. М.И.Калинина, 1971, 144 с.
5. Вейс А.Н. ФТП. 1982, Т. 16. С. 1128-1130.