

1. Havriliak S., Negami S. // *Polymer*. – 1967. – 8. – P. 161–165.
2. Kovalskij P.N., Kravciv N.M., Mackus P., Lipskis K. // *J. Non-Cryst. Solids*. – 1987. – 90. – P. 657–660.
3. Ковальський П.М., Кравців М.М., Станько М.Г., Шпотюк О.Й. // *Укр. фіз. журн.* – 1993. – 38. – С. 1728–1732.
4. Ковальський П.Н., Кравців Н.М., Манжара В.С., Станько Н.Г., Юрківська Л.И. // *Укр. фіз. журн.* – 1990. – 35. – С. 532–535.
5. Chudacek I., Slavinska D., Krisciunas V., Kuliesius F., Mackus P. // *Progr. Colloid Polym. Sci.* – 1988. – 78. – P. 21–26.
6. Saha K., Abbi S.C., Pohl H.A. // *J. Non-Cryst. Solids*. – 1976. – 22. – P. 291–297.
7. Negami S., Ruch R.J., Myers R.R. // *J. Colloid. Interf. Sci.* – 1982. – 90. – P. 117–123.
8. Рез И.С., Поплавко Ю.М. *Диэлектрики*. – М., 1989.
9. Свердлова О.В. *Электронные спектры в органической химии*. – Л., 1973.
10. Halpern V. // *Physica B*. – 1975. – 79. – P. 323–335.

УДК 621.315.592

О.П. Малик, Г.В. Кеньо

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра напівпровідникової електроніки

НЕПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ДІРОК НА ОПТИЧНИХ КОЛИВАННЯХ КРИСТАЛІЧНОЇ ГРАТКИ В HgTe

© Малик О.П., Кеньо Г.В., 2002

O.P. Malyk, G.V. Kenyo

NONELASTIC HOLE SCATTERING ON THE OPTICAL VIBRATIONS OF CRYSTALL LATTICE IN HgTe

© Malyk O.P., Kenyo G.V., 2002

Точним розв'язком стаціонарного рівняння Больцмана отримано нерівноважну функцію розподілу носіїв заряду. В інтервалі температур 4,2–300 К розглянуто основні механізми розсіювання дірок з врахуванням непружної взаємодії дірок з оптичними коливаннями кристалічної ґратки.

By means of exact solution of stationary Boltzman equation the nonequilibrium charge carrier distribution function is obtained. In the temperature range 4,2–300 K the main hole scattering mechanism are considered taking into account the nonelastic hole interaction with optical vibrations of the crystall lattice.

Вступ. Механізми розсіювання та рухливість дірок у HgTe досліджувалися в широкому інтервалі температур [1–6]. В цих роботах дослідження базувалися на наближенні часу релаксації, яке можна застосовувати при пружних механізмах розсіювання. Однак у

телуриді ртуті спостерігається непружна взаємодія оптичних коливань ґратки з носіями заряду, тому застосування методу часу релаксації є некоректним. Метою даної роботи є врахування непружного характеру розсіювання носіїв заряду на оптичних коливаннях кристала в рамках точного розв'язання рівняння Больцмана.

Розв'язання рівняння Больцмана. Розглянемо розв'язання стаціонарного рівняння Больцмана для випадку, коли магнітне поле напрямлене вздовж осі "Z" $\mathbf{B} = \{0, 0, B\}$, а електричне поле має компоненти $\mathbf{E} = \{E_1, E_2, 0\}$. Шукаємо розв'язок у вигляді:

$$f_a(\epsilon) = f_{0a}(\epsilon) - \frac{\partial f_{0a}(\epsilon)}{\partial \epsilon} C_{na}^\alpha p_\alpha(\epsilon) \epsilon^n \quad (1)$$

де $f_{0a}(\epsilon)$ – рівноважна функція Фермі – Дірака носія заряду, C_{na}^α – невідомі коефіцієнти, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, $a = 1, 2$ – відповідно, для електронів та важких дірок, $\alpha = 1, 2, 3$, $p_\alpha(\epsilon)$ – компонента квазіімпульса.

Підставимо розв'язок (1) у рівняння Больцмана, помножимо це рівняння на $p_\beta(\epsilon) \epsilon^m$ ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$, $\beta = 1, 2, 3$) і проінтегруємо обидві його частини за квазіімпульсом. Тоді отримаємо систему нелінійних алгебраїчних рівнянь для величин C_{na}^α :

$$\begin{cases} C_{n1}^\alpha (K_{\beta\alpha 11}^{mn} + K_{\beta\alpha 12}^{mn} + M_{\beta\alpha 1}^{mn} + C_{p1}^3 L_{\beta\alpha 11}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{\beta\alpha 12}^{mnp}) = B_{\beta 1}^m, \\ C_{n2}^\alpha (K_{\beta\alpha 22}^{mn} + K_{\beta\alpha 21}^{mn} + M_{\beta\alpha 2}^{mn} + C_{p1}^3 L_{\beta\alpha 21}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{\beta\alpha 22}^{mnp}) = B_{\beta 2}^m \end{cases} \quad (2)$$

де індекси 11, 12, 22, 21 у величинах K та L означають відповідно внутрішньозонні та міжзонні переходи електронів та важких дірок, а самі величини K, L, M, B визначаються такими виразами:

$$\begin{aligned} K_{\beta\alpha ab}^{nm} &= \frac{1}{k_0 T} \int_a \int_b W_{ab}(p, p') f_{0a}(\epsilon) [1 - f_{0a}(\epsilon')] [p'_\alpha(\epsilon) \epsilon'^n - p_\alpha(\epsilon) \epsilon^n] p_\beta(\epsilon) \epsilon^m dp' dp; \\ L_{\beta\alpha ab}^{nmp} &= \frac{1}{k_0^2 T^2} \int_a \int_b W_{ab}(p, p') f_{0a}(\epsilon) [1 - f_{0a}(\epsilon)] [f_{0a}(\epsilon') - f_{0a}(\epsilon)] \times \\ &\times p'_3(\epsilon') p_\alpha(\epsilon) p_\beta(\epsilon) \epsilon^{m+n} \epsilon'^p dp' dp; \\ M_{\beta\alpha a}^{mn} &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi (\delta_{\alpha 1} \delta_{\beta 2} - \delta_{\alpha 2} \delta_{\beta 1}) e B \int_a \frac{\partial f_{0a}}{\partial \epsilon} k(\epsilon) \epsilon^{m+n} d\epsilon; \\ B_{\beta a}^m &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi (\delta_{\beta 1} E_1 - \delta_{\beta 2} E_2) e \int_a \frac{\partial f_{0a}}{\partial \epsilon} k(\epsilon) \epsilon^m d\epsilon, \end{aligned} \quad (3)$$

де $W_{ab}(p, p')$ – ймовірність переходу носія заряду зі стану з квазіімпульсом \vec{p} в зоні "a" в стан з квазіімпульсом \vec{p}' в зоні "b"; e – заряд носія; k_0 – постійна Больцмана; $k(\epsilon)$ – модуль хвильового вектора; $\delta_{\alpha\beta}$ – символи Кронекера, а всі величини K та L пропорційні $\delta_{\alpha\beta}$ (у виразі (3) підсумування за індексом "a" відсутнє!).

Для обчислення інтегралів в (3) використовувалась непараболічна модель Кейна для електронів зони провідності та параболічна модель для важких дірок валентної зони, за

*Тут і нижче використовується прийняте в тензорній алгебрі правило підсумування за індексами, що двічі повторюються.

початок відліку енергії взято точку Γ_6 зони Бриллюена. При розрахунках бралися до уваги такі механізми розсіювання носіїв заряду: внутрішньозонне розсіювання на полярних оптичних фононах (ПО11, ПО22), міжзонне розсіювання на полярних оптичних фононах (ПО12, ПО21), внутрішньозонне розсіювання на неполярних оптичних фононах (НПО11, НПО22), міжзонне розсіювання на неполярних оптичних фононах (НПО12, НПО21), розсіювання на акустичних (АК) та п'єзоакустичних (ПАК) фононах, розсіювання на іонізованих (ІД) домішках. Розрахунок обмежувався випадком $n = 5$, що відрізнявся від випадку $n = 4$ на $\sim 1\%$.

Для подальшого аналізу перепишемо (2) в іншому вигляді з врахуванням (3):

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{n1}^1 (K_{11\ 11}^{mn} + K_{11\ 12}^{mn} + C_{p1}^3 L_{11\ 11}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{11\ 12}^{mnp}) + C_{n1}^2 M_{12\ 1}^{nm} = B_{11}^m; \\ C_{n1}^2 (K_{22\ 11}^{mn} + K_{22\ 12}^{mn} + C_{p1}^3 L_{22\ 11}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{22\ 12}^{mnp}) + C_{n1}^1 M_{21\ 1}^{nm} = B_{21}^m; \\ C_{n1}^3 (K_{33\ 11}^{mn} + K_{33\ 12}^{mn} + C_{p1}^3 L_{33\ 11}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{33\ 12}^{mnp}) = 0; \\ C_{n2}^3 (K_{33\ 22}^{mn} + K_{33\ 21}^{mn} + C_{p1}^3 L_{33\ 21}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{33\ 22}^{mnp}) = 0; \\ C_{n2}^2 (K_{22\ 22}^{mn} + K_{22\ 21}^{mn} + C_{p1}^3 L_{22\ 21}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{22\ 22}^{mnp}) + C_{n2}^1 M_{21\ 2}^{nm} = B_{22}^m; \\ C_{n2}^1 (K_{11\ 22}^{mn} + K_{11\ 21}^{mn} + C_{p1}^3 L_{12\ 21}^{mnp} + C_{p2}^3 L_{12\ 22}^{mnp}) + C_{n2}^2 M_{12\ 1}^{nm} = B_{12}^m. \end{array} \right. \quad (2a)$$

Систему (2a) можна розв'язати за два етапи: 1) для заданого значення $m = 0, 1, 2, \dots$ знаходимо C_{n1}^3 та C_{n2}^3 ($n = 0, 1, 2, \dots$) з 3-го та 4-го рівнянь системи, які становлять систему нелінійних алгебраїчних рівнянь; 2) знаходимо C_{n1}^1 , C_{n1}^2 та C_{n2}^1 , C_{n2}^2 ($n = 0, 1, 2, \dots$) відповідно з 1-го, 2-го та 5-го, 6-го рівнянь системи, які становлять дві незалежні системи лінійних рівнянь. Зауважимо, що величини C_{nb}^α ($\alpha = 1, 2$; $b = 1, 2$; $n = 0, 1, 2, \dots$) є лінійними функціями компонентів вектора напруженості електричного поля \mathbf{E} .

Система нелінійних алгебраїчних рівнянь для C_{n1}^3 і C_{n2}^3 може мати такі типи розв'язку: а) $C_{n1}^3 = C_{n2}^3 = 0$; б) $C_{n1}^3 = 0$, $C_{n2}^3 \neq 0$; в) $C_{n1}^3 \neq 0$, $C_{n2}^3 = 0$; г) $C_{n1}^3 \neq 0$, $C_{n2}^3 \neq 0$. Тому виникає необхідність вибору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків системи. Сформулюємо наступний критерій вибору: $J_z = J_{zn} + J_{zp} = 0$, де J_{zn} , J_{zp} – відповідно, електронна та діркова складові z-компоненти вектора густини струму. Цей критерій задовольняє розв'язок типу а), решта типів розв'язку при значенні індукції магнітного поля $\mathbf{B} = 0$ перетворюють детермінанти систем лінійних рівнянь для величин C_{n1}^1 та C_{n2}^1 (1-ше та 6-те рівняння системи (2a)) в нуль, тобто є фізично беззмістовні і тому повинні бути відкинуті.

Розрахунок величин $K_{\beta\alpha ab}^{nm}$ для електронів проводився на основі відповідних ймовірностей розсіювання $W_{ab}(p, p')$, поданих у роботі [7]. Розрахунок ймовірностей переходу дірки $W_{ab}(p, p')$ з початкового стану "p" у кінцевий стан "p'" проводився так [8, 9]: 1) визначається ймовірність $W_s(p, p')$ в припущенні, що носій заряду має хвильову функцію s-типу; 2) визначається так звана "функція перекриття" $G(p, p')$, яка враховує симетрію реальної хвильової функції і для параболическої зони з ізотропним законом дисперсії має вигляд:

$$G(p, p') = (1 + 3 \cos^2 \theta) / 4, \quad (4)$$

де θ – кут між векторами "p" та "p'" .

Тоді ймовірність переходу визначається співвідношенням:

$$W_{ab}(p, p') = W_s(p, p') G(p, p'). \quad (5)$$

Визначивши величини C_{na}^α , підставляємо їх в (1) і обчислюємо x-компоненту густини струму:

$$J_x = -\frac{C_{n1}^1}{4\pi^3 E_1} B_{11}^n - \frac{C_{n2}^1}{4\pi^3 E_1} B_{12}^n \quad (6)$$

Оскільки величини C_{na}^1 є лінійними функціями E_1 і E_2 , то J_x теж буде лінійно залежати від них, а величини при них будуть дорівнювати відповідним компонентам тензора провідності σ_{11} та σ_{12} для електронів та важких дірок, на основі яких можна розрахувати температурні залежності коефіцієнта Холла, електропровідності та рухливості носіїв заряду.

Аналіз отриманих результатів. Порівняння теоретичних і експериментальних температурних залежностей коефіцієнта Холла та електропровідності проводилося для зразка 14-7 з роботи [1], який при $T = 4,2$ К мав значення коефіцієнта Холла $R \sim 2$ см³/Кл при $B = 0,6$ Тл. Для отримання такого теоретичного значення коефіцієнта Холла необхідно припустити, що концентрація іонізованих акцепторів у цьому зразку становить $N_A^+ \sim 3,25 \cdot 10^{18}$ см⁻³. Відповідно розрахунок теоретичних кривих проводився на основі рівняння нейтральності: $p - n = N_A^+$.

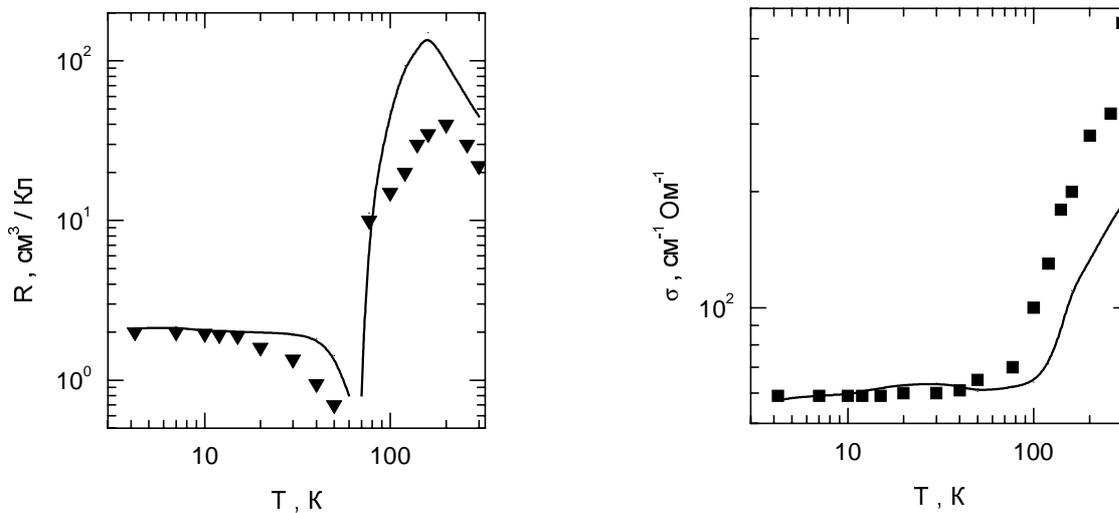


Рис. 1. Температурні залежності коефіцієнта Холла та електропровідності в HgTe

Як видно з температурних залежностей коефіцієнта Холла та електропровідності, зображених на рис. 1, теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом в інтервалі температур 4,2 – 100 К, тобто в області діркового типу провідності. При $T > 100$ К, в області змішаної провідності, спостерігається розходження між теорією та експериментом. Можливою причиною цього є недосконалість теорії внутрішньозонного розсіювання електронів на полярних оптичних фонах, яка при цих температурах дає занижене значення рухливості електронів порівняно з експериментом.

З поданої на рис. 2 залежності холлівської рухливості від коефіцієнта Холла видно, що теоретична крива та експериментальні дані добре узгоджуються між собою в інтервалі кон-

центрації заряджених акцепторів $1,7 \cdot 10^{16} - 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. З іншого боку, теоретична залежність рухливості дірок від їх концентрації (рис. 3) добре узгоджується з експериментом в інтервалі концентрацій $10^{17} - 10^{19} \text{ см}^{-3}$, тобто там, де внесок дірок у компоненти тензора провідності є суттєвим, при менших концентраціях спостерігається значне розходження з експериментом. Це можна пояснити так. Експериментальні значення рухливості, подані в роботах [2, 5, 6], отримані виділенням з експериментальних даних (виміряних з точністю $\sim 10\%$) внеску дірок у компоненти тензора провідності, який при концентраціях $p < 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ становить декілька відсотків і менше. Однак, на нашу думку, така методика отримання експериментальних значень рухливості дірок є не зовсім коректна.

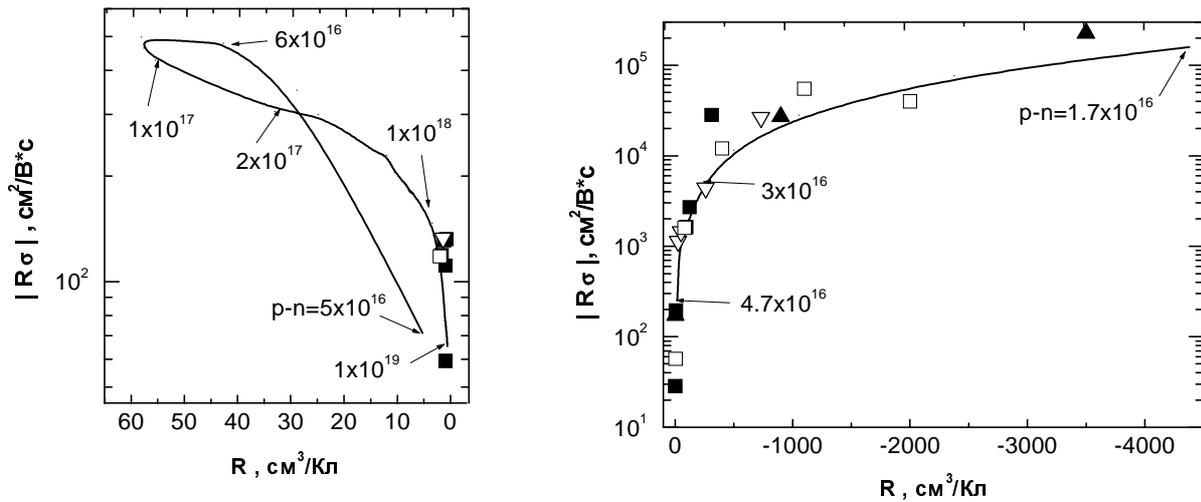


Рис. 2. Залежність холлівської рухливості від коефіцієнта Холла при $T = 4,2 \text{ К}$. Експериментальні дані: \square – [1], \blacktriangle – [2], ∇ – [3], \blacksquare – [4]

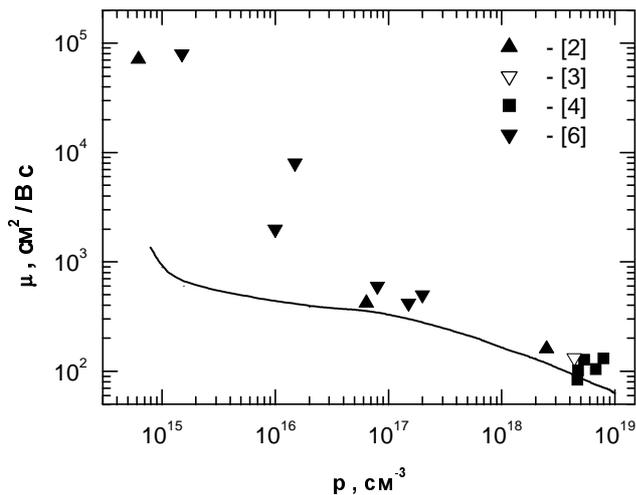


Рис. 3. Залежність рухливості дірок від їх концентрації при $T = 4,2 \text{ К}$

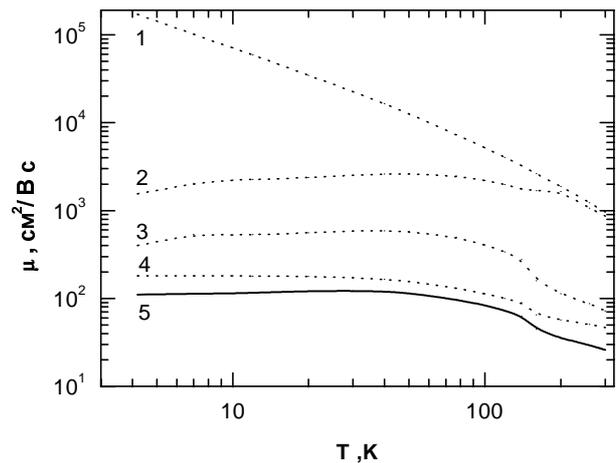


Рис. 4. Температурна залежність рухливості дірок в HgTe (зразок 14–7). 1–4 – відповідно, АК, НПО22-, ПО22-, Д-механізми розсіювання, 5 – змішаний механізм розсіювання

Для встановлення ролі різних механізмів розсіювання дірок було проведено розрахунок температурної залежності рухливості дірок для зразка 14–7 (рис. 4). Видно, що у всьому дослідженому інтервалі температур основними механізмами розсіювання є розсіювання на іонізованих домішках та внутрішньозонне розсіювання на полярних оптичних фонах. Решта механізмів розсіювання вносять нехтувано малий внесок. Зауважимо, що аналогічна картина спостерігається і в зразках з меншою концентрацією іонізованих акцепторів N_A^+ , з тією різницею, що буде змінюватися відносний внесок ІД- та ПО22-механізмів розсіювання.

Висновок. Запропонована методика врахування непружного розсіювання дірок на оптичних коливаннях кристалічної ґратки в HgTe, яка дає достатньо добре узгодження між теорією та експериментом.

1. Иванов-Омский В.И., Коломиец Б.Т., Малькова А.А., Огородников В.К., Смекалова К.И. // *Phys. Status Solidi*. – 1965. – 8. – P. 613–618.

2. Harman T.S., Honig J.M., Trent P. // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1967. – 28. – P. 1995–2000.

3. Whittett C.R., Nelson D.A. // *Phys. Rev.* – 1972. – B5. – P. 3125–3129.

4. Strauss A.J., Brebrick R.F. // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1970. – 31. – P. 2293–2307.

5. Dziuba Z., Wrobel J. // *Phys. Status Solidi (b)*. – 1980. – 100. – P. 379–387.

6. Dziuba Z., Szlenk K. // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1984. – 45. – P. 97–103.

7. Szymanska W., Dietl T. // *J. Phys. Chem. Solids*. – 1978. – 39. – P. 1025–1040.

8. Kranzer D. // *Phys. Status Solidi (a)*. – 1974. – 26. – P. 11–52.

9. Малик О.П., Буджак Я.С. // *УФЖ*. – 1994. – 39. – С. 477–480.