

## Аномалии температурной зависимости вклада в скорость звука от гибридизированных электронных состояний на примесях переходного элемента

В.И. Окулов, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, А.Т. Лончаков

*Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620990, Россия*  
E-mail: okulov@imp.uran.ru

Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич

*Черновицкий национальный университет, ул. Коцюбинского, 2, г. Черновцы, 58012, Украина*

Статья поступила в редакцию 29 июля 2010 г.

Исследована температурная зависимость скорости звука в кристаллах селенида ртути с примесями железа малой концентрации. Эксперименты проведены в интервалах концентраций и температур, в которых ранее были обнаружены проявления гибридизированных электронных состояний на примесях железа. Установлено, что при температурах ниже 10 К скорость медленной поперечной ультразвуковой волны имеет аномальный немонотонный участок температурной зависимости, который связан с влиянием примесей и отражает существование гибридизированных состояний. Наблюдаемые аномалии скорости звука описываются на основе развитой теории электронного вклада в упругие модули, учитывающей эффекты гибридизации примесных состояний и межэлектронное взаимодействие. Выполнена подгонка теоретических зависимостей к экспериментальным и получена количественная информация о параметрах гибридизированных состояний и ферми-жидкостного взаимодействия.

Досліджено температурну залежність швидкості звуку в кристалах селеніду ртуті з домішками заліза малої концентрації. Експерименти проведено в інтервалах концентрацій та температур, у яких раніше було виявлено прояви гібридизованих електронних станів на домішках заліза. Встановлено, що при температурах нижче 10 К швидкість повільної поперечної ультразвукової хвилі має аномальну немонотонну область температурної залежності, яка пов'язана із впливом домішок та відображає існування гібридизованих станів. Аномалії швидкості звуку, які спостерігаються, описуються на основі розвиненої теорії електронного внеску в пружні модулі, що враховує ефекти гібридизації домішкових станів та міжелектронну взаємодію. Виконано підгонку теоретичних залежностей до експериментальних і отримано кількісну інформацію щодо параметрів гібридизованих станів і фермі-рідинної взаємодії.

PACS: 72.10.Fk Рассеяние точечными дефектами, дислокациями, поверхностями и другими несовершенствами (в том числе эффект Кондо);  
72.20.Dр Общая теория, механизмы рассеяния;  
72.80.Еу Полупроводники III–V и II–VI групп.

Ключевые слова: полупроводники, примеси переходных элементов, гибридизированные электронные состояния, электронный вклад в скорость звука.

### Введение

Настоящая статья посвящена изложению результатов исследования электронных вкладов в низкотемпературные модули упругости и скорость распространения ультразвука в кристаллах селенида ртути с примесями железа малой концентрации. В исследуемых кристаллах, как показано в работах [1–4], электронные

состояния, образованные в полосе проводимости донорной  $d$ -оболочкой примесей железа, в определенном интервале концентраций являются гибридизированными, т.е. каждое из них содержит локализованную и однородно распределенную компоненты электронной плотности. Частичная локализация гибридизированных состояний приводит к аномальным концентрационным

и температурным зависимостям термодинамических и кинетических величин при низких температурах [1,2]. Такого рода зависимости наблюдались в ряде экспериментов, и связь наблюдаемых аномалий с эффектами гибридизации была подтверждена на количественном уровне [3,4]. При изучении распространения ультразвука в температурной зависимости коэффициента поглощения медленной поперечной волны был выявлен максимум, который объясняется существованием пика плотности гибридизованных состояний вблизи энергии Ферми [5]. Другой акустический эффект, обнаруженный в экспериментах, состоит в немонокотной зависимости примесного вклада в скорость звука от температуры в том же низкотемпературном интервале. Изучение этого эффекта является целью настоящей работы. Первый раздел статьи посвящен изложению результатов теории, описывающей температурную зависимость вклада электронных гибридизованных состояний в модули упругости кристалла в рамках квантового ферми-жидкостного подхода. Приведена упрощенная формула для скорости звука, применяемая для описания температурной аномалии. Особое внимание уделено учету межэлектронного ферми-жидкостного взаимодействия, влияние которого на эффекты гибридизованных состояний является существенным. В последующих разделах статьи изложены экспериментальные данные по низкотемпературной аномалии скорости медленной поперечной ультразвуковой волны и результаты количественной интерпретации этого эффекта, в рамках которой определены параметры, характеризующие гибридизованные состояния и ферми-жидкостное взаимодействие.

### Вклад электронных гибридизованных состояний в модули упругости и скорость звука

Для теоретического описания электронного вклада в компоненты тензора модулей упругости  $\lambda_{klmn}$  при заданной температуре исходим из общего выражения, вывод которого изложен в статье [6]. Запишем его следующим образом:

$$V\lambda_{klmn} = \delta_{kl} \langle \Lambda_{mn} \rangle + \sum_v (\partial f_v / \partial \varepsilon_v) \Lambda_{kl}^F(v) \Lambda_{mn}^e(v) + [N\delta_{kl} + \sum_v (\partial f_v / \partial \varepsilon_v) \Lambda_{kl}^F(v) I(v)] \times [N\delta_{mn} + \sum_v (\partial f_v / \partial \varepsilon_v) \Lambda_{mn}^e(v)] [\sum_v (\partial f_v / \partial \varepsilon_v) I(v)]^{-1}. \quad (1)$$

Здесь использованы обозначения:  $V$  — объем,  $N$  — число электронов,  $v$  — квантовые числа,  $\varepsilon_v$  — энергия электрона,  $f_v = \{\exp[(\varepsilon_v - \zeta)/T] + 1\}^{-1}$  — функция распределения, в которой химический потенциал  $\zeta$  находится из условия

$$\sum_v f_v = N, \quad (2)$$

$\Lambda_{mn}(v)$  — компоненты тензора деформационного потенциала, определяющие изменение энергии электрона  $(\delta\varepsilon_v)_f$  при деформации, задаваемой компонентами тензора  $u_{kl}$ :

$$(\delta\varepsilon_v)_f = \Lambda_{kl}(v)u_{kl}, \quad (3)$$

без учета изменения функции распределения электронов  $f_v$ . Влияние межэлектронного взаимодействия отражается в эффективных электронных параметрах  $\Lambda_{mn}^e(v)$  и  $I(v)$ , определяемых интегральными уравнениями:

$$\Lambda_{mn}^e(v) = \Lambda_{mn}(v) + \sum_{v'} F(v, v') (\partial f_{v'} / \partial \varepsilon_{v'}) \Lambda_{mn}^e(v'), \quad (4)$$

$$I(v) = 1 + \sum_{v'} F(v, v') (\partial f_{v'} / \partial \varepsilon_{v'}) I(v'), \quad (5)$$

ядром которых является функция ферми-жидкостного взаимодействия:

$$F(v, v') = \delta\varepsilon_v / \delta f_{v'}. \quad (6)$$

В выражение (1) входят также величины, введенные равенствами

$$\langle \Lambda_{mn} \rangle = \sum_v f_v \Lambda_{mn}(v); \quad (7)$$

$$\Lambda_{kl}^F(v) = \Lambda_{kl}(v) + \delta_{kl} \sum_{v'} F(v', v) f_{v'}. \quad (8)$$

Тензорные индексы  $klmn$  в последующих промежуточных формулах будут опущены, поскольку их восстановление согласно исходным соотношениям не представляет труда.

Зависимость от температуры электронных модулей упругости происходит от входящей в исходные формулы функции распределения  $f_v$ . В случае, актуальном для дальнейшего рассмотрения, тепловая энергия электрона мала по сравнению с энергией Ферми  $\varepsilon_F$ , и теоретическая температурная зависимость определяется сравнительно просто. В приведенных выше формулах суммирование по квантовым числам заменяется интегрированием по энергии с введением плотности электронных состояний с данным значением энергии. Если характерные масштабы изменения плотности состояний и функции ферми-жидкостного взаимодействия порядка энергии Ферми (значительно превышают тепловую энергию), то интегралы по энергии вычисляются хорошо известным способом, и модули упругости состоят из не зависящего от температуры слагаемого и малой добавки, пропорциональной  $(T/\varepsilon_F)^2$ . Если же в энергетической зависимости плотности состояний имеется интервал резкого изменения с масштабом, сравнимым с  $T$ , то это проявляется в аномальных, немонотонных зависимостях термодинамических величин. Именно такая ситуация осуществляется при гибридизации электронных донорных примесных состояний в полосе проводимости кристалла. Теорети-

ческое описание связанных с этим эффектов детально рассмотрено в статьях [1,2]. Электронная плотность гибридных состояний содержит вклады свободного движения и локализации. В соответствии с этим плотность состояний имеет два слагаемых в интервале гибридизации шириной  $2\Gamma$ , расположенном в окрестности энергии резонансного донорного уровня  $\varepsilon_r$ . Это  $g_c(\varepsilon)$  — плотность состояний электронов проводимости, отвечающая вкладу однородной электронной плотности, и слагаемое  $g_i(\varepsilon)$ , отражающее частичную локализацию электронов в гибридных состояниях. Простая аппроксимация слагаемого  $g_i(\varepsilon)$  выглядит следующим образом [1]:

$$g_i(\varepsilon) = Vn_d(\Delta/\pi)\{[(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + \Delta^2]^{-1} + (1/\Gamma\Delta)[(\pi/2 - \arctg(\Gamma/\Delta))]\} \approx Vn_d(\Delta/\pi)\{[(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + \Delta^2]^{-1} + \Gamma^{-2}\}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_r - \Gamma < \varepsilon < \varepsilon_r + \Gamma.$$

Параметры  $\Delta$  (полуширина пика плотности состояний) и  $\Gamma$  (полуширина интервала гибридизации) удовлетворяют неравенствам  $\Delta \ll \Gamma \ll \varepsilon_r$ . Интеграл от функции  $g_i(\varepsilon)$  по интервалу гибридизации ( $\varepsilon_r - \Gamma, \varepsilon_r + \Gamma$ ) равен  $Vn_d = Vzn_i$  — числу донорных электронов при концентрации примесей  $n_i$ .

Для формулировки упрощенного описания температурной зависимости вклада гибридных состояний в модуль упругости аппроксимируем прежде всего компоненты деформационного потенциала  $\Lambda(v)$  константами  $\Lambda^c$  и  $\Lambda^i$ , относящимися соответственно к однородным и локализованным компонентам состояний. Другое упрощающее предположение аналогично уже применявшемуся при изучении теплоемкости и магнитной восприимчивости [7,8] и касается функции ферми-жидкостного взаимодействия. Записав уравнения (4) и (5) для величин, зависящих от энергии, вводим вместо ферми-жидкостной функции константы  $\varphi_c$  и  $\varphi_i$  для однородных и локализованных компонент и константу  $\varphi_{ic} = \varphi_{ci}$ , описывающую связь компонент. В рамках изложенных предположений формула (1) преобразуется к следующему виду:

$$V\lambda = \langle \Lambda \rangle + \{N^2(\eta_i\eta_c)^{-1} - D^F D\}\eta_i^e \eta_c^e - N(L^c \eta_c^e + L^i \eta_i^e)(\eta_c^e + \eta_i^e)^{-1}, \quad (10)$$

где

$$D = \Lambda^c - \Lambda^i, \quad D^F = \Lambda^{Fc} - \Lambda^{Fi}, \quad (11)$$

$$L^c = \Lambda^{Fc} + \Lambda^c, \quad L^i = \Lambda^{Fi} + \Lambda^i, \quad (12)$$

$$\eta_i^e = \eta_i[1 + (\varphi_i - \varphi_{ic})\eta_i]^{-1}, \quad \eta_c^e = \eta_c[1 + (\varphi_c - \varphi_{ic})\eta_c]^{-1}, \quad (13)$$

$$\eta_c = \int d\varepsilon [-\partial f(\varepsilon)/\partial \varepsilon] g_c(\varepsilon), \quad \eta_i = \int d\varepsilon [-\partial f(\varepsilon)/\partial \varepsilon] g_i(\varepsilon). \quad (14)$$

В начале анализа формулы (10) рассмотрим ее для случая, когда энергия Ферми расположена вне интервала гибридизации, т.е. вклад локализации отсутствует. В этом случае получается простой известный результат:

$$V\lambda^c = \langle \Lambda \rangle - NL^c + N^2(\eta_c)^{-1}, \quad (15)$$

описывающий вклад электронов проводимости в модуль упругости в модели постоянного деформационного потенциала. Последнее слагаемое здесь описывает роль объемной электронной сжимаемости и не содержит ферми-жидкостной перенормировки. Влияние ферми-жидкостного взаимодействия в принятой модели содержится в  $L^c$ , и в температурной зависимости отсутствует в силу того, что не учитывается зависимость ферми-жидкостной функции от энергии. Подобная закономерность обнаруживается и в теплоемкости [7]. Для последовательного полного изучения вкладов электронов проводимости в термодинамические величины необходимо учитывать зависимости от энергии ферми-жидкостной функции и деформационного потенциала. При отсутствии особенностей плотности состояний, как уже отмечалось, температурные добавки пропорциональны  $T^2$  и являются малыми.

Переходя теперь к рассмотрению проявлений эффектов гибридизации на основе формулы (10), будем считать, что энергия Ферми расположена в интервале гибридизации. Для последующего обсуждения экспериментальных данных актуальным является случай, когда  $\varepsilon_F$  превышает резонансную энергию  $\varepsilon_r$ , так что разность  $\varepsilon_F - \varepsilon_r \equiv \varepsilon_0$  положительна и существенно больше  $\Delta$ . Тогда функция  $\eta_i$  значительно больше  $\eta_c$  и определяет температурную зависимость модулей упругости. По порядку величины, полагая, что  $n_d$  совпадает с полной концентрацией электронов, имеем  $\eta_c \sim Vn_d/\varepsilon_F$ , тогда как функция  $\eta_i$  близка к  $Vn_d/\Gamma$  при  $T < \Gamma$  и спадает до нуля при  $T > \Gamma$ . Поэтому, интересуясь эффектами гибридизации, можно пренебречь температурными добавками в функции  $\eta_c$ , заменив ее на  $g_c(\varepsilon_F) \equiv g_c$ , и в соответствии с этим  $\eta_c^e \approx g_c[1 + (\varphi_c - \varphi_{ic})g_c]^{-1} \equiv g_c[1 + A_c]^{-1}$ . Температурная зависимость величины  $\langle \Lambda \rangle$  также оказывается несущественной. Выделив в формуле (10) зависящее от температуры слагаемое с функцией  $\eta_i$  и восстановив опускавшиеся тензорные индексы, получаем теперь формулу, описывающую температурную зависимость вклада гибридных состояний в тензор модулей упругости:

$$V\lambda_{klmn} = V\lambda_{klmn}^c + V\lambda_{klmn}^h K(T)[1 + (1 + A)K(T)]^{-1}, \quad (16)$$

в которой тензоры  $\lambda^c$  и  $\lambda^h$  в силу изложенных выше аргументов практически не зависят от температуры, причем выражение для  $\lambda^c$  по форме совпадает с (15) с тем отличием, что  $\eta_c$  заменяется на  $g_c$  и в  $\langle \Lambda \rangle$  включено слагаемое с  $\Lambda^i$ ,

$$V\chi_{klmn}^h = \delta_{kl} \delta_{mn} N^2 (1+A) g_c^{-1} - \delta_{kl} N (L_{mn}^i - L_{mn}^c) (1+A_c) - D_{kl}^F D_{mn} g_c, \quad (17)$$

$A = (\varphi_c + \varphi_i - 2\varphi_{ic}) g_c$  — константа, характеризующая ферми-жидкостное взаимодействие, а функция  $K(T) = \eta_i / g_c$  согласно определениям (9) и (14) имеет вид

$$K(T) = (Vn_d \Delta / \pi g_c) \int dx [2\text{ch}(x/2)]^{-2} \times \{[(\varepsilon_0 + Tx)^2 + \Delta^2]^{-1} + (1/\Gamma\Delta)[(\pi/2 - \text{arctg}(\Gamma/\Delta))]\}, \quad (18)$$

где интегрирование по  $x$  выполняется от  $(-\Gamma - \varepsilon_0)/T$  до  $(\Gamma - \varepsilon_0)/T$ .

Полученная формула (16) описывает немонотонную температурную зависимость компонент электронного примесного вклада гибридизированных состояний в тензор модулей упругости. Характер этой зависимости определяется поведением функции  $K(T)$ , аналогичной подобным функциям, отражающим особенности вкладов локализации гибридизированных состояний в другие термодинамические и кинетические величины. Температурная аномалия в  $K(T)$ , описываемая интегралом от произведения плотности состояний  $g_i(\varepsilon)$  и производной функции Ферми, по существу связана с проявляющимся при достижении определенной температуры тепловым возбуждением аномально большого числа электронов из основной части пика плотности состояний, расположенной ниже энергии Ферми. Последующий рост температуры приводит к обеднению заселенности пика и к спаданию аномальной зависимости.

Влияние межэлектронного взаимодействия на температурную аномалию модулей упругости проявляется через зависимость от параметра  $A$ . Тот же параметр описывает влияние ферми-жидкостного взаимодействия на теплоемкость [7]. Рассматриваемые эффекты проявляются в температурной зависимости скоростей распространения ультразвука. Поскольку определенный нами примесный вклад по сути своей составляет малую часть модулей упругости кристалла, то его компоненты дают линейные добавки к скоростям звука разных поляризаций и направлений распространения. Поэтому, согласно формуле (16), скорость звука  $v$  может быть представлена в следующем виде:

$$v = v_s + v_h K(T) [1 + (1+A)K(T)]^{-1}, \quad (19)$$

где  $v_s$  и  $v_h$  не зависят от температуры. Относительная величина, знак и само существование аномально зависящего от температуры вклада гибридизированных состояний в скорость звука данной поляризации и направления определяются соответствующими компонентами деформационных потенциалов, входящих в параметр  $v_h$ , те или иные значения которых, в свою очередь, задаются механизмами образования гибридизированных состояний. В этом заложена возможность

получения информации о таких механизмах и, тем самым, ценность наблюдений рассматриваемых эффектов, первые данные о которых приведены ниже.

### Экспериментальные данные по низкотемпературным аномалиям скорости звука в селениде ртути с примесями железа

В низкотемпературных свойствах кристаллов селенида ртути с примесями железа уже были изучены закономерности, которые объясняются проявлениями электронных гибридизированных состояний, образованных донорными энергетическими уровнями примесных атомов железа в полосе проводимости [3,4]. Цель настоящей работы состояла в том, чтобы обнаружить такого рода закономерности в температурной зависимости скорости звука. Эксперименты проводили на монокристаллах HgSe:Fe в тех же интервалах температур и концентраций примесей, что и в предыдущих работах [3,4]. Образцы были приготовлены из заготовок, выращенных методом Бриджмена, и имели форму параллелепипеда с размерами приблизительно равными  $6 \times 10 \times 3$  мм. Распространение ультразвука изучали в температурном интервале 1,8–200 К с использованием импульсной фазочувствительной установки, работающей по принципу перестраиваемого по частоте моста [9]. Изменение фазовой скорости  $v$  упругой волны от температуры  $T$  определяли по изменению частоты  $f(T)$  баланса моста следующим выражением:

$$[f(T) - f(T_0)] / f(T_0) = [v(T) - v(T_0)] / v(T_0) \equiv \Delta v / v, \quad (20)$$

где  $T_0 = 4,2$  К. Линейное тепловое расширение кристаллов не учитывалось. Погрешность измерений относительного изменения фазовой скорости была порядка  $10^{-6}$ . Продольные и поперечные ультразвуковые волны возбуждались и принимались в кристалле HgSe:Fe на частоте 54 МГц в направлении оси  $\langle 110 \rangle$  с помощью пьезопреобразователей из ниобата лития. Фазовые скорости волн, распространяющихся в этом направлении, определяются следующими комбинациями упругих констант кубического кристалла  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$ : для продольной волны  $(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$ , для быстрой поперечной волны  $c_{44}$ , для медленной поперечной волны  $(c_{11} - c_{12})/2$ . Данные измерений приведены на рис. 1, 2. Вместе с ними приведены температурные зависимости тех же скоростей звука для кристаллов селенида ртути без примесей железа, рассчитанные по значениям упругих констант, измеренным в работе [10]. Для удобства рассмотрения отдельные кривые температурных зависимостей смещены вдоль вертикальной оси, причем для продольной и медленной поперечной волн смещение произведено так, чтобы продемонстрировать совпадение высокотемпературных асимптотик.

На рис. 1 представлены температурные зависимости изменения фазовой скорости продольной и быстрой поперечной волн. Данные приведены для двух кристаллов HgSe:Fe с концентрациями примесей железа  $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  и  $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , а также для чистого селенида ртути с использованием данных работы [10]. Для других концентраций примесей были получены аналогичные зависимости. Результат состоит в том, что для волн данных поляризаций наблюдается монотонный ход кривых, однако на скорость быстрой поперечной волны влияние примесей является очень слабым.

Совсем другой результат получается при наблюдении температурных зависимостей скоростей медленной поперечной волны (рис. 2), в которых обнаружено качественное влияние примесей железа на температурную зависимость фазовой скорости при  $T < 100 \text{ К}$ . Это влияние весьма значительное (до  $\approx 2 \cdot 10^{-2}$  относительного изменения при низкой температуре), если учесть малость концентрации примесей (до 1%). Выявление столь существенного различия во влиянии примесей на волны разных поляризаций имеет скорее всего важное значение для понимания физической природы проявлений электронной структуры в физических свойствах кристалла и поэтому требует дальнейших экспериментальных исследований и теоретических разработок.

В температурном поведении примесного вклада в скорость медленной поперечной волны обнаруживаются два масштаба. Один из них, порядка 10 К, определяет спад скорости поперечной волны с уменьшением температуры в интервале, начиная примерно с 80 К. Такого же рода спад проявляется и в скорости продольной волны. Для изучения этой части зависимости необходим учет влияния колебаний кристаллической решетки, что

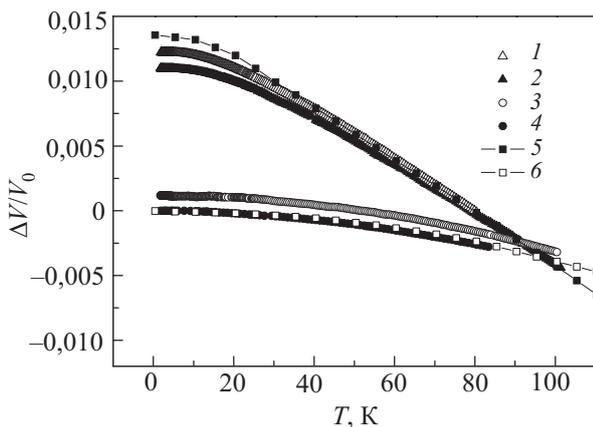


Рис. 1. Температурные зависимости относительного изменения фазовой скорости продольной (кривые 1, 2) и быстрой поперечной (кривые 3, 4) волн в кристаллах HgSe:Fe с концентрацией железа: 1 и 3 —  $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ; 2 и 4 —  $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . Кривые 5, 6 получены с помощью обработки данных [10] и соответствуют изменению скорости продольной (кривая 5) и быстрой поперечной (кривая 6) волн для чистого HgSe.

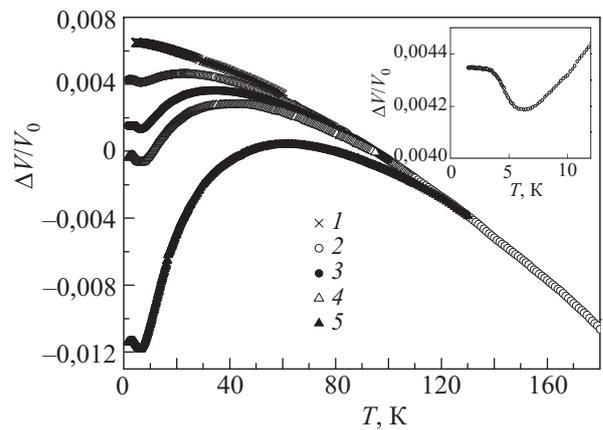


Рис. 2. Температурная зависимость относительного изменения фазовой скорости медленной поперечной волны в образце HgSe (кривая 1) и образцах HgSe:Fe с концентрацией железа: 2 —  $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ; 3 —  $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ; 4 —  $7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ; 5 —  $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ . На вставке показано изменение фазовой скорости для образца с концентрацией железа  $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  в области низких температур.

требует отдельного рассмотрения. Другой масштаб, порядка 1 К, относится к интервалу ниже 15 К, в котором наблюдаются немонотонные зависимости с минимумом около 6 К. Эти зависимости по своему характеру и масштабу вполне отвечают тем, которые исследовались ранее в экспериментах [3,4,7], поэтому есть основания связать их с проявлениями вклада электронных гибридных состояний.

### Количественная интерпретация низкотемпературной аномалии скорости медленной звуковой волны как проявления электронных гибридных состояний

Для количественного описания низкотемпературных участков зависимостей, приведенных на рис. 2, нами выполнена подгонка к ним теоретической температурной зависимости (19). Результаты подгонки для четырех значений концентрации примесей показаны на рис. 3 (сплошные линии — подгоночные кривые). Подгоночными параметрами служили масштабные размерные множители  $v_s$  и  $v_h$  ( $v_h < 0$ ), величины  $(Vn_d / g_c)$ ,  $A$  и  $\epsilon_0$ , а также параметры пика плотности состояний  $\Delta$  и  $\Gamma$ . В соответствии с информацией, полученной из ранее проведенных экспериментов по наблюдению низкотемпературных аномалий различных зависимостей [3,4,7], параметр  $\Delta$  при подгонке варьировался в пределах 3–6 К, параметр  $\Gamma$  — в пределах 30–100 К, а энергия  $\epsilon_0$  — в пределах 5–15 К. Трудность с определением величины  $(Vn_d / g_c)$ , обсуждавшаяся при рассмотрении теплоемкости [7], возникла также и в настоящей работе — получающиеся из теоретической оценки значения слишком велики, чтобы обеспечить удовлетворительную подгонку. На основе сооб-

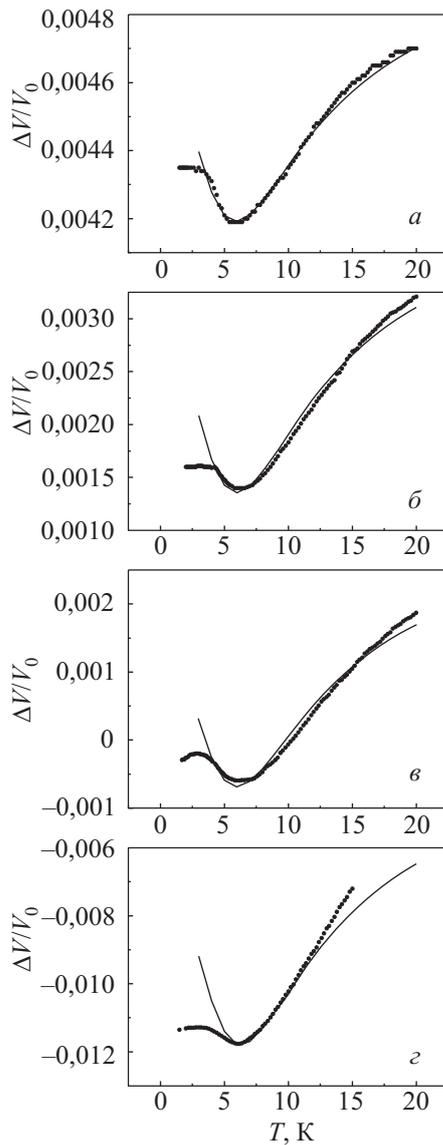


Рис. 3. Температурные зависимости относительного изменения фазовой скорости медленной поперечной волны в кристалле HgSe:Fe, полученные из эксперимента (темные кружки) и рассчитанные по формуле (19) (сплошные линии); концентрация железа:  $1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (а),  $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (б),  $7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  (в),  $2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  (г).

ражений, изложенных в работе [7], нами было принято значение  $(Vn_d / g_c) = 150 \text{ К}$ , оказавшееся, как и в подгонке теплоемкости, достаточно подходящим. Также оптимальными оказались значения ферми-жидкостного параметра  $A = -1,2$  и параметра ширины интервала гибридизации  $\Gamma = 40 \text{ К}$ , полученные в работе по объяснению аномалии теплоемкости. Однако несколько большее значение, чем при подгонке теплоемкости, получено для параметра ширины пика плотности состояний:  $\Delta = 5,7 \text{ К}$  вместо  $3,5 \text{ К}$ . С этим коррелирует значительно более медленное, хотя и заметное на пределе погрешности, возрастание с увеличением концентрации примесей энергии  $\epsilon_0$  (рис. 4), которая оказалась

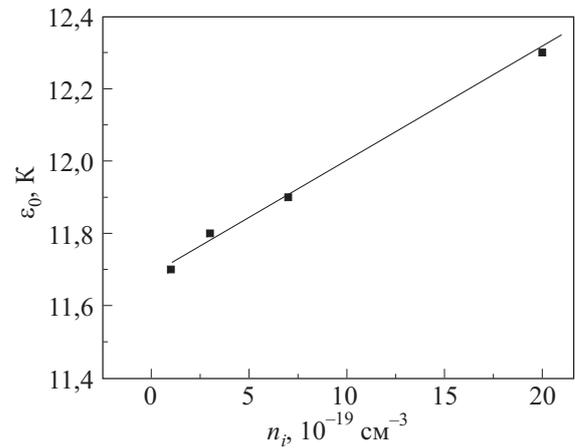


Рис. 4. Зависимость энергии  $\epsilon_0$  от концентрации примеси железа  $n_i$ , полученная при подгонке кривых рис. 2.

близкой к  $12 \text{ К}$  — значению, полученному также и при подгонке теплоемкости, но при наибольших концентрациях примесей. Эти несоответствия можно объяснить различием способов подготовки образцов для измерений теплоемкости и скорости звука, поскольку механические воздействия могут приводить к возрастанию концентрации неконтролируемых носителей тока, сглаживающих проявления локализации донорных электронов. В целом же можно считать, что установлено удовлетворительное согласие данных, полученных при интерпретации аномалий температурных зависимостей термодинамических величин (теплоемкости и скорости звука), как проявлений гибридизации примесных электронных состояний.

Таким образом, в итоге работы показано, что в температурной зависимости скорости медленной ультразвуковой волны в селениде ртути с примесями железа наблюдается низкотемпературная аномалия (минимум), объясняющаяся проявлением вклада примесных гибридизированных состояний электронов с учетом существенной роли их взаимодействия.

### Результаты и выводы

1. На основе общего теоретического описания температурной зависимости электронного вклада в модули упругости получена упрощенная формула, описывающая низкотемпературные аномалии скоростей ультразвука, которые обусловлены проявлениями гибридизированных состояний на донорных примесях с учетом межэлектронного взаимодействия, моделируемого введением ферми-жидкостных констант.

2. Получены экспериментальные данные по температурным зависимостям скоростей распространения ультразвука в кристалле селенида ртути с примесями железа вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  и установлено, что скорость медленной поперечной волны имеет характерную низкотемпературную аномалию, обусловлен-

ную вкладом электронов в гибридизированных состояниях на донорных примесях.

3. Выполнена количественная интерпретация наблюдавшейся аномальной температурной зависимости примесного вклада в скорость медленной ультразвуковой волны в селениде ртути с примесями железа, на основе которой подтверждены представления о физической природе этой зависимости как проявления электронных гибридизированных состояний на донорных примесях. Определены значения параметров гибридизированных состояний, согласующиеся с данными, полученными при изучении подобных аномалий в теплоемкости.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №09-02-01389) и следующих программ: Отделения физических наук РАН (грант №09-Т-2-1014) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (контракт № 02.740.11.0217).

1. В.И. Окулов, *ФНТ* **30**, 1194 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 897 (2004)].
2. В.И. Окулов, *ФММ* **100**, 23 (2005).
3. В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, К.С. Сазонова, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **30**, 441 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 328 (2004)].
4. В.И. Окулов, Т.Е. Говоркова, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, К.А. Окулова, Е.А. Памятных, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **33**, 282 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 207 (2007)].
5. В.И. Окулов, В.В. Гудков, Т.Е. Говоркова, И.В. Жевстовских, А.Т. Лончаков, С.Ю. Паранчич, *ФТТ* **49**, 1971 (2007).
6. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, В.П. Силин, *ФНТ* **35**, 891 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 702 (2009)].
7. В.И. Окулов, А.Т. Лончаков, Т.Е. Говоркова, К.А. Окулова, С.М. Подгорных, Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **37**, 281 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, No. 3 (2011)].
8. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, А.В. Гергер, *ФММ* **101**, 11 (2006).
9. V.V. Gudkov and J.D. Gavenda, *Magnetoacoustic Polarization Phenomena in Solids*, Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg (2000), p. 25.
10. A. Lehoczky, D.A. Nelson, and C.R. Whittett, *Phys. Rev.* **188**, 1069 (1969).

## Anomalies of temperature dependence of the contribution to sound velocity from hybridized electron states in transition element impurities

V.I. Okulov, V.V. Gudkov, I.V. Zhevstovskikh,  
A.T. Lonchakov, L.D. Paranchich,  
and S.Yu. Paranchich

The temperature dependence of sound velocity has been studied in mercury selenide crystals with iron impurities. The experiments were performed in the concentrations and temperatures ranges, where the manifestations of hybridized electron states in iron impurities have been revealed before. It is established that below 10 K the temperature dependence of slow transverse ultrasound wave velocity displays an anomalous nonmonotone section that is due to the influence of impurities and gives evidence of the existence of hybridized states. The observed anomalies of sound velocity are described by using the developed theory of electron contribution to elastic moduli, taking into account the effects of impurity state hybridization and electron–electron interaction. We have fitted the theoretical dependences to the experimental ones and have obtained quantitative information on the parameters of hybridized states and Fermi-liquid interaction.

PACS: 72.10.Fk Scattering by point defects, dislocations, surfaces, and other imperfections (including Kondo effect);  
72.20.Dp General theory, scattering mechanisms;  
72.80.Ey III–V and II–VI semiconductors.

Keywords: semiconductors, transition element impurities, hybridization electron states, electron contribution to sound velocity.