

ЛОКАЛЬНА ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОНІВ З БЛИЗЬКОДІЮЧИМ ПОТЕНЦІАЛОМ ДЕФЕКТІВ В $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 0.26$)

О. Малик

*Національний університет "Львівська політехніка"
 вул. С.Бандери 12, 79013, Львів, Україна*

(Отримано 21 квітня 2005 р.)

Розглянуті моделі розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі, зумовленому взаємодією з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, іонізованими та нейтральними домішками в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 0.26$). Розраховані температурні залежності рухливості електронів в інтервалі 4.2 – 300 К.

Ключові слова: напівпровідники, явища переносу.

PACS: 72.10.-D

УДК: 621.315.592

Вступ

Розсіяння електронів у твердому розчині $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ розглядали в наближенні часу релаксації у роботах [1–3]. Однак розглянуті в цих роботах моделі розсіяння мають один суттєвий недолік – вони є далекодіючими, що суперечить спеціальній теорії відносності. Крім того, у цих моделях використовується макроскопічний параметр, діелектрична проникність, який не має сенсу в мікроскопічних процесах. З іншого боку, в роботах [4–6] розглядали модель взаємодії електрона з полярним оптичним фононом, в якій були зазначені вищевказані недолі-

ки. Метою теперішньої роботи є застосування цього підходу для розробки моделей розсіяння електронів на різних типах дефектів кристалічної ґратки.

I. Близькодіючі моделі розсіяння

A Розсіяння електрона на полярному оптичному фононі.

Вираз для ймовірності переходу електрона, зв'язаного з поглинанням або випромінюванням полярного оптичного (ПО) фонона, має вигляд:

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

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 – стала ґратки; γ_{PO} – параметр, що визначає радіус дії близькодіючого потенціалу ($R = \gamma_{PO} a_0$); N_{LO} ; N_{TO} – число поздовжніх (LO) та поперечних (TO) фононів з частотою відповідно ω_{LO} і ω_{TO}

Вираз (1) відрізняється від аналогічного виразу робіт [4–6] наявністю члена, що враховує взаємодію електрона з поперечним фононом. Використовуючи формалізм точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [7,8], отримуємо величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$ для цього механізму розсіяння

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{64 \pi^6 e^4 \hbar^2 \gamma_{PO}^{10} \delta_{\alpha\beta}}{675 \epsilon_0^2 a_0^4 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{ N_{LO} f_0(\epsilon) [1 - f_0(\epsilon + \hbar\omega_{LO})] k^2(\epsilon + \hbar\omega_{LO}) \times \right. \\ \times \frac{\partial k(\epsilon + \hbar\omega_{LO})}{\partial \epsilon} + (N_{LO} + 1) \theta(\epsilon - \hbar\omega_{LO}) f_0(\epsilon) [1 - f_0(\epsilon - \hbar\omega_{LO})] k^2(\epsilon - \hbar\omega_{LO}) \frac{\partial k(\epsilon - \hbar\omega_{LO})}{\partial \epsilon} \left. \right\} \times \\ \times k^4(\epsilon) \frac{\partial k(\epsilon)}{\partial \epsilon} \epsilon^{n+m} d\epsilon + \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{ N_{TO} f_0(\epsilon) [1 - f_0(\epsilon + \hbar\omega_{TO})] k^2(\epsilon + \hbar\omega_{TO}) \frac{\partial k(\epsilon + \hbar\omega_{TO})}{\partial \epsilon} + \\ + (N_{TO} + 1) \theta(\epsilon - \hbar\omega_{TO}) f_0(\epsilon) [1 - f_0(\epsilon - \hbar\omega_{TO})] k^2(\epsilon - \hbar\omega_{TO}) \frac{\partial k(\epsilon - \hbar\omega_{TO})}{\partial \epsilon} \left. \right\} k^4(\epsilon) \frac{\partial k(\epsilon)}{\partial \epsilon} \epsilon^{n+m} d\epsilon \Big], \quad (2)$$

де $\delta_{\alpha\beta}$ – символ Кронекера; $f_0(\varepsilon)$ – функція Фермі-Дірака; $\theta(x)$ – ступінчаста функція; k_B – стала Больцмана.

В Розсіяння електрона на неполярному оптичному фононі

Потенціальна енергія, зумовлена взаємодією з неполярним оптичним (НПО) фононом, має вигляд [9]:

$$U = \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_\nu(\mathbf{q})} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \right]^{\frac{1}{2}} \mathbf{Q} * \mathbf{W}^0(\mathbf{r}) [b_{\mathbf{q}, \nu} e^{i \mathbf{q} \rho} + b_{\mathbf{q}, \nu}^* e^{-i \mathbf{q} \rho}], \quad (3)$$

де $\mathbf{W}^0(\mathbf{r})$ – оптичний потенціал деформації з періодичністю кристала; \mathbf{Q} – одиничний вектор зміщення атома; \mathbf{q} і $\omega_\nu(\mathbf{q})$ відповідно хвильовий вектор та кутова частота ν -ї гілки оптичних коливань кристала ($\nu = 4, 5, 6$); $b_{\mathbf{q}, \nu}$ і $b_{\mathbf{q}, \nu}^*$ відповідно оператори анігіляції та народження фононів ν -ї гілки з хвильовим вектором \mathbf{q} ; $\rho = i(n_2 + n_3) \frac{a_0}{2} + j(n_1 + n_3) \frac{a_0}{2} + k(n_2 + n_1) \frac{a_0}{2}$, ($n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots$), i, j, k одиничні вектори вздовж головних осей кристала. Надалі зміна координат розглядатиметься тільки в межах елементар-

ної комірки, тому потенціал (3) стає близькодійним.

Для обчислення ймовірності переходу, пов'язаного з електрон-фононою взаємодією, запишемо хвильову функцію системи "електрон + фонони" у вигляді

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (4)$$

де V – об'єм кристала, $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ – хвильова функція системи незалежних гармонічних осциляторів.

Тоді матричний елемент переходу від енергії взаємодії має вигляд

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_\nu(\mathbf{q})} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{\Omega} \exp(i \mathbf{s} \mathbf{r}) \mathbf{Q} * \mathbf{W}^0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} \times \int \Phi^*(x_1, x_2, \dots, x_n) [b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \rho} + b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \rho}] \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) \, dx_1 dx_2 \dots dx_n, \quad \Omega = a_0^3/4, \mathbf{s} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \quad (5)$$

Інтеграл по координатах електрона подамо як

$$\int_{\Omega} \exp(i \mathbf{s} \mathbf{r}) \mathbf{Q} * \mathbf{W}^0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \frac{a_0^2}{4} \frac{a_0}{\Omega} \int_{\Omega} \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) \mathbf{Q} * \mathbf{W}^0(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} = \frac{a_0^2}{4} d_0, \quad (6)$$

де d_0 – константа потенціалу деформації [9]. Далі приймемо $d_0 = 29.8 eB$.

Інтегрування по координатах гармонічних осциляторів дає множники \sqrt{N} та $\sqrt{N+1}$ (N – число фононів з відповідними частотами для однієї LO -моди ($\omega = \omega_{LO}$) та двох TO -мод ($\omega = \omega_{TO}$)) відповідно для операторів анігіляції та народження фо-

нонів. Для обчислення суми по вектору \mathbf{q} зробимо такі спрощення: 1) враховуючи квазінеперервний характер зміни хвильового вектора, перейдемо від підсумовування до інтегрування по \mathbf{q} ; 2) перейдемо від інтегрування по кубу з ребром $2\pi/a_0$ до інтегрування по сфері з ефективним радіусом π/a_0 :

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \dots dq_x dq_y dq_z \rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/a_0} \dots q^2 \sin \theta \, dq \, d\theta \, d\varphi. \quad (7)$$

Тоді для суми отримаємо вираз

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = F(\rho) = \frac{V}{(2\pi)^3} \pi \frac{4 \sin \rho Q - 4 \rho Q \cos \rho Q}{\rho^3} \times \begin{cases} \sqrt{N} - \text{absorption}; \\ \sqrt{N+1} - \text{radiation. } Q = \pi/a_0. \end{cases} \quad (8)$$

З аналізу залежності $F(\rho)/F(0)$ від ρ видно, що функція $F(\rho)$ може бути апроксимована виразом [4-6]:

$$F(0) = \frac{4}{3} \pi Q^3 \times \left\{ \frac{\sqrt{N}}{\sqrt{N+1}} \right\} \quad (8a)$$

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi^3 d_0^2}{288 a_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})] \right. \\ \left. + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}, \quad (9)$$

де ε - енергія електрона, а також враховані переходи з переворотом та без перевороту спіна.

На основі цього переходу електрона можна розрахувати величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$, які фігурують у методі точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar^2 d_0^2 a_0}{864 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \delta_{\alpha\beta} \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{N_{LO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})] k^2(\varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial k(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})}{\partial \varepsilon} + (N_{LO} + 1) \theta(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})] k^2(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}) \frac{\partial k(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})}{\partial \varepsilon} \right] \times \\ \times k^4(\varepsilon) \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon + \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{N_{TO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})] k^2(\varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \frac{\partial k(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})}{\partial \varepsilon} + \\ + (N_{TO} + 1) \theta(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})] k^2(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \frac{\partial k(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})}{\partial \varepsilon} \} k^4(\varepsilon) \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \quad (10)$$

С Розсіяння електрона на акустичному фоні

Потенціальна енергія електрона, зумовлена взаємодією з акустичним (АК) фононом, має вигляд [10,11]

$$U = -\frac{1}{2} (Q_1 + Q_2) * \nabla V_0 + S_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} = H_1 + H_2, \quad (11) \\ (\alpha, \beta = x, y, z),$$

де V_0 - періодичне поле недеформованого кристала; $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial Q_\alpha}{\partial x^\beta} + \frac{\partial Q_\beta}{\partial x^\alpha} \right)$ - макроскопічний симетричний тензор деформації.

Знову зміну координат розглядатимемо тільки в межах елементарної комірки, тому потенціал (11) стає близькодійчим. Зауважимо, що вектор \mathbf{Q}_i

($i = 1, 2$) є функцією від дискретних змінних $\mathbf{Q}_i = \mathbf{Q}_i(n_1, n_2, n_3)$. Для обчислення компонент $S_{\alpha\beta}$ зробимо таку заміну для частинної похідної вектора \mathbf{Q} по координаті (див. також [5-7]):

$$\frac{\partial Q_x}{\partial x} \rightarrow \frac{Q_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - Q_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \\ \frac{Q_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - Q_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \\ + \frac{Q_x(n_1, n_2, n_3 + 1) - Q_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x}, \quad (12)$$

де $\Delta x = \frac{a_0}{2}$ для елементарної комірки структури цинкової обманки.

Аналогічний вираз записується для похідних $\frac{\partial Q_y}{\partial y}$ та $\frac{\partial Q_z}{\partial z}$ (та їх відповідних циклічних перестановок) з $\Delta y = \Delta z = \frac{a_0 q}{2}$. Беручи до уваги, що для акустичних коливань $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_2$, отримаємо вираз для компонент $S_{\alpha\beta}$:

$$S_{\alpha\beta} = i \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_\nu(\mathbf{q}) [M_x + M_{Te}]} \right]^{\frac{1}{2}} [\xi_\alpha(\mathbf{q}, \nu) + \xi_\beta(\mathbf{q}, \nu)] (q_x + q_y + q_z) \times \\ \times [b_{\mathbf{q}, \nu} e^{i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} - b_{\mathbf{q}, \nu}^* e^{-i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}], \quad (13)$$

де $\xi(\mathbf{q}, \nu)$ – вектор поляризації кристалічних коливань ($\nu = 1, 2, 3$).

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\mathbf{k}, j_z} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) \quad (14)$$

Для обчислення ймовірності переходу, пов'язаного з взаємодією електрона та акустичного фону, запишемо хвильову функцію системи “електрон + фони” у вигляді

де $u_{\mathbf{k}, j_z}$ – блохівські амплітуди, виражені через амплітуди Лютгінджера – Кона [12].

Тоді матричний елемент переходу від енергії взаємодії має вигляд

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | H_1 | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_{\nu}(\mathbf{q}) [M_x + M_{Te}]} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{\Omega} \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}, j_z}^* \times \quad (15)$$

$$\times \frac{\partial V_0}{\partial x^{\alpha}} \xi_{\alpha}(\mathbf{q}, \nu) u_{\mathbf{k}, j_z} d\mathbf{r} \int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) [b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\rho} + b_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\rho}] \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n$$

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | H_2 | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = \frac{i}{V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_{\nu}(\mathbf{q}) [M_x + M_{Te}]} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{\Omega} \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}, j_z}^* V_{\alpha\beta} \times \quad (16)$$

$$\times [\xi_{\alpha}(\mathbf{q}, \nu) + \xi_{\beta}(\mathbf{q}, \nu)] (q_x + q_y + q_z) u_{\mathbf{k}, j_z} d\mathbf{r} \int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) [b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\rho} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\rho}] \times \\ \times \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n;$$

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = \langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | H_1 | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle + \langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | H_2 | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle. \quad (17)$$

У (15) інтегрування по координатах електрона дає нуль [10,11]. У (16) інтегрування по координатах гармонічних осциляторів дає множник $\sqrt{N_{\nu}} \approx$

$\sqrt{N_{\nu} + 1} \approx \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_{\nu}}\right)^{1/2}$ для однієї LO- та двох TO-мод. В (17) переписемо інтеграл по координатах в такому вигляді:

$$I(q) = i \int_{\Omega} \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}, j_z}^* V_{\alpha\beta} [\xi_{\alpha}(\mathbf{q}, \nu) + \xi_{\beta}(\mathbf{q}, \nu)] (q_x + q_y + q_z) u_{\mathbf{k}, j_z} d\mathbf{r} \approx i E_{AC} q \frac{a_0^3}{4}, \quad (18)$$

де E_{AC} – величина, що залежить від декількох констант потенціалу деформації (C, l, m, n), декількох коефіцієнтів (a, b, c) та $\cos \theta$ (θ – кут між \mathbf{k} і \mathbf{k}'). Для оцінки E_{AC} підставимо $C = -8.3$ еВ, $l = 0.1$ еВ, $m = 4.0$ еВ, $n = -1.91$ еВ [13], $a = b = c = 0.5$, $\cos \theta = 0$ (середні значення) в шість величин $I(q)$, поданих в

[12], і виберемо найбільшу з них. У результаті отримаємо $E_{AC} = 1.85$ еВ. Така апроксимація є можливою, тому що, як буде показано нижче, цей механізм розсіяння не відіграє суттєвої ролі. Це зумовлює вираз для матричного елемента переходу

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = \frac{i a_0^3 E_{AC}}{4V} \left[\frac{k_B T}{2G [M_x + M_{Te}]} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\nu} \frac{1}{c_{\nu}} \times \left\{ \begin{array}{l} \exp(i\mathbf{q}\rho) \\ -\exp(-i\mathbf{q}\rho) \end{array} \right\}, \quad (19)$$

де c_{ν} – відповідні швидкості звуку.

Обчислення суми проводиться за методом, наведеним в попередньому розділі, і дає в результаті ви-

раз для ймовірності переходу електрона для цього механізму розсіяння

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi^3 k_B T E_{AC}^2}{144 \hbar G [M_x + M_{Te}]} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta(\epsilon' - \epsilon), \quad (20)$$

де взято до уваги пружний характер розсіяння.

Тоді вираз для величин $K_{\beta\alpha}^{nm}$ набуває вигляду

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar E_{AC}^2}{108 \rho_0} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta_{\alpha\beta} \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] k^6(\varepsilon) \left[\frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon, \quad (21)$$

де ρ_0 – густина.

D Розсіяння електрона на п'єзоелектричному фононі

В ідеальному діелектрику (відсутність рухомих зарядів) електрична індукція дорівнює нулю:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} = 0, \quad (22)$$

де $\mathbf{P} = \mathbf{e} \mathbf{S}$ – поляризація кристала, \mathbf{e} – п'єзоелектричний тензор третього порядку.

Необхідно відзначити, що для акустичної гілки

$$P_\alpha = 2 i e_{14} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2 G \omega_\nu(\mathbf{q}) [M_x M_{Te}]} \right]^{\frac{1}{2}} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\xi_\beta + \xi_\gamma) (q_x + q_y + q_z) [b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}], \quad (24)$$

де $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – символи Леві-Чівіта.

Вектор поляризації \mathbf{P} є функцією дискретних змінних, тому для обчислення зв'язаного заряду $\rho_1 = -\text{div } \mathbf{P}$ використовується та сама процедура, що

тензор деформації \mathbf{S} описується формулою (13), тоді як для оптичної гілки треба зробити заміну

$$\xi_\alpha = n_\alpha \frac{M_x + M_{Te}}{\sqrt{M_x M_{Te}}}, \quad (23)$$

\mathbf{n} – одиничний вектор зміщення атома.

У кубічних кристалах існує тільки одна компонента п'єзоелектричного тензора: $e_{123} = e_{132} = e_{213} = e_{231} = e_{312} = e_{321} = e_{14}$. Отже, поляризацію кристала можна подати як

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho_1}{\varepsilon_0} = -\frac{8 e_{14}}{\varepsilon_0} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2 G \omega_\nu(\mathbf{q}) [M_x + M_{Te}]} \right]^{1/2} (q_x + q_y + q_z)^2 (\xi_x + \xi_y + \xi_z) \times [b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} + b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}], \quad (25)$$

Для розв'язку рівняння (23) замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом $R = \gamma_{PZ} a_0$, величина якого задовольняє умову $0 < \gamma_{PZ} < \sqrt{3}/2$. Величина γ_{PZ} вибирається так, щоб узгодити теорію з експериментом. Тоді сферично-симетричний розв'язок рівняння Пуассона має вигляд

і в попередньому розділі. Тоді рівняння Пуассона для потенціалу взаємодії електрона з фононом має вигляд

$$\varphi = \frac{\rho_1}{2 \varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r}{3} \right), \quad (0 \leq r \leq R) \quad (26)$$

Цей потенціал є близькодіючим, оскільки бере до уваги взаємодію електрона з однією коміркою. Для обчислення матричного елемента використаємо функції (4)

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = -\frac{4 e e_{14}}{\varepsilon_0 V} \int \exp(i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}) \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2 G \omega_\nu(\mathbf{q}) (M_x + M_{Te})} \right]^{1/2} \quad (27)$$

$$(q_x + q_y + q_z)^2 (\xi_x + \xi_y + \xi_z) \int \Phi^*(x_1, x_2, \dots, x_n) [b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}} + b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}}] \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n.$$

Інтегрування по координатах електрона дає

$$I(s) = \int \exp(i \mathbf{s} \cdot \mathbf{r}) \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) d\mathbf{r} = \frac{\pi (8 \sin Rs - 8 Rs \cos Rs - 8/3 R^3 s^3 \cos Rs)}{s^5}. \quad (28)$$

Розрахунок показує, що хвильовий вектор електрона змінюється в межах $0 - 10^9 \text{ м}^{-1}$ при зміні енергії в межах $0 - 10 \text{ к}$ в інтервалі температур $4.2 - 300 \text{ К}$. Аналіз показує, що функція $I(s)$ задовольняє умову [4-6]:

$$I(s) \approx I(0) = 16/15 \pi R^5 = 16/15 \pi a_0^5 \gamma_{PZ}^5. \quad (29)$$

Тоді матричний елемент має вигляд

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = - \frac{64 \pi e e_{14} a_0^5 \gamma_{PZ}^5}{15 \varepsilon_0 V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2 G \omega_{\nu}(\mathbf{q}) (M_x + M_{Te})} \right]^{1/2} (q_x + q_y + q_z)^2 \times$$

$$\times (\xi_x + \xi_y + \xi_z) \times \begin{cases} \sqrt{N} \exp(i \mathbf{q} \rho) \\ \sqrt{N+1} \exp(-i \mathbf{q} \rho) \end{cases} \quad (30)$$

Надалі необхідно розглядати цей матричний елемент окремо для акустичних та оптичних коливань кристала.

Е Розсіяння електрона на п'єзоакустичному фононі

Беручи до уваги характер розсіяння електрона на п'єзоакустичному (ПАК) фононі та вираз $\omega_{\nu} = c_{\nu} q$ ($\nu = 1, 2, 3$), отримаємо

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = - \frac{64 \pi e e_{14} a_0^5 \gamma_{PZ}^5}{15 \varepsilon_0 V} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{k_B T}{2 G (M_x + M_{Te})} \right]^{1/2} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right) q \times \begin{cases} \exp(i \mathbf{q} \rho) \\ \exp(-i \mathbf{q} \rho) \end{cases} \quad (31)$$

Обчислення суми проводиться згідно з методом, наведеним в розділі В, і дає

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = F(\rho) = \pi \frac{8 \cos \rho Q + 8 \rho Q \sin \rho Q - 4 \rho^2 Q^2 \cos \rho Q - 8}{\rho^4} \quad (32)$$

Аналіз показує, що виконується умова

$$F(\rho) \approx F(0) = \frac{\pi^5}{a_0^4} \quad (33)$$

Вираз для ймовірності переходу електрона при цьому механізмі розсіяння має вигляд

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{128 \pi^7 e^2 e_{14}^2 a_0^2 \gamma_{PZ}^{10} k_B T}{225 \varepsilon_0^2 \hbar G [x M_{Cd} + (1-x) M_{Hg} + M_{Te}]} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (34)$$

а вираз для величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$ має вигляд

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = - \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{512 \pi^6 e^2 e_{14}^2 a_0^2 \gamma_{PZ}^{10} \hbar}{675 \varepsilon_0^2 \rho_0} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 \delta_{\alpha\beta} \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] k^6(\varepsilon) \left[\frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon. \quad (35)$$

Г Розсіяння електрона на п'єзооптичному (ПОП) фононі

Беручи до уваги непружний характер взаємодії електрона з фононом та вираз (23), отримаємо

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = - \frac{64 \pi e e_{14} a_0^5 \gamma_{PZ}^5}{15 \varepsilon_0 V} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar (M_x + M_{Te})}{2 G \omega_{\nu}(\mathbf{q}) M_x M_{Te}} \right]^{1/2} (q_x + q_y + q_z)^2 \times$$

$$\times (n_x + n_y + n_z) \times \begin{cases} \sqrt{N} \exp(i \mathbf{q} \rho) \\ \sqrt{N+1} \exp(-i \mathbf{q} \rho) \end{cases} \quad (36)$$

Обчислення суми наводиться згідно з методом, наведеним в розділі В, і дає

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = F(\rho) = \pi \frac{-4 \rho^3 Q^3 \cos \rho Q + 12 \rho^2 Q^2 \sin \rho Q + 24 \rho Q \cos \rho Q - 24 \sin \rho Q}{\rho^5} \quad (37)$$

Аналіз показує, що виконується умова [4-6]

$$F(\rho) \approx F(0). \quad (38)$$

Вираз для ймовірності переходу електрона при цьому механізмі розсіяння має вигляд

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left(\frac{32}{75}\right)^2 \frac{\pi^9 e^2 e_{14}^2 \gamma_{PZ}^{10}}{\varepsilon_0^2 G} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}, \quad (39)$$

а вираз для величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$ має вигляд

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \left(\frac{32}{75}\right)^2 \frac{\pi^8 e^2 e_{14}^2 \hbar^2 \gamma_{PZ}^{10} a_0^3 \delta_{\alpha\beta}}{3 \varepsilon_0^2 k_B T} \frac{M_x + M_{Te}}{M_x M_{Te}} \left[\frac{1}{\omega_{LO}} \int \{N_{LO} f_0(\varepsilon) \times [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})] k^2(\varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \frac{\partial k(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})}{\partial \varepsilon} + (N_{LO} + 1) \theta(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})] \times k^2(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}) \frac{\partial k(\varepsilon - \hbar\omega_{LO})}{\partial \varepsilon} \} k^4(\varepsilon) \times \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon + \frac{2}{\omega_{TO}} \int \{N_{TO} f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \times k^2(\varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \frac{\partial k(\varepsilon + \hbar\omega_{TO})}{\partial \varepsilon} + (N_{TO} + 1) \theta(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})] k^2(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \times \frac{\partial k(\varepsilon - \hbar\omega_{TO})}{\partial \varepsilon} \} k^4(\varepsilon) \times \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \right]. \quad (40)$$

G Розсіяння електрона на іонізованій домішці

Потенціальна енергія, зумовлена взаємодією електрона з іонізованою домішкою (ІД), має вигляд

$$U = \frac{Z_i e^2}{4 \pi \varepsilon_0 r}, \quad (41)$$

де координата r задовольняє умову $r = 0 \div \gamma_{II} a_0$ ($0 < \gamma_{II} < 10$), Z_i - кратність іонізації.

Величина γ_{II} вибирається так, щоб узгодити теорію і експеримент. Верхня межа цього параметра,

який визначає радіус дії потенціалу (41), вибирається з таких міркувань. Максимальна інтенсивність взаємодії проявляється в межах елементарної комірки. На відстані $\sim 10a_0$ інтенсивність взаємодії зменшиться на порядок. З іншого боку вищерозглянуті формули справедливі в першому порядку теорії збурень. Тоді, на відстанях $\sim 10a_0$ інтенсивність взаємодії стане величиною другого порядку і тому її можна відкинути. Для розрахунку матричного елемента використовуємо плоскохвильову функцію електрона, нормовану на об'єм кристала

$$\langle N'_q, \mathbf{k}' | U | N_q, \mathbf{k} \rangle = I(s) = \frac{Z_i e^2}{4\pi \varepsilon_0 V} \int_0^{\gamma_{II} a_0} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \exp(irs) r \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \frac{Z_i e^2}{\varepsilon_0 V} \frac{1 - \cos(s\gamma_{II} a_0)}{s^2} \quad (42)$$

Аналіз показує, що виконується умова $I(s) \approx I(0)[4-6]$. Тоді вираз для ймовірності переходу електрона при цьому механізмі розсіяння має вигляд

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi e^4 Z_i^2 N_i \gamma_{II}^4 a_0^4}{2\varepsilon_0^2 \hbar V^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (43)$$

N_i - концентрація домішки. А вираз для величин $K_{\beta\alpha}^{nm}$ має вигляд

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2Z_i^2 N_i e^4 a_0^4 \gamma_{II}^4 \hbar}{3 \varepsilon_0^2 k_B T} \delta_{\alpha\beta} \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] k^6(\varepsilon) \left[\frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon. \quad (44)$$

H Розсіяння електрона на нейтральній домішці

Для опису розсіяння електрона на нейтральній домішці (НД) використовувалась модель Ерджінся

[16] з двома припущеннями [7]: 1) ймовірність розсіювання не залежить від діелектричної проникності кристала, яка є макроскопічним параметром і тому не може характеризувати мікроскопічний процес

квантовомеханічного розсіювання на нейтральній домішці ; 2) розмір області поля нейтральної домішки дорівнює $5B$ (B – радіус Бора), тобто, приблизно половині постійної кристалічної ґратки. З врахуванням цих припущень, ймовірність розсіювання електрона на нейтральній домішці вибирали у вигляді

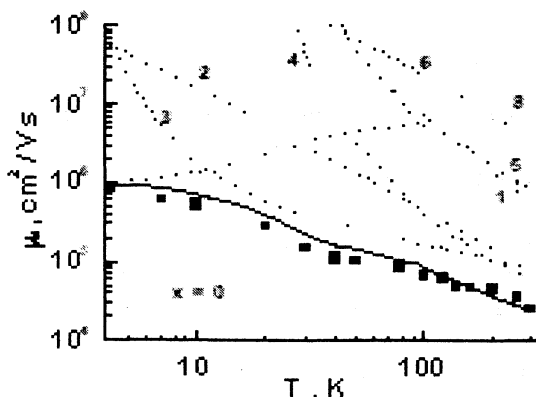
$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{20 \pi^2 5a_B \hbar^3 N_{NI}}{V m^{*2} k(\varepsilon)} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (45)$$

де N_{NI} – концентрація нейтральних дефектів; $m^* = \hbar^2 k(\varepsilon) \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}$.

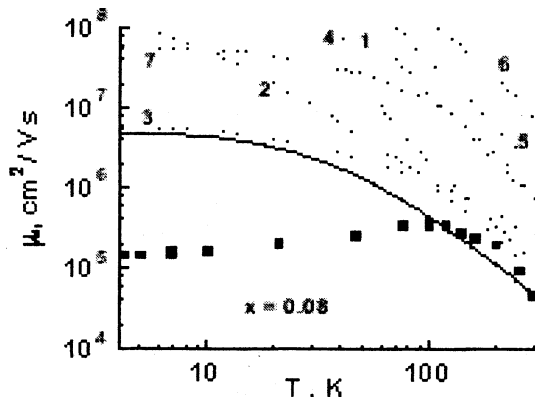
Тоді величини $K_{\beta\alpha}^{nm}$ для цього механізму розсіювання матимуть такий вигляд:

$$K_{\beta\alpha}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{400 \pi a_B \hbar N_{NI}}{3 k_B T} \delta_{\alpha\beta} \int f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] k^3(\varepsilon) \varepsilon^{n+m} d\varepsilon. \quad (46)$$

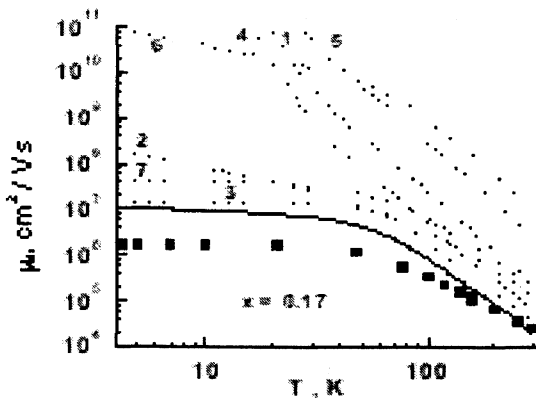
x	0	0.08	0.17	0.26
γ_{PO}	0.55	0.55	0.62	0.7
γ_{PZ}	0.40	0.43	0.5	0.5
γ_{ID}	4.0	4.0	5.0	5.0



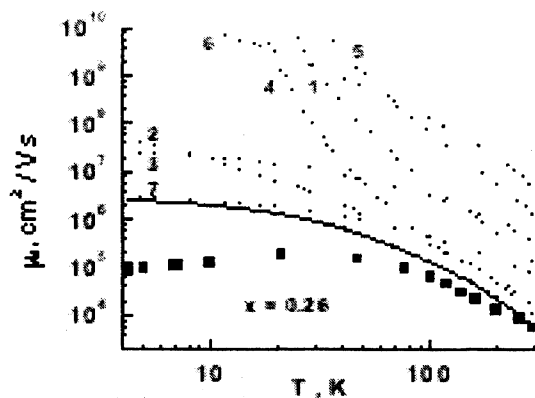
а



б



в



г

Температурна залежність рухливості електронів в кристалах $Cd_xHg_{1-x}Te$. Суцільна крива – змішаний механізм розсіювання; 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 – відповідно ПОП-, ПАК-, ІД-, ПО-, НПО-, АК, НП-, НД- механізми розсіювання. Експеримент – [2, 3]

II. Аналіз отриманих результатів

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, поданими в [2,3] для кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ з складом $x=0; 0.08; 0.17; 0.26$. Для $x = 0$ припускалась модель нейтрального акцептора з енергією активації $E_A=2.2$ меВ [17], а рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності $p - n = N_A [1 + 4 \exp((E_A - E_F)/k_B T)]^{-1}$ ($N_A=3 \times 10^{15} \text{см}^{-3}$). Для $x = 0.08; 0.17; 0.26$ припускалась модель однократно іонізованої домішки, а рівень Фермі визначався з рівняння $n - p = N_{4.2}(N_{4.2} - \text{концентрація іонізованої домішки при } 4.2 \text{ K})$. Відзначимо, що для розрахунку рухливості електронів окрім описаних вище механізмів використовувався додатковий механізм розсіяння неупорядкованості (НП)[14,15]. Отримані значення параметрів γ для різних механізмів розсіяння наведені в таблиці. Як видно з рисунка теоретичні криві при $x > 0$ добре узгоджуються з експериментальними даними в інтервалі температур 40–300 К (крім $x = 0.08$). При нижчих температурах ($T < 40$ К) теоретичне значення рухливості електронів є більшим за експериментальні дані. На нашу думку, цю низькотемпературну неузгодженість (а також випадок $x = 0.08$) можна пояснити некоректними моделями дефектної структури домішки, які застосовувалися. Підтвердженням цього

є випадок $x = 0$, для якого вибрана модель дефекту дає добру узгодженість теорії та експерименту в усьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рисунку пунктирними лініями зображені криві для відповідних механізмів розсіяння. Видно, що при низьких температурах основним механізмом розсіяння є розсіяння на іонізованих домішках, розсіяння на п'єзоакустичних фононах та розсіяння неупорядкованості ($x = 0.08; 0.17; 0.26$). Для $x = 0$ основним механізмом при низьких температурах є розсіяння на нейтральному та іонізованому дефекті. При високих температурах для всього дослідженого інтервалу складів переважаючим механізмом розсіяння стає розсіяння на полярних оптичних фононах. Решта механізми – розсіяння на акустичних, п'єзооптичних та неполярних оптичних фононах – дають нехтовно малий внесок.

III. Висновки

Розроблені близькодіючі моделі розсіяння електронів на різних дефектах кристалічної ґратки $Cd_xHg_{1-x}Te$, які дають добре узгодження з експериментом в інтервалі температур $T > 40 \text{ K}$. Неузгодженість при нижчих температурах можна пояснити некоректністю моделей структури іонізованого дефекту кристала.

Література

- [1] W. Szymanska, T. Dietl, J. Phys. Chem. Solids 39 (1978) 1025-1040.
- [2] J. Dubowski, T. Dietl, W. Szymanska, J. Phys. Chem. Solids 42 (1981) 351-362.
- [3] W. Scott, J. Appl. Phys. 43 (1972) 1055-1062.
- [4] O.P. Malyk, Ukr. J. Phys. 49 (2004) 677-680.
- [5] O.P. Malyk, Comput. Mat. Science, 33(1-3) (2004) 153-156.
- [6] O.P. Malyk, J. Alloys Compd. 379 (2004) 60-63.
- [7] O.P. Malyk, Ukr. Phys. Zhurn. 47 (2002) 842-845.
- [8] O.P. Malyk, WSEAS Transactions on Mathematics 3 (2004) 354-357.
- [9] P. Boguslawski, Phys. Status Solidi(b) 70 (1975) 53-62.
- [10] P. Lawaets, Phys. Rev. 183 (1969) 730-739.
- [11] G.L. Bir, G.E. Pikus, Fiz. Tverd. Tela 2 (1960) 2287-2297.
- [12] W. Szymanska, P. Boguslawski, W. Zawadski, Phys. Status Solidi(b) 65 (1974) 641-654.
- [13] G. Weill, C. Verie, C.R. Acad. Sci. 263 (1966) 463-465.
- [14] E. Litwin-Staszewska, W. Szymanska, Phys. Status Solidi(b) 74 (1976) K89-K92.
- [15] J.J. Dubowski, Phys. Status Solidi(b) 85 (1978) 663-672.
- [16] C. Erginsoy, Phys. Rev. 79 (1950) 1013-1014.
- [17] R. Dornhaus, G. Nimtz.: Springer Tracts Mod. Phys. 98 (1983) 201.

**THE LOCAL ELECTRON INTERACTION
WITH SHORT-RANGE POTENTIAL
IN $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 0.26$)**

O. Malyk

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

Models of electron scattering on the short-range potential caused by interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons, ionized and neutral impurities in $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 0.26$) are considered. The temperature dependences of electron mobility in temperature range 4.2 – 300 K are calculated.

Keywords: semiconductors, transport phenomena.

PACS: 72.10.-D

UDK: 621.315.592