

ЛОКАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ З ПОТЕНЦІАЛОМ КРИСТАЛІЧНИХ ДЕФЕКТІВ У ТВЕРДОМУ РОЗЧИНІ $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.52; 0.59; 1$) ЗА НИЗЬКОЇ ТЕМПЕРАТУРИ

О.П. Малик

Національний університет “Львівська політехніка”
 вул. С. Бандери 12, 79013, Львів, Україна

(Отримано 17 липня 2008 р.)

Запропоновано близькодіючу модель розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації в твердому розчині $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.52; 0.59; 1$). Розраховано температурні залежності рухливості електронів в інтервалі 4.2 – 300K.

Ключові слова: явища переносчу, розсіяння носіїв заряду.

PACS: 72.20.Dr

УДК: 621.315.592

Вступ

Розсіяння електронів у твердому розчині $Cd_xHg_{1-x}Te$ розглядалося в наближенні часу релаксації у [1–3]. Однак моделі розсіяння, що використовувалися у цих роботах, мають істотний недолік – вони є далекодіючі. У них припускалось, 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 (для електрон-фононної взаємодії). Крім того, для дефектів з потенціалом взаємодії $U \approx \frac{1}{r^n}$ ($n = 1, 2$) на відстанях $\sim 10a_0$ потенціал стає величиною другого порядку, тоді як зазначені вище моделі розглядаються у першому (борнівському) порядку. З іншого боку, у [4] були запропоновані близькодіючі моделі розсіяння, в яких вищевказані недоліки були відсутні. При цьому припускалося, що носій взаємодіє з потенціалом дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки. Однак у цих двох підходах є спільний недолік – значне розходження теорії та експерименту за низьких температур.

Мета роботи – розроблення додаткової близькодіючої моделі розсіяння, яка б узгодила теорію та експеримент за низьких температур.

I. Теорія

Ймовірність переходу електрона зі стану \mathbf{k} в стан \mathbf{k}' , викликаного взаємодією з полярним оптичним (ПО), неполярним оптичним (НПО), п'єзооптичним (ПОП), п'єзоакустичним (ПАК), акустичним фононами (АК) та іонізованою домішкою (ІД) вибиралась

згідно з [4]:

$$W_{ПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64\pi^7 \gamma_{PO}^{10} e^4}{225 \epsilon_0^2 a_0^4 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{LO})] + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}; \quad (1)$$

$$W_{НПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi^3 E_{НПО}^2}{288 a_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{LO})] + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}; \quad (2)$$

$$W_{ПОП}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left(\frac{32}{75} \right)^2 \frac{\pi^9 e^2 e_{14}^2 \gamma_{PZ}^{10}}{\epsilon_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{LO})] + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}; \quad (3)$$

$$W_{ПАК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{128\pi^7 e^2 e_{14}^2 a_0^2 \gamma_{PZ}^{10} k_B T}{225 \epsilon_0^2 \hbar G [x M_{Cd} + (1-x) M_{Hg} + M_{Te}]} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta(\epsilon' - \epsilon); \quad (4)$$

$$W_{АК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi^3 k_B T E_{АК}^2}{144 \hbar G^2} [M_x + M_{Te}] \times$$

$$\times \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta(\epsilon' - \epsilon); \quad (5)$$

$$W_{ІД}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi e^4 Z_i^2 N_{ІД} \gamma_{ІД}^4 a_0^4}{2 \epsilon_0^2 \hbar V} \delta(\epsilon' - \epsilon), \quad (6)$$

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; ϵ_0 – діелектрична стала; e – заряд електрона; N_{LO} ; N_{TO} – число поздовжніх (ЛО) та поперечних (ТО) фононів з частотою ω_{LO} і ω_{TO} відповідно; e_{14} – компонента п'єзоелектричного тензора; k_B – стала Больцмана; c_{LO} , c_{TO} – відповідні швидкості звуку; V – об'єм кристала; N_{ID} – концентрація іонізованих домішок; Z_i – кратність іонізації домішки; \hbar – стала Планка; $\delta(\epsilon)$ – дельта-функція Дірака; E_{AK} , E_{HPO} – акустичний та оптичний потенціали деформації відповідно; γ_{PO} , γ_{PZ} , γ_{II} – підгоночні параметри, що визначають радіус дії близькодіючого потенціалу ($R = \gamma a_0$, $0 \leq \gamma_{PO}, \gamma_{PZ} \leq 0.86$, $0 \leq \gamma_{II} \leq 1$).

Варто зазначити, що сильна степенева залежність підгоночних параметрів різко обмежує можливість вибору їх чисельних значень.

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

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

$$U(\mathbf{r}) = \frac{9b_0^3 e e_{14}}{\epsilon_0} \frac{1}{r^2}, \quad (7)$$

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

У виразі (7) кутовою залежністю поля деформації знехтувано. 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:

$$\langle \mathbf{k}' | U(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \frac{9a_0^3 e e_{14}}{V \epsilon_0} \frac{4\pi}{q} Si(qR), \quad (8)$$

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 $0 - 10^9 \text{ м}^{-1}$ за зміни енергії в межах $0 - 10k_B T$ в інтервалі температур $4.2 - 300 \text{ К}$. 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

$$W_{CD}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2^5 3^4 \pi^3 C^2 a_0^6 e^2 e_{14}^2 N_{SS}}{V \epsilon_0^2 \hbar} \frac{1}{q^2} \delta(\epsilon' - \epsilon), \quad (9)$$

де N_{SS} – концентрація дефектних центрів.

При використанні формалізму точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [7] в інтегралі по кутовій змінній θ з'являється логарифмічна розбіжність. Для уникнення цієї розбіжності поступаємо так: обмежимо нижню границю інтеграла так, щоб узгодити теорію з експериментом, тобто використаємо цей інтеграл як підгоночний параметр:

$$\gamma_{SS} = \int_{\theta_0}^{\pi} \frac{\sin \theta}{1 - \cos \theta} d\theta, \quad (10)$$

де θ_0 – кут, що відповідає підгоночному параметру γ_{SS} .

Зауважимо, що аналогічний спосіб вибору нижньої границі інтеграла використовується і в методі Конуелла-Вайскопфа [8]. Однак отримані при цьому значення радіуса дії потенціалу є занадто великі (наприклад, для концентрації дефектів $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ величина $R \sim 160a_0$).

Після цього отримуємо величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$, що фігурують у формалізмі точного розв'язку рівняння Больцмана:

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = - \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2^5 3^3 \pi^2 a_0^6 C^2 \hbar e^2 e_{14}^2 N_{SS} \gamma_{SS}}{\epsilon_0^2 k_B T} \delta_{\alpha\beta} \times \int f_{0n}(\epsilon) [1 - f_{0n}(\epsilon)] k^4(\epsilon) \left[\frac{dk(\epsilon)}{d\epsilon} \right]^2 \epsilon^{n+m} d\epsilon, \quad (11)$$

де $f_{0n}(\epsilon)$ – функція Фермі-Дірака для електронів; $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера і початок відліку енергії знаходиться на дні зони провідності.

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

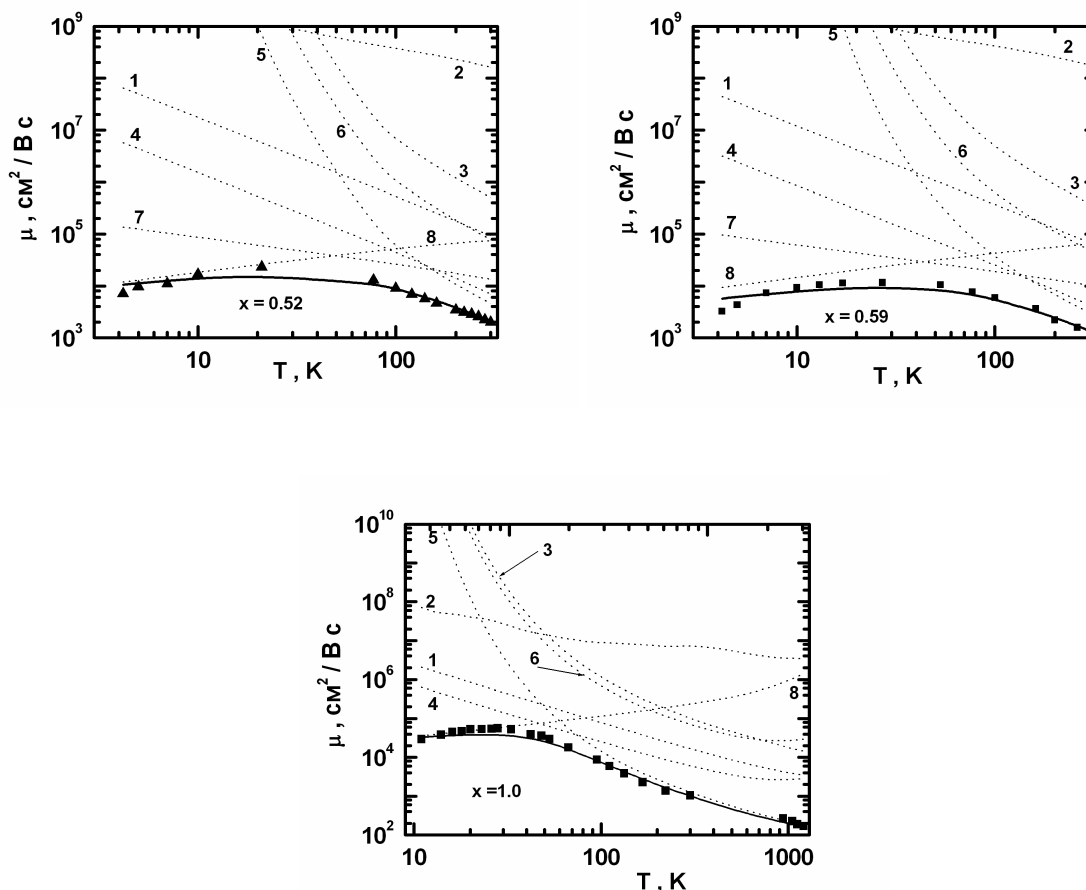
II. Аналіз отриманих результатів

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими у [2, 3] для кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ зі складом $x = 0.52; 0.59; 1.0$. Для $x = 0.52; 0.59$ припускалась модель однократно іонізованої домішки, а рівень Фермі визначався з рівняння $n = N_D = 1/eR_{exp}$ (R_{exp} – експериментальне значення коефіцієнта Холла, N_D – концентрація донорів). Для $x = 1$ рівень Фермі розраховувався з рівняння нейтральності з врахуванням моделі структури дефектів, поданої у [2] (таблиця).

Параметри розсіяння

x	γ_{PO}	γ_{PE}	γ_{ID}	$\gamma_{CD} N_{CD}$ ($\times 10^{14} \text{ см}^{-3}$)
0.52	0.66	0.47	1.0	2.0
0.59	0.67	0.48	1.0	3.0
1.00	0.64	0.59	1.0	11.0

При розрахунках для $x < 1$ приймалися ті самі параметри матеріалу, що і в [4]. Для $x = 1$ приймалися такі параметри: ефективна маса важких дірок $m_{hh} = 0.63m_0$ (m_0 – маса електрона) [9]; спин-орбітальне розщеплення $\Delta = 0.92eV$ [10]; $e_{14} = 0.03457 - 1.39 \times 10^{-5} T \text{ Кл/м}^2$ [9]. Теоретичні залежності $\mu(T)$, показані на рисунку. Суцільні лінії представляють криві, отримані на основі близькодіючих моделей у межах точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці наведено отримані значення параметрів розсіяння γ . Бачимо, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур.



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].

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рисунку точковими лініями показано відповідні залежності. Як бачимо, за низьких температур ($T < 50 K$) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації та розсіяння на п'єзоакустичному фоні. Розсіяння неупорядкованості теж відіграють значну роль у цьому інтервалі. За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фонах стає істотним. Решта механізмів розсіяння – АК-, ПОП-, НПО- та ІД- механізми розсіяння – дають знехтувано малий внесок.

Висновки

1. Запропонована близькодійоча модель розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації в $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.52; 0.59.1$) дає добре узгодження теорії та експерименту в дослідженому інтервалі температур.
2. Завершена розробка послідовної близькодійочої теорії розсіяння носіїв заряду в твердому розчині $Cd_xHg_{1-x}Te$.

Література

- [1] Szymanska W., Dietl T. // J. Phys. Chem. Solids. – 1978. – 39. – P.1025–1040.
- [2] Segall B., Lorenz M.R., Halsted R.E. // Phys. Rev. – 1963. – 129. – P.2471–2481.
- [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.

[9] Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology (New Series), III / 11, Springer Verlag. – Berlin, 1984.

[10] Wepfer G.G. , Collins T.C. and Euwema R.N. // Phys. Rev. – 1971. – B9. – P.1296–1301.

THE LOCAL ELECTRON INTERACTION WITH THE POTENTIAL OF THE LATTICE DEFECTS IN $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.52; 0.59; 1$) SOLID SOLUTION AT LOW TEMPERATURE

O.P. Malyk

*National University "Lvivska Politechnika"
12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

Model of electron scattering on the short-range potential caused by the static strain field in the solid solution $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x = 0.52; 0.59; 1$) is proposed. The temperature dependences of electron mobility in the range 4.2 – 300K are calculated.

Keywords: transport phenomena, charge carrier scattering.

PACS: 72.20.Dp

УДК: 621.315.592