

Rudko G.Yu., Klimovskaya A.I., Valakh M.Ya. and Ostrovskii I.P. Visible light emission from free-standing filament crystals of silicon // *Phys. Stat. Solid. B.* – 1997. Vol. 161. – P. 565. 13. Винецкий Р.М., Городничий О.П., Шейхем Э.Г. Особенности рассеяния электронов в кристаллах кремния, содержащих кластеры // *ФТП.* – 1981. – Т. 15, № 5. – С. 1002. 14. Klimovskaya A.I., Ostrovskii I.P., Ostrovskaya A.S. Influence of growth conditions on morphology, composition, and electrical properties of n-Si wires // *Phys. Stat. Sol. A.* – 1996. – Vol. 153. – P. 465–472. 15. Трофимов И.Е., Денин А.И., Мухин В.П. Магнитосопротивление в D̄ зоне / *Препринт.* – М., 1989. 16. Горнык В.С. // *ФТП.* – 1994. – 28. – № 2. – С. 228–231. 17. Утамурадова Ш.Б., Далиев Х.С., Каландаров Э.К., Далиев Ш.Х. Об особенностях поведения атомов лантана и гафния в кремнии // *Письма в ЖТФ.* – 2006. – Т. 32, № 11. – С. 11–15. 18. Заячук Д.М., Рибак В.М., Рибак О.В. Особливості вирощування мікро кристалів GaAs під впливом домішки гадолінію // *Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”.* – 2000. – № 397. – С. 11–17. 19. Ионов А.Н., Шлимак И.С., Эфрос А.Л. Отрицательное магнитосопротивление в области прыжковой проводимости мотовского типа // *ФТТ.* – 1975. – 176. – С. 2763–2765.

УДК 621.315.592

О.П. Малик

Національний університет “Львівська політехніка”,  
кафедра напівпровідникової електроніки

## ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ З БЛИЗЬКОДІЮЧИМ ПОТЕНЦІАЛОМ КРИСТАЛІЧНИХ ДЕФЕКТІВ У ВУЗЬКОЩІЛИННОМУ ТВЕРДОМУ РОЗЧИНІ CdHgTe ПРИ НИЗЬКІЙ ТЕМПЕРАТУРІ

О Малик О.П., 2008

O.P. Malyk

## ELECTRON INTERACTION WITH SHORT-RANGE POTENTIAL OF THE LATTICE DEFECTS IN NARROW-GAP CdHgTe SOLID SOLUTION AT LOW TEMPERATURE

© Malyk O.P., 2008

Запропонована близькодійоюча модель розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації в твердому розчині  $Cd_xHg_{1-x}Te$  ( $0 \leq x \leq 0.36$ ). Розраховані температурні залежності рухливості електронів в інтервалі 4.2–300 К.

Model of electron scattering on the short-range potential caused by the static strain field in the solid solution  $Cd_xHg_{1-x}Te$  ( $0 \leq x \leq 0.36$ ) is proposed. The temperature dependences of electron mobility in the range 4.2–300 K are calculated.

### Вступ

Розсіяння електронів в твердому розчині  $Cd_xHg_{1-x}Te$  розглядали в наближенні часу релаксації в роботах [1–3]. Однак моделі розсіяння, що використовували в цих роботах, мають істотний недолік – вони є далекодійоючі. У них припускалося, що носій взаємодіє з усім кристалом (електрон-фононна взаємодія) або носій взаємодіє з потенціалом зарядженої домішки, радіус дії якого  $\sim 50$  –

$100a_0$  ( $a_0$  – стала ґратки). Однак таке припущення суперечить спеціальній теорії відносності, згідно з якою носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристала. Крім того, для дефектів з потенціалом взаємодії  $U \approx \frac{1}{r^n}$  ( $n=1,2$ ) на відстанях  $\sim 10 a_0$  потенціал стає величиною другого порядку, тоді як зазначені вище моделі розглядаються в першому (борнівському) порядку. З іншого боку, в роботі [4] були запропоновані близькодійні моделі розсіяння, в яких вищевказані недоліки були відсутні. До того ж припускалося, що носій взаємодіє з потенціалом дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки. Однак у цих двох підходах є спільний недолік – значна розбіжність теорії та експерименту при низьких температурах. Метою роботи є розробка додаткової близькодійної моделі розсіяння, яка б узгодила теорію та експеримент при низьких температурах.

### Теорія

Ймовірність переходу електрона з стану  $\mathbf{k}$  в стан  $\mathbf{k}'$ , зумовленого взаємодією з полярним оптичним (ПО), неполярним оптичним (НПО), п'єзооптичним (ПОП), п'єзоакустичним (ПАК), акустичним фононами (АК) та іонізованою домішкою (ІД) вибиралась згідно з роботою [4]:

$$W_{ПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64 \pi^7 \gamma_{PO}^{10} e^4}{225 \epsilon_0^2 a_0^4 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (1)$$

$$W_{НПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^3 E_{НПО}^2}{288 a_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \times \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}. \quad (2)$$

$$W_{ПОП}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left( \frac{32}{75} \right)^2 \frac{p^9 e^2 e_{14}^2 g_{PZ}^{10}}{e_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(\mathbf{e}' - \mathbf{e} + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (3)$$

$$W_{ПАК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{128 p^7 e^2 e_{14}^2 a_0^2 g_{PZ}^{10} k_B T}{225 e_0^2 \mathbf{h} G [x M_{Cd} + (1-x) M_{Hg} + M_{Te}]} \left( \frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 d(\mathbf{e}' - \mathbf{e}); \quad (4)$$

$$W_{АК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^3 k_B T E_{АК}^2}{144 \mathbf{h} G [M_x + M_{Te}]} \left( \frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 d(\mathbf{e}' - \mathbf{e}). \quad (5)$$

$$W_{ІД}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p e^4 Z_i^2 N_{ІД} g_{II}^4 a_0^4}{2 e_0^2 \mathbf{h} V} d(\mathbf{e}' - \mathbf{e}), \quad (6)$$

де  $M_x = xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg}$ ,  $M_{Hg}$ ,  $M_{Cd}$ ,  $M_{Te}$  – маса атома;  $G$  – кількість елементарних комірок в об'ємі кристала;  $\epsilon_0$  – діелектрична стала;  $e$  – заряд електрона;  $N_{LO}$ ;  $N_{TO}$  – число поздовжніх (LO) та поперечних (TO) фононів з частотою  $w_{LO}$  і  $w_{TO}$  відповідно;  $e_{14}$  – компонента п'єзоелектричного тензора;  $k_B$  – стала Больцмана;  $c_{LO}$ ,  $c_{TO}$  – відповідні швидкості звуку;  $V$  – об'єм кристала;  $N_{ІД}$  – концентрація іонізованих домішок;  $Z_i$  – кратність іонізації домішки;  $\mathbf{h}$  – стала Планка;  $d(\mathbf{e})$  – дельта-функція Дірака.  $E_{АК}$ ,  $E_{НПО}$  акустичний та оптичний потенціали деформації відповідно;  $g_{PO}$ ,  $g_{PZ}$ ,  $g_{II}$  – підгоночні параметри, що визначають радіус дії близькодійного потенціалу ( $R = g a_0$ ,  $0 \leq g_{PO}, g_{PZ} \leq 0.86$ ,  $0 \leq g_{II} \leq 1$ ).

Варто відзначити, що сильна степенева залежність підгоночних параметрів різко обмежує можливість вибору їх числових значень.

Для опису взаємодії електрона з потенціалом неупорядкованості (НП) використовувалась ймовірність переходу, визначена в роботі [5].

Крім вищезгаданих механізмів розсіяння розглянемо так званий механізм розсіяння на потенціалі статичної деформації (СД). Згідно з роботою [6] потенціал, спричинений полем деформації, має вигляд:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{9b_0^3 e e_{14}}{e_0} \frac{1}{r^2}, \quad (7)$$

де величина  $b_0$  має розмірність довжини і пов'язана з розміром дефекту.

У виразі (7) кутова залежність поля деформації знехтувана. Дотримуючись принципу близькодії, прийемо, що  $b_0 = a_0$ . Для розрахунку матричного елемента переходу використовувалася хвильова функція електрона у вигляді плоскої хвилі, нормованої на об'єм кристала:

$$\langle \mathbf{k}' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \frac{9a_0^3 e e_{14}}{Ve_0} \frac{4}{q} Si(qR), \quad (8)$$

де  $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ ;  $Si(x)$  – інтегральний синус.

Попередній розрахунок показує, що хвильовий вектор електрона (і величина  $q$  разом з ним) змінюється в межах  $0 - 10^9 \text{ м}^{-1}$  при зміні енергії в межах  $0 - 10 \text{ кВТ}$  в інтервалі температур 4.2–300 К. Для значення  $R \approx 10^{-10} \text{ м}$  це дає оцінку для  $Si(x) = C \approx 0.1$ . У результаті вираз для ймовірності переходу має вигляд:

$$W_{CD}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2592}{Ve_0^2 \mathbf{h}} \frac{3C^2 a_0^6 e^2 e_{14}^2 N_{SS}}{q^2} d(e' - e), \quad (9)$$

де  $N_{SS}$  – концентрація дефектних центрів.

При використанні формалізму точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [8] в інтегралі по кутовій змінній  $q$  з'являється логарифмічна розбіжність. Для уникнення цієї розбіжності діємо так: обмежимо нижню межу інтеграла так, щоб узгодити теорію з експериментом, тобто, використаємо цей інтеграл як підгоночний параметр:

$$g_{SS} = \int_{q_0}^p \frac{\sin q}{1 - \cos q} dq, \quad (10)$$

де  $q_0$  – кут, що відповідає підгоночному параметру  $g_{SS}$ .

Зауважимо, що аналогічний спосіб вибору нижньої границі інтеграла використовується і в методі Конуелла-Вайскопфа [9]. Однак отримані при цьому значення радіуса дії потенціалу є занадто великі (наприклад, для концентрації дефектів  $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$  величина  $R \sim 160 a_0$ ).

Після цього отримаємо величини  $K_{ba}^{nm}$ , що фігурують у формалізмі точного розв'язку рівняння Больцмана:

$$K_{ba}^{nm} = -\frac{2V}{(2p)^3} \frac{2^5 3^3 p^2 a_0^6 C^2 \mathbf{h} e^2 e_{14}^2 N_{SS}}{e_0^2 k_B T} d_{ab} \int f_{0n}(e) [1 - f_{0n}(e)] k^4(e) \left[ \frac{dk(e)}{de} \right]^2 e^{n+m} de, \quad (11)$$

де  $f_{0n}(e)$  – функція Фермі-Дірака для електронів;  $d_{ab}$  – символ Кронекера і початок відліку енергії розташовані на дні зони провідності.

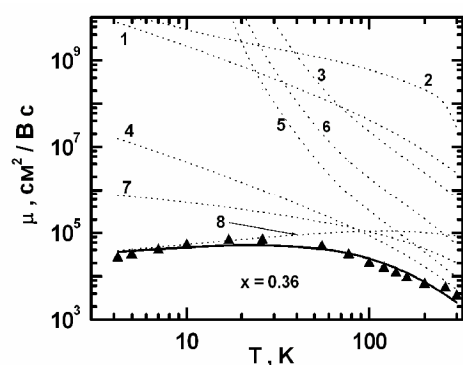
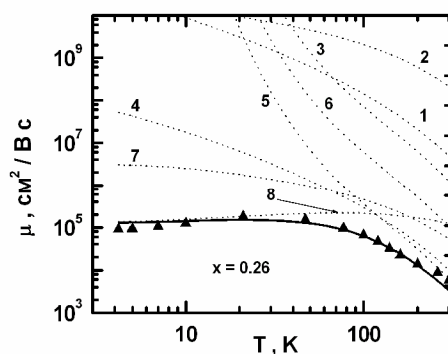
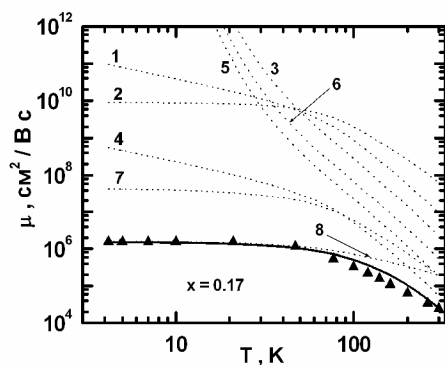
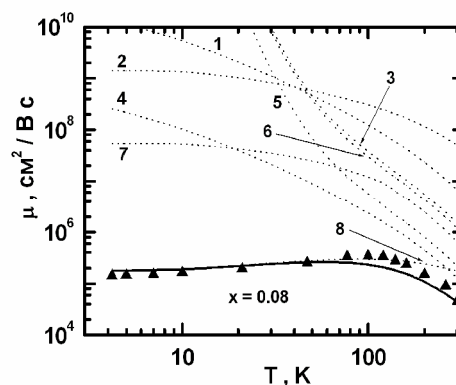
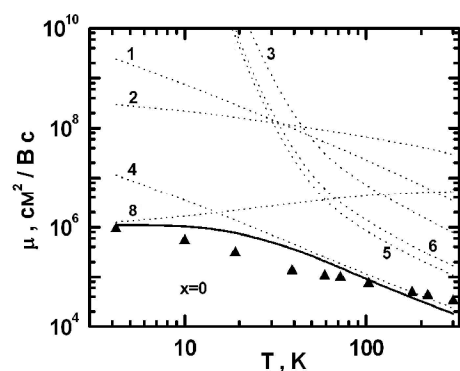
Відзначимо, що в (11) як підгоночний параметр фігурує добуток  $g_{SS} N_{SS}$ .

### Аналіз отриманих результатів

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів виконували з експериментальними даними, наведеними в [2, 3] для кристалів  $Cd_xHg_{1-x}Te$  з складом  $x = 0; 0.08; 0.17; 0.26; 0.36$ . Для всіх кристалів припускалась модель однократно іонізованої домішки, а рівень Фермі для  $x = 0; 0.08; 0.17; 0.26$  визначався з рівняння  $n - p = N_{4.2}$  ( $N_{4.2}$  – концентрація іонізованої домішки при 4.2 К) і для  $x = 0.36$  – з рівняння  $n = N_D = 1/eR_{exp}$  ( $R_{exp}$  – експериментальне значення коефіцієнта Холла,  $N_D$  – концентрація донорів).

### Значення параметрів розсіяння $g$

$x$	$g_{PO}$	$g_{PZ}$	$g_{II}$	$g_{ss}N_{ss} (\times 10^{14} \text{ cm}^{-3})$
0	0.51	0.46	1.0	0.06
0.08	0.50	0.40	1.0	2.4
0.17	0.53	0.45	1.0	2.0
0.26	0.70	0.50	1.0	2.0
0.36	0.63	0.50	1.0	2.0



Температурна залежність рухливості електронів в  $Cd_xHg_{1-x}Te$ . Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НІ, СД механізми розсіяння.

Експеримент – [2, 3]

Під час розрахунків приймали ті самі параметри матеріалу, що і в роботі [4]. Теоретичні залежності  $m(T)$  показані на рисунку. Суцільні лінії зображають криві, отримані на основі близькодійючих моделей у межах точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці наведені отримані значення параметрів розсіяння  $g$ . Бачимо, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки значення різних механізмів розсіяння на рисунку точковими лініями зображені відповідні залежності. Як очевидно, при низьких температурах ( $T < 50$  K) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації та розсіяння на п'єзоакустичному фоні. Розсіяння неупорядкованості також мають велике значення в цьому інтервалі. При високих температурах внесок розсіяння на полярних оптичних фонах стає істотним. Решта механізмів розсіяння – АК-, ПОП-, НПО- та ІД- механізми розсіяння – роблять нехтовно малий внесок.

### Висновки

Запропонована близькодійюча модель розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації в  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  ( $0 \leq x \leq 0.36$ ) добре узгоджує теорію та експеримент в дослідженому інтервалі температур.

1. Szymanska W., Dietl T. // *J. Phys. Chem. Solids.* – 1978. – **39**. – P. 1025–1040. 2. Dubowski J.J., Dietl T., Szymanska W., Galazka R.R. // *J. Phys. Chem. Solids.* – 1981. – **42**. – P. 351–362. 3. Scott W. // *J. Appl. Phys.* – 1972. – **43**. – P. 1055–1062. 4. Malyk O.P. // *Mater. Sci. & Engineering B.* – 2006. – **129**. – P. 161–171. 5. Dubowski J.J. // *Phys. Status Solidi (b).* – 1978. – **85**. – P. 663–672. 6. Fedders P.A. // *J. Appl. Phys.* – 1983. – **54**. – P. 1804–1807. 7. Malyk O. P. // *WSEAS Trans. Math.* – 2004. – **3**. – P. 354–357. 8. Conwell E.M., Weisskopf V.F. // *Phys. Rev.* – 1950. – **77**. – P. 388–390.