

## ЗСУВ НАЙТА І ОСОБЛИВОСТІ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ В SnTe

Досліджені концентраційні залежності зсуву Найта на  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  в SnTe з концентрацією дірок  $p_{77} = 5.5 \cdot 10^{19} - 3.73 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Спостерігаються додатні зсуви Найта, які не монотонно зростають із збільшенням  $p$ . Експериментальні криві можуть бути представлені сумою чотирьох лінійних відрізків з різними кутовими коефіцієнтами. Зломи на кривих відповідають критичним точкам в спектрі дірок SnTe. Встановлено, що в області сідлоподібної поверхні та  $\Delta$ -зони зсуви Найта завдячують контактній надтонкій взаємодії Фермі, а в  $\Sigma$ -зоні - орбітальній надтонкій взаємодії.

В роботах [1-3] теоретично обґрунтована і експериментально підтверджена складна структура валентної зони сполук  $A^4B^6$  кубічної фази. На прикладі SnTe показано принципову можливість знаходження критичних точок зонного спектра по концентраційним і температурним залежностям магнітної сприйнятливості. На залежності  $\chi_{40k}(p)$  знайдено три (з п'яти передбачених теорією) критичні точки в спектрі дірок SnTe.

Ця робота присвячена вивченню особливостей зонної структури SnTe по концентраційних залежностях зсуву Найта ( $S_K$ ) на ядрах  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$ . Ми виходили з наступних міркувань. У виродженому матеріалі  $S_K$ , як і магнітна сприйнятливість, безпосередньо пов'язаний з густиною станів на рівні Фермі [4]. При проходженні рівня Фермі через критичні точки діркового спектра зміни в густині станів, пов'язані зі зміною топології поверхні Фермі, повинні також виявлятися на залежності  $S_K=f(p)$ .

Вимірювання резонансних полів на ядрах  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  проводилось на спектрометрі ядерного магнітного резонансу з датчиком індукційного типу на частоті 13.495 МГц [5]. Досліджувались порошкоподібні зразки об'ємом  $0.25 \text{ см}^3$  з

розмірами зерен 50-100 мкм.

Для отримання зразків з концентрацією  $p_{77} = 5.5 \cdot 10^{19} - 3.73 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  застосовувався ізотермічний відпал у насиченій парі компонентів. Холівська концентрація дірок у кристалах ( $p_{77} = 1/eR_{77}$ ), вирощених методом Бріджмена, складає звичайно  $p_{77} = (7-8) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

Враховуючи, що в SnTe з  $p < 8 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  при  $T < 150 \text{ К}$  відбувається сегнетоелектричний фазовий перехід і виникає ромбоєдрична фаза [2], резонансні поля на ядрах виміряні при  $T = 300 \text{ К}$ . Таким чином, досліджувались зразки SnTe кубічної фази у відповідності з [1-3].

Зсуви Найта на  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  на всьому інтервалі концентрацій додатні, тобто резонансне поле зміщується в сторону менших значень:

$$V_0 - V > 0, \quad (1)$$

де  $V_0$  - еталонне поле (чи хімічний зсув),  $V$  - зовнішнє магнітне поле, при якому спостерігається резонанс на ядрах при постійній резонансній частоті. Значення  $V_0$  на  $^{119}\text{Sn}$  (8514 Гс) і на  $^{125}\text{Te}$  (10054 Гс) визначені шляхом екстраполяції концентраційних залежностей резонансних полів до нульових значень  $p$  [4].

На рис.1 зображені концентраційні залежності  $S_K$  на ядрах  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$ . Як бачимо, зсуви не монотонно збільшуються із зростанням  $p$ . На обох залежностях видно чотири лінійні ділянки з різними кутовими коефіцієнтами. Зломи на кривих спостерігаються при  $p_{77} = (1.14-1.75) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ;  $3.8 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ;  $1.0 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ .

Повернемося до концентраційної залежності магнітної сприйнятливості, наведеної в [3]. Виявлені особливості на кривій  $\chi_{40K}(p)$  у вигляді зломів при  $p_{c1} = 1.1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ,  $p_{c2} = 2.3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  і  $p_{c3} = 4.9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , ідентифіковані як особливості Ван-Хова, що відповідають:  $\Sigma$ -екстремуму; вперше виявленій сідловій точці в напрямку  $\Sigma L$  і  $\Delta$ -екстремуму валентної зони.

Якщо аналогічно [3] на шкалі концентрацій відкласти значення  $p = 0.6 p_{77}$ , то критичним точкам на залежностях  $V_0 - V = f(p)$  (рис.1) будуть відповідати концентрації  $p_{c1} = (0.7-1.05) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ,  $p_{c2} = 2.28 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  і  $p_{c3} = 6 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . З урахуванням даних по  $\chi_{40K}(p)$  можна прийняти, що  $p_{c1} = 1.05 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . Знайдені нами значення  $p_{c1}$ ,  $p_{c2}$ ,  $p_{c3}$  добре узгоджуються з встановленими в [3].

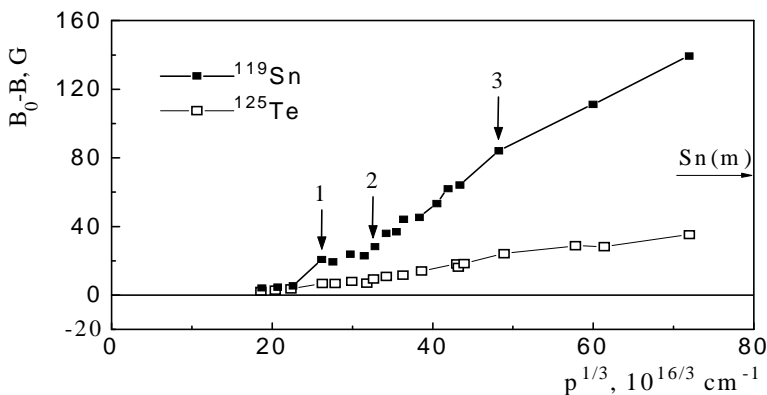


Рис.1. Концентраційні залежності зсуву Найта на ядрах  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  в  $\text{SnTe}$ . Стрілки 1, 2, 3 вказують критичні точки в зонному спектрі  $\text{SnTe}$  відповідно при  $p_{77}=1.75 \cdot 10^{20}$ ;  $3.8 \cdot 10^{20}$  і  $1.0 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ . Стрілка  $\text{Sn}(m)$  вказує значення зсуву Найта в металічному  $\text{Sn}$ .

Отже, аналіз концентраційної залежності  $S_K$  може проводитись на основі моделі складної структури валентної зони  $\text{SnTe}$ , запропонованої в [3]. Зупинимось більш детально на кожній лінійній ділянці кривих  $V_0 - B = f(p)$  (рис.1), концентраційні інтервали яких можна віднести до області існування  $L$  і  $\Sigma$ -зони, сідлової поверхні та  $\Delta$ -зони.

Згідно з інверсійною моделлю  $\text{PbSnTe}$  симетрія зон в  $\text{SnTe}$  інвертована по відношенню до  $\text{PbTe}$ . Виміри  $S_K$  показали, що хвильові функції  $L_6^+$ , що описують вершину валентної зони  $\text{PbTe}$ , містять  $s$ -складову у вузлах  $^{207}\text{Pb}$  [8]. Тоді природньо чекати великих польових зсувів на  $^{125}\text{Te}$  в  $\text{SnTe}$ , обумовлених контактною надтонкою взаємодією Фермі.

Однак на першій лінійній ділянці  $5.5 \cdot 10^{19} < p_{77} < 1.4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , яка відповідає  $L$ -зоні, величина зсувів практично однакова на обох ядрах і дуже слабо залежить від  $p$  (в межах похибки експерименту). Цікавий факт - резонансні лінії мають лоренцову форму.

На другій концентраційній ділянці  $1.75 \cdot 10^{20} < p_{77} < 3.8 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$

( $p_{c1} < p_{77} < p_{c2}$ ) зсуви головним чином завдячують надтонкій взаємодії ядер з дірками  $\Sigma$ -зони [3]. Більш помітною стає залежність  $S_K$  від  $p$  на ядрах  $^{119}\text{Sn}$ . При цьому ширина ліній  $\Delta B$ , форма яких близька до гаусової, не залежить від  $p$  [6]. Звідси слідує, що на даному інтервалі  $\Delta B$  не є функцією  $S_K$ . Але відомо, що на ядрах  $^{207}\text{Pb}$  в  $p$ - $\text{PbTe}$ , де реалізується контактна надтонка взаємодія Фермі, має місце лінійна залежність між  $\Delta B$  та  $S_K$  [4]. Відсутність такого взаємозв'язку між  $\Delta B$  і  $S_K$  на  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  в  $\Sigma$ -зоні  $\text{SnTe}$  свідчить про інший, ніж в  $p$ - $\text{PbTe}$ , механізм взаємодії ядер з дірками. Якщо ж врахувати великий діаманетизм дірок в  $\Sigma$ -зоні [3], то цілком ймовірно припустити, що джерелом зсувів Найта на ядрах в  $\Sigma$ -зоні є орбітальна надтонка взаємодія.

Значна концентраційна залежність зсувів (і ширини ліній, форма яких відхиляється від гаусової [9]) виявлена на третій ділянці  $3.8 \cdot 10^{20} < p_{77} < 1.0 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  ( $p_{c2} < p_{77} < p_{c3}$ ). Згідно з [3] при  $p = p_{c2}$ , що відповідає сідловій точці в спектрі дірок, поверхня Фермі в  $\text{SnTe}$  стає відкритою, як в металах. Спостерігається різке зменшення діаманетної складової сприйнятливості [3], що еквівалентно зростанню парамагнетизму Паулі. Польовий зсув на  $^{119}\text{Sn}$  не тільки досягає свого значення для металічного олова, але й перевищує його. Останнє свідчить про більш високу густину хвильової функції  $s$ -типу на  $^{119}\text{Sn}$  в  $\text{SnTe}$  в порівнянні з атомною величиною.

Четвертий концентраційний інтервал  $1.0 \cdot 10^{21} < p_{77} < 3.73 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  ( $p_{77} > p_{c3}$ ) відповідає  $\Delta$ -зоні, дірки в якій є парамагнітними [3]. Цим пояснюється подальший ріст зсувів: на  $^{119}\text{Sn} \cong$  від 82 до 140 Гс, на  $^{125}\text{Te} \cong$  від 23 до 36 Гс.

На рис. 2 зображена залежність ширини ліній ядер  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  від  $S_K$  в діапазоні  $p_{77} = 1.75 \cdot 10^{20} - 3.73 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , який охоплює  $\Sigma$ -зону, область сідлової поверхні і  $\Delta$ -зону. Зломам на кривих відповідають значення  $S_K$  в критичних точках зонного спектра.

Незалежність  $\Delta B$  від  $S_K$  в  $\Sigma$ -зоні, про яку говорилось вище, чітко помітна на ядрах  $^{119}\text{Sn}$ . Ця ділянка залежності відсутня на  $^{125}\text{Te}$ , оскільки і  $\Delta B$ , і  $S_K$  останніх практично не змінюється з ростом  $p$  в  $\Sigma$ -зоні.

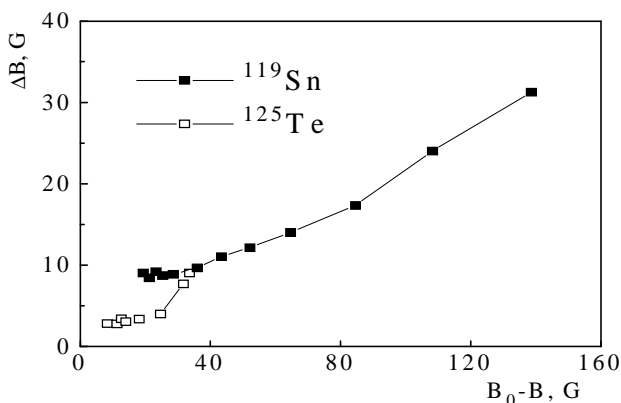


Рис.2. Залежність ширини резонансних ліній  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  від зсуву Найта в  $\text{SnTe}$  при  $T=300\text{ K}$ .

В області сідлової поверхні і  $\Delta$ -зони на обох ядрах спостерігається лінійна залежність  $\Delta B$  від  $S_K$  (як і на  $^{207}\text{Pb}$  в  $\text{PbTe}$ ), проте з різними кутовими коефіцієнтами  $c$ :

$$\Delta B = \Delta B_0 + c S_K \quad (2)$$

де  $\Delta B_0$  - ширина лінії, одержана екстраполяцією експериментальної залежності до нульового значення  $S_K$ .

На основі прове-  
дених досліджень можна зробити наступні висновки. Немонотонний характер концентраційних залежностей зсуву Найта на  $^{119}\text{Sn}$  і  $^{125}\text{Te}$  узгоджується з моделлю складної структури валентної зони  $\text{SnTe}$ , запропонованою в [3], і тим самим підтверджує її. Виявлені особливості в залежностях  $S_K=f(p)$  і  $\Delta B=f(S_K)$  вказують на контактну надтонку взаємодію ядер з дірками в області сідлової поверхні і  $\Delta$ -зони. Враховуючи суттєву різницю у величинах зсувів, зроблено висновок, що  $s$ -складова хвильової функції дірок у вузлах олова значно більша, ніж у вузлах телуру. В  $\Delta$ -зоні  $S_K$  пов'язаний з орбітальною надтонкою взаємодією.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Квятковский О.Е. Определение критических точек зонного спектра по концентрационным и температурным зависимостям магнитной восприимчивости в слабом магнитном поле // ФТТ.-1990.-**32**, №9.-С.2533-2542.
2. Квятковский О.Е. Строение валентной зоны соединений  $A^4B^6$  // ФТТ.-1990.-**32**, №10.-С.2862-2868.
3. Магнитная восприимчивость в слабом магнитном поле и строение валентной зоны теллурида олова / Бушмарина Г.С., Драбкин И.А., Квантов М.А., Квятковский О.Е. // ФТТ.-1990.-**32**, №10.-С.2869-80.
4. Knight Shifts and Band Structure in the Lead-Salt Semiconductors / Senturia S.D., Smith A.C., Hewes C.R., Hofmann J.A., Sagalyn P.L. // Rhys.Rev. B.-1970.-**1**, №10.-P.4045-4057.
5. Сдвиг Найта при сегнетоэлектрическом фазовом переходе в  $Pb_{1-x}Ge_xTe$  и  $SnTe$  / Слынько Е.И., Хандожко А.Г., Летюченко С.Д., Копыл А.И. // Известия АН СССР. сер.физ.-1987.-**51**, №12.-С.2136-2141.
6. Особенности спектров ядерного магнитного резонанса  $^{119}Sn$  и  $^{125}Te$  в  $SnTe$  и  $SnTe:Mn$  / Слынько В.В., Слынько Е.И., Хандожко А.С., Выграненко Ю.К. // ФТП.-1997.-**31**, 10.-С.1187-1192.

## SUMMARY

SLYNKO E.I.

### **KNIGHT SHIFT AND PECULIARITIES OF THE BAND STRUCTURE IN $SnTe$**

The carrier concentration dependences of the  $^{119}Sn$  and  $^{125}Te$  Knight shifts have been investigated in  $SnTe$  with hole concentration  $p_{77}=5.5 \cdot 10^{19}-3.73 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . The positive Knight shifts are being observed, which are increased nonmonotonously with increase of  $p$ . Experimental curves may be represented by the sum of the four linear sections with a different angular coefficient. The breaks on the curves correspond to critical points in the hole spectrum of  $SnTe$ . It is ascertained, that the Knight shifts are due to the Fermi contact hyperfine interaction in the range of the saddle surface and  $\Delta$ -band, in the  $\Sigma$ -band - to the orbital hyperfine interaction.