

МОДЕЛЮВАННЯ ЛОКАЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ ВАЖКИХ ДІРОК З ПОТЕНЦІАЛОМ ДЕФЕКТІВ В HgTe

О.П. Малик^а, І.С. Собчук^б

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

^б Львівський Національний медичний університет ім. Данила Галицького,
кафедра медичної інформатики

(Отримано 9 липня 2007 р.)

Розглянуто моделі розсіяння важких дірок на близькодіючому потенціалі, зумовленому взаємодією з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, іонізованими домішками в HgTe. Розраховані температурні залежності рухливості важких дірок в інтервалі 4.2 - 300 К.

Ключові слова: напівпровідники, явища переносу.

PACS: 72.10.-D

УДК: 621.315.592

Вступ

Розсіяння важких дірок у твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te розглядали в наближенні часу релаксації у роботах [1–10]. Однак розглянуті в цих роботах моделі розсіяння мають один істотний недолік – вони є далекодійними. Крім того, в цих моделях використовується макроскопічний параметр, діелектрична проникність, який не має сенсу в мікроскопічних процесах. З іншого боку, в роботах [11–14] розглядалися близькодійні моделі взаємодії електрона з дефектами кристалічної ґратки, в яких були відсутні вищевказані недоліки. Метою цієї роботи є застосування цього підходу для опису процесів розсіяння важких дірок на різних типах дефектів кристалічної ґратки.

І. Теорія

У загальному випадку перенесення заряду в HgTe здійснюється трьома типами носіїв заряду: електронами зони провідності, важкими та легкими дірками валентної зони. З рівняння нейтральності випливає, що в інтервалі 4.2 < T < 300K концентрація легких

дірок становить величину ~ 1% величини концентрації важких дірок, а отже, внеском легких дірок можна знехтувати. Тоді за наявності двох типів носіїв коефіцієнт Холла і питома провідність визначаються з виразів

$$R = - \frac{\sigma_{12}^n + \sigma_{12}^p}{\left[(\sigma_{11}^n + \sigma_{11}^p)^2 + (\sigma_{12}^n + \sigma_{12}^p)^2 \right] B}; \sigma = \sigma_{11}^n(0) + \sigma_{11}^p(0),$$

де $\sigma_{ik}(B)$ ($i, k = 1, 2$) – компоненти тензора провідності для електронів та важких дірок, B – індукція магнітного поля.

Величини σ_{ik} для електронів розраховували на основі близькодійних моделей. Параметри γ моделей розсіяння електронів вибирались ті самі, що і в роботі [14], за винятком γ_{ID} (розсіяння на іонізованій домішці), який приймали таким, що дорівнює 1 для узгодження теорії та експерименту.

Ймовірності переходу важкої дірки зі стану k в стан k' при взаємодії з полярним оптичним (ПО), п'єзооптичним (ПОП) та п'єзоакустичним (ПАК) фононами та іонізованою домішкою (ІД) вибирали у вигляді [14]:

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

$$W_{ПОП}(k, k') = \left(\frac{32}{75} \right)^2 \frac{\pi^9 e^2 e_{14}^2 \gamma_{PZ}^{10}}{\epsilon_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\epsilon' - \epsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\epsilon' - \epsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}; \quad (2)$$

$$W_{ПАК}(k, k') = \frac{128\pi^7 e^2 e_{14}^2 a_0^2 \gamma_{PZ}^{10} k_B T}{225\varepsilon_0^2 \hbar G [xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg} + M_{Te}]} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (3)$$

$$W_{LD}(k, k') = \frac{\pi e^4 Z_i^2 N_i \gamma_{II}^4 a_0^4}{2\varepsilon_0^2 \hbar V} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (4)$$

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; a_0 – постійна ґратки; 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; c_{LO} , c_{TO} – поздовжня та поперечна швидкості звуку відповідно; Z_i – кратність іонізації зарядженої домішки; N_i – концентрація іонізованих домішок; γ_{PO} , γ_{PZ} , γ_{II} – параметри розсіяння, які підбиралися так, щоб узгодити теорію та експеримент, ε , ε' – енергія носія до і після розсіяння.

Розсіяння важких дірок на неполярних оптичних (НПО) фонах розглядалося на основі ефективного потенціалу деформації, запровадженого в роботі [15]

$$E_{НПО} = \frac{M_x + M_{Te}}{2(M_x M_{Te})^{1/2}} \left[\frac{C_t \left(\frac{C_l}{C_c} + 2 \right)}{2\rho\omega_{LO}^2 a_0^2} \right]^{1/2} d_0, \quad (5)$$

де ρ – густина; $d_0 = 29.8 \text{ eV}$ – оптичний потенціал деформації; $C_l = (3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/5$; $C_t = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5$; C_{11} , C_{12} , C_{44} – пружні константи.

Розсіяння важких дірок на акустичних (АК) фонах розглядалося на основі ефективного акустичного потенціалу деформації [16]:

$$E_{АК} = \frac{C_l/C_t + 2}{6C_l/C_t} \left[a^2 + \frac{C_l}{C_t} \left(b^2 + \frac{d^2}{2} \right) \right], \quad (6)$$

де a , b , d – потенціали деформації, визначені в роботі [17].

Використовуючи формалізм точного розв'язку рівняння Больцмана [18,19], отримуємо вирази для величин $K_{\beta\alpha}^{nm}$, які необхідні для визначення компонентів тензора провідності σ :

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{ПО} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{16\pi^6 e^4 \hbar^2 \gamma_{PO}^{10} \delta_{\alpha\beta}}{675\varepsilon_0^2 a_0 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \times \\ \times \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{ N_{LO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO}) + \right. \\ \left. + (N_{LO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{LO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon + \right. \\ \left. + \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{ N_{TO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO}) + \right. \\ \left. + (N_{TO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{TO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \right]; \quad (7)$$

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{ПОП} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \left(\frac{32}{75} \right)^2 \frac{\pi^8 e^2 e_{14}^2 \hbar^2 \gamma_{PZ}^{10} a_0^3 \delta_{\alpha\beta}}{12\varepsilon_0^2 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \times \\ \times \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{ N_{LO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO}) + \right. \\ \left. + (N_{LO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{LO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon + \right. \\ \left. + \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{ N_{TO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO}) + \right. \\ \left. + (N_{TO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{TO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \right]; \quad (8)$$

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{ПАК} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{128\pi^6 e^2 e_{14}^2 a_0^2 \gamma_{PZ}^{10} \hbar}{675\varepsilon_0^2 \rho} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \times \\ \times \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon; \quad (9)$$

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{LD} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{Z_i^2 N_i e^4 a_0^4 \gamma_{II}^4 \hbar}{6\varepsilon_0^2 k_B T} \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon. \quad (10)$$

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{АК} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar E_{АК}^2}{432\rho} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \times \\ \times \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon, \quad (11)$$

$$K_{\beta\alpha}^{nm}{}_{\text{НПО}} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar^2 E_{\text{НПО}}^2 a_0}{12 \times 288 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \delta_{\alpha\beta} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \times$$

$$\times \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{ N_{LO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{LO}) + \right.$$

$$+ (N_{LO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{LO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon +$$

$$+ \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{ N_{TO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO})^{1/2} \theta(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar\omega_{TO}) +$$

$$\left. + (N_{TO} + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_{TO})^{1/2} \} (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \right]; \quad (12)$$

де $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера; $f_0(\varepsilon)$ – рівноважна функція Фермі–Дірака важких дірок; $\theta(x)$ – ступінчата функція; k_B – стала Больцмана; N_{LO} ; N_{TO} – число поздовжніх (LO) та поперечних (TO) фононів з частотою ω_{LO} і ω_{TO} відповідно; m_{hh} – ефективна маса важких дірок.

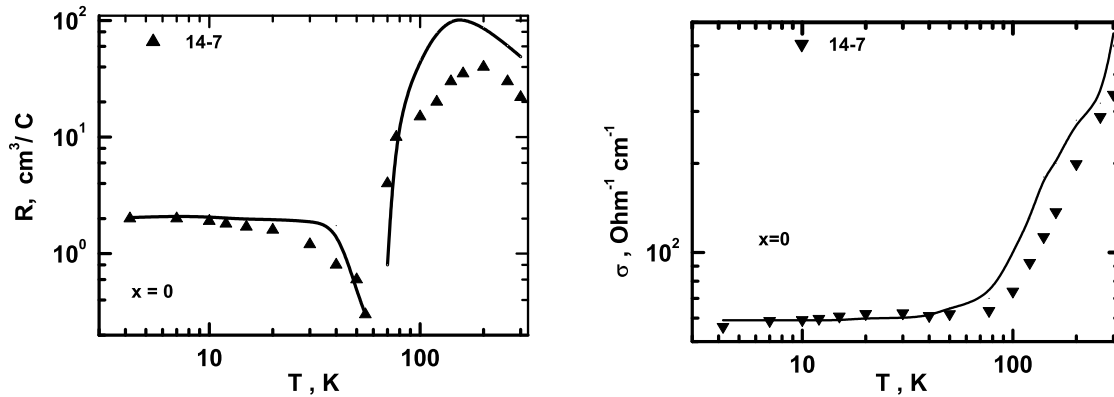


Рис. 1. Температурні залежності коефіцієнта Холла та електропровідності в HgTe

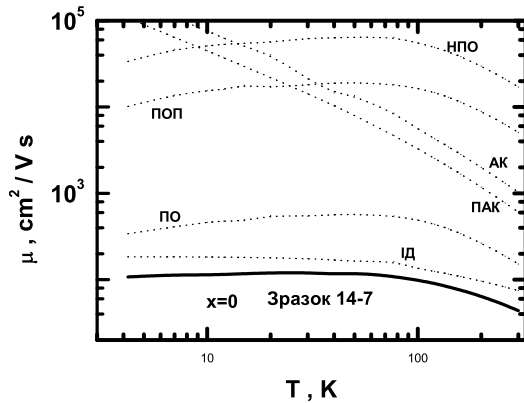


Рис. 2. Температурна залежність рухливості важких дірок в HgTe. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння

Аналіз отриманих результатів

Порівняння теоретичних і експериментальних температурних залежностей коефіцієнта Холла та електропровідності здійснювали для зразка 14-7 з роботи [1], який при $T = 4.2 \text{ K}$ мав значення коефіцієнта Холла $R \sim 2 \text{ cm}^3/\text{Kл}$ при $B = 0.6 \text{ Тл}$. Для отримання такого теоретичного значення коефіцієнта Холла необхідно припустити, що концентрація іо-

нізованих акцепторів у цьому зразку становить $N_A^+ \sim 3.25 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Відповідно розрахунок теоретичних кривих проводили на основі рівняння нейтральності: $p - n = N_A^+$. Як видно з температурних залежностей коефіцієнта Холла та електропровідності, показаних на рис. 1, теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментом в інтервалі температур 4.2 – 300 K, тобто, як в області діркового типу провідності так і в області змішаної провідності. Параметри γ для різних механізмів розсіяння важких дірок мають таке значення: $\gamma_{PO} = 0.45$, $\gamma_{PZ} = 0.30$, $\gamma_{II} = 0.56$. Для оцінки значення різних механізмів розсіяння на рис. 2 пунктирними лініями показані криві для відповідних механізмів розсіяння. Видно, що у всьому розглянутому інтервалі температур основним механізмом є розсіяння на іонізованих домішках та розсіяння на полярних оптичних фононах. Решта механізми – розсіяння на акустичних, п'єзооптичних, п'єзоакустичних та неполярних оптичних фононах – дають нехтувано малий внесок.

Висновки

На основі принципу близькодії розглянуто процеси розсіяння важких дірок на різних дефектах кристалічної ґратки в HgTe. Встановлено достатньо добру узгодженість між теорією та експериментом в інтервалі температур 4.2 – 300 K.

Література

- [1] Ivanov-Omskii V.I., Kolomiets B.T., Malkova A.A., Ogorodnikov V.K., Smekalova K.I. // *Phys.Status Solidi* 8 (1965) 613–618.
- [2] Harman T.S., Honig J.M., Trent P.J. // *J. Phys. Chem. Solids* 28 (1967) 1995–2000.
- [3] Whitsett C.R., Nelson D.A. // *Phys. Rev. B* 5 (1972) 3125–3129.
- [4] Dziuba Z., Wrobel J. // *Phys.Status Solidi (b)* 100 (1980) 379–387.
- [5] Dziuba Z., Szlenk K. // *J. Phys. Chem. Solids* 45 (1984) 97–103.
- [6] Meyer J.R., Bartoli F.J., Hoffman C.A. // *J. Vac. Sci. Technol. A* 5 (1987) 3035–3039.
- [7] Wijewamasuriya P.S., Boukerche M., Faurie J.P. // *J. Appl. Phys.* 67 (1990) 859–862.
- [8] Yadava R.D.S., Gupta A.K., Warriar A.V.R. // *J. Electron. Mater.* 23 (1994) 1359–1378.
- [9] Malyk O.P., Budjack Ja.S. // *Ukr. J. Phys.* 39 (1994) 477–480.
- [10] Yongsheng Gui, Biao Li, Guozhen Zheng, Yong Chang, Shanli Wang, Li He, Junhao Chu // *J. Appl. Phys.* 84 (1998) 4327–4331.
- [11] Malyk O.P. // *J. Alloys Compd.* 379 (2004) 60–63.
- [12] Malyk O.P. // *Ukr. J. Phys.* 49 (2004) 677–680.
- [13] Malyk O.P. // *Comput. Mater. Sci.* 33 (2005) 153–156.
- [14] Malyk O.P. // *Mater. Sci. & Engineering B* 129 (2006) 161–171.
- [15] Wiley J.D. // *Solid State Commun.* 8 (1970) 1865–1868.
- [16] Wiley J.D., DiDomenico M. // *Phys. Rev. B* 2 (1970) 427–433.
- [17] Weill G., Verie C. // *C. R. Acad. Sci.* 263 (1966) 463–465.
- [18] Malyk O.P. // *WSEAS Trans. Math.* 3 (2004) 354–357.
- [19] Malyk O.P. // *J. Alloys Compd.* 371 (2004) 146–149.

THE MODELING OF THE LOCAL HEAVY-HOLE INTERACTION WITH DEFECT POTENTIAL IN HgTe

O.P. Malyk^a, I.S. Sobchuk^b

^a *National University “Lvivska Politechnika”
12 S. Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

^b *Danylo Galytskii Medical National University, Medical Information Science Department*

Models of heavy-holes scattering on the short-range potential caused by interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons and ionized impurities in HgTe are considered. The temperature dependences of heavy-hole mobility in temperature range 4.2 - 300 K are calculated.

Keywords: semiconductors, transport phenomena.

PACS: 72.10.-D

UDK: 621.315.592