

**НЕПРУЖНЕ РОЗСИЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНІВ
НА ПОЛЯРНИХ ОПТИЧНИХ КОЛИВАННЯХ КРИСТАЛІЧНОЇ
ГРАТКИ В ТВЕРДОМУ РОЗЧИНІ Cd_x Hg_{1-x} Te**

© Малик О.П., 2004

О.Р. Malyk

**INELASTIC ELECTRON SCATTERING
ON THE POLAR OPTICAL VIBRATIONS OF CRYSTAL LATTICE
IN THE SOLID SOLUTION Cd_x Hg_{1-x} Te**

© Malyk O.P., 2004

Запропонована модель непружного розсіяння електронів на полярних оптичних коливаннях кристалічної ґратки, в якій ймовірність розсіяння не залежить від макроскопічного параметра – діелектричної проникності кристала. Розглянута модель дає добре узгодження між теорією та експериментом в інтервалі температур 120 – 300 К.

A model of inelastic electron scattering on the polar optical vibrations of the crystal lattice is proposed in which the scattering probability does not depend on macroscopic parameter, the crystal permittivity. The reviewed model yields the good agreement between the theory and experiment in temperature range 120 – 300 K.

Вступ

Розсіяння електронів на полярних оптичних фонах у твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te розглядалося в наближенні часу релаксації в роботах [1, 2]. У роботах [3,4] цей механізм розсіяння розглядався для випадку $x = 0$ з врахуванням не пружного характеру розсіяння в межах точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана. Там же було показано, що застосування стандартної моделі розсіяння електронів на полярних оптичних фонах приводить до неузгодженості між теорією та експериментом в інтервалі температур $T > 100$ К, тобто, в тій області температур, де цей механізм розсіяння є домінуючим. На нашу думку, ця модель має такі недоліки: 1) в ній використовується макроскопічний параметр – діелектрична проникність, який не має сенсу в мікроскопічних процесах; 2) потенціал взаємодії електрона з оптичними коливаннями кристала є далеко діючим, що суперечить спеціальній теорії відносності. Метою роботи є побудова такої моделі розсіяння, яка б, по-перше, добре узгоджувалася з експериментом, а по-друге, не мала б вищевказаних недоліків.

Модель розсіяння електрона на полярному оптичному фоні

Розглянемо зміщення j -го ($j = 1, 2$) атома в елементарній комірці кристала з структурою цинкової обманки під дією оптичних коливань [5]:

$$Q_j = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_{\mathbf{q}, \nu} \left[\frac{\hbar}{2M\omega_\nu(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_j(\mathbf{q}, \nu) b_{\mathbf{q}, \nu} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \xi_j^*(\mathbf{q}, \nu) b_{\mathbf{q}, \nu}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right], \quad (1)$$

де G – число елементарних комірок в об'ємі кристала; $M = xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg} + M_{Te}$ – маса елементарної комірки; \mathbf{q} і $\omega_\nu(\mathbf{q})$ – відповідно хвильовий вектор та кутова частота ν -ої гілки

оптичних коливань кристала ($v = 4, 5, 6$); ξ_j – вектор поляризації коливань кристала; $b_{\mathbf{q},v}$ і $b_{\mathbf{q},v}^*$ – відповідно оператори анігіляції та народження фононів v -ої гілки з хвильовим вектором \mathbf{q} ;

$\boldsymbol{\rho} = \mathbf{i}(n_2 + n_3) \frac{a_0}{2} + \mathbf{j}(n_1 + n_3) \frac{a_0}{2} + \mathbf{k}(n_2 + n_1) \frac{a_0}{2}$, ($n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \dots$), a_0 – стала кристалічної ґратки, $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ – одиничні вектори вздовж головних осей кристала.

При оптичних коливаннях в елементарній комірці виникає вектор поляризації

$$\mathbf{P} = \frac{e(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_2)}{V_0}, \quad (2)$$

де $V_0 = \frac{a_0^3}{4}$ – об'єм елементарної комірки, e – елементарний заряд.

Використовуючи (1) і беручи до уваги тільки довгохвильові ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) коливання, отримаємо

$$\mathbf{P} = \frac{4e}{a_0^3} \sum_{\mathbf{q},v} \left[\frac{\hbar}{2GM\omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} (\xi_1(\mathbf{q},v) - \xi_2(\mathbf{q},v)) \left[b_{\mathbf{q},v} e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} + b_{\mathbf{q},v}^* e^{-i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} \right]. \quad (3)$$

Зауважимо, що вектор поляризації є функцією від дискретних змінних $\mathbf{P} = \mathbf{P}(n_1, n_2, n_3)$. Для обчислення зв'язаного заряду $\rho = -\text{div}\mathbf{P}$ зробимо таку заміну для частинної похідної вектора поляризації по координаті:

$$\frac{\partial P_x}{\partial x} \rightarrow \frac{P_x(n_1+1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2+1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2, n_3+1) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x}, \quad (4)$$

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

Аналогічний вираз записується для похідних $\frac{\partial P_y}{\partial y}$ та $\frac{\partial P_z}{\partial z}$ з $\Delta y = \Delta z = \frac{a_0}{2}$.

Тоді рівняння Пуассона для скалярного потенціалу φ , пов'язаного з коливаннями кристала, має вигляд

$$\Delta\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = \frac{8ie}{a_0^3 \varepsilon_0} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \left[\frac{xM_{\text{Cd}} + (1-x)M_{\text{Hg}} + M_{\text{Te}}}{\{xM_{\text{Cd}} + (1-x)M_{\text{Hg}}\}M_{\text{Te}}} \right]^{1/2} \frac{(q_x + q_y + q_z)^2}{q} \times \left[b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} \right], \quad (5)$$

де використано співвідношення $q_i \frac{a_0}{2} \ll 1$ ($i = x, y, z$), а також враховано лише поздовжні оптичні коливання, ε_0 – діелектрична стала.

Для розв'язання рівняння (5) замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом $R = \gamma a_0$, який знаходиться в межах від половини меншої діагоналі до половини більшої діагоналі комірки ($0.5 < \gamma < \sqrt{3}/2$). Величину γ вибирають таку, щоб досягнути узгодженості між теорією та експериментом. Сферично-симетричне розв'язання рівняння (5) має вигляд

$$\varphi = \frac{\rho}{2\varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right), \quad (0 \leq r \leq R). \quad (6)$$

Тоді енергія взаємодії електрона з полярними оптичними коливаннями ґратки визначається з виразу

$$U = -e\varphi = \frac{4ie^2}{a_0^3 \varepsilon_0} (R^2 - \frac{r^2}{3}) \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \left[\frac{xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg} + M_{Te}}{\{xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg}\}M_{Te}} \right]^{1/2} \frac{(q_x + q_y + q_z)^2}{q} [b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}]. \quad (7)$$

Відзначимо, що потенціал (7) є близькодіючим, оскільки враховує взаємодію електрона лише з однією елементарною коміркою. Для обчислення ймовірності переходу, пов'язаного з електрон-фононною взаємодією, запишемо хвильову функцію системи „електрон + фонони” у вигляді

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n), \quad (8)$$

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

Тоді матричний елемент переходу від енергії взаємодії має вигляд:

$$\langle N'_{\mathbf{q}}, \mathbf{k}' | U | N_{\mathbf{q}}, \mathbf{k} \rangle = \frac{4ie^2}{a_0^3 \varepsilon_0 V} \int \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) (R^2 - \frac{r^2}{3}) d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\hbar}{2G\omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \times \\ \times \left[\frac{xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg} + M_{Te}}{\{xM_{Cd} + (1-x)M_{Hg}\}M_{Te}} \right]^{1/2} \frac{(q_x + q_y + q_z)^2}{q} \int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) \times \\ \times [b_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n, \quad \mathbf{s} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \quad (9)$$

Інтегрування по координатах електрона здійснюється в межах елементарної комірки і дає

$$I(s) = \int \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) (R^2 - \frac{r^2}{3}) d\mathbf{r} = \frac{\pi(8 \sin Rs - 8Rs \cos Rs - 8/3 R^3 s^3 \cos Rs)}{s^5}. \quad (10)$$

Розрахунок показує, що хвильовий вектор електрона (а разом з ним і s) змінюється в межах від 0 до 10^9 м^{-1} при зміні енергії від 0 до 10 кВТ (k_B – стала Больцмана) в температурному інтервалі $4.2 - 300 \text{ К}$. З показаної на рис. 1 залежності величини $I(s)/I(0)$ від s видно, що у вказаних межах зміни хвильового вектора достатньо добре виконується співвідношення $I(s) \approx I(0) = 16/15 \pi R^5 = 16/15 \pi a_0^5 \gamma^5$.

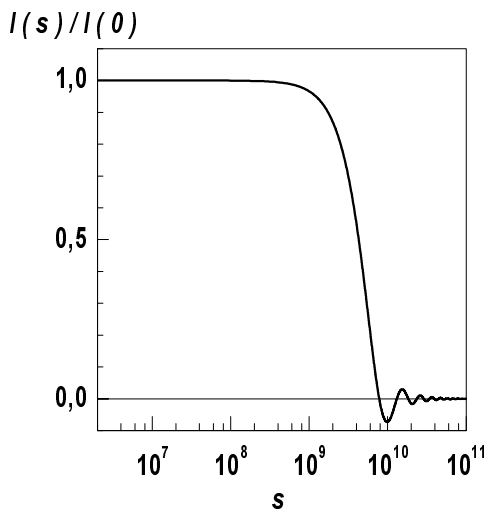


Рис. 1. Залежність функції $I(s)/I(0)$ від $s = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$

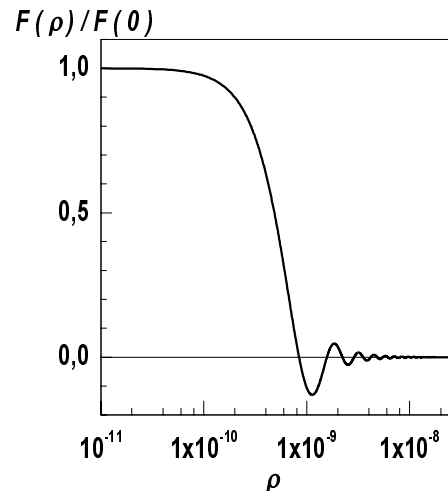


Рис. 2. Залежність функції $F(\rho)/F(0)$ від ρ

Інтегрування по координатах гармонічних осциляторів дає множники $\sqrt{N_{\mathbf{q}}}$ та $\sqrt{N_{\mathbf{q}} + 1}$ ($N_{\mathbf{q}}$ – число фононів з частотою $\omega(\mathbf{q}) = \omega_0$ при $\mathbf{q} \rightarrow 0$) відповідно для операторів анігіляції та народження фононів. Для обчислення суми за вектором \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 :

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \dots dq_x dq_y dq_z \rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi/a_0} \dots q^2 \sin \theta dq d\theta d\varphi \quad (11)$$

Тоді для суми отримаємо вираз:

$$\sum_{\mathbf{q}} \dots = F(\rho) = \pi \frac{8 \cos \rho Q + 8 \rho Q \sin \rho Q - 4\rho^2 Q^2 \cos \rho Q - 8}{\rho^4} \times \begin{cases} \sqrt{N_{\mathbf{q}}} - \text{поглинання;} \\ \sqrt{N_{\mathbf{q}} + 1} - \text{випромінювання.} \end{cases} \quad Q = \pi/a_0. \quad (12)$$

З показаної на рис. 2 залежності $F(\rho)/F(0)$ від ρ видно, що функція $F(\rho)$ може бути апроксимована виразом

$$F(0) = \pi Q^4 \times \begin{cases} \sqrt{N_{\mathbf{q}}} \\ \sqrt{N_{\mathbf{q}} + 1} \end{cases}. \quad (12a)$$

Після проведення розрахунків отримаємо вираз для ймовірності переходу електрона, зв'язаного з поглинанням та випромінюванням фонона:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64 \pi^7 \gamma^{10} e^4}{225 \varepsilon_0^2 a_0^4 G \omega_0} \frac{x M_{\text{Cd}} + (1-x) M_{\text{Hg}} + M_{\text{Te}}}{\{x M_{\text{Cd}} + (1-x) M_{\text{Hg}}\} M_{\text{Te}}} \left[N_{\mathbf{q}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + (N_{\mathbf{q}} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0) \right], \quad (13)$$

де ε – енергія електрона.

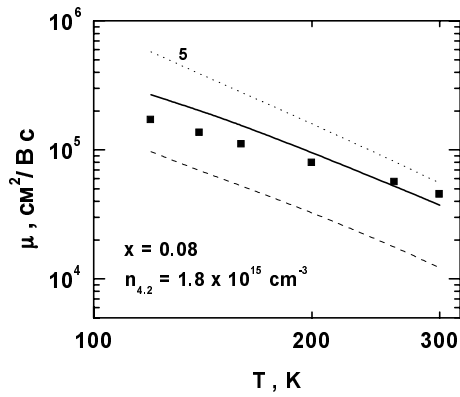
На основі цього для внутрішньо – та міжзонних переходів електрона можна розрахувати величини $K_{\beta\alpha ab}^{n m}$, які фігурують у методі точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [3].

Аналіз отриманих результатів

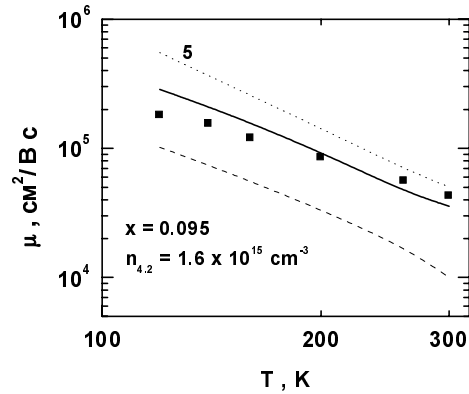
Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, наведеними в роботі [2], для кристалів $\text{Cd}_x \text{Hg}_{1-x} \text{Te}$ з складом $x = 0.08; 0.095; 0.12; 0.135; 0.17$. Цим складам відповідає значення параметра $\gamma = 0.6708; 0.6952; 0.7103; 0.7125; 0.7125$. Розрахунок теоретичних залежностей $\mu(T)$ проводився на основі рівняння нейтральності: $n - p = N_d$, де $N_d = n_{4.2}$ – концентрація електронів при 4.2 К.

При розрахунках брали до уваги ті ж самі механізми розсіювання та параметри кристалів, що і в роботах [2, 3, 6, 7]. Теоретичні температурні залежності показані на рис. 3. Там же штриховою лінією зображені криві, розраховані на основі далекодіючої моделі розсіювання в межах точного розв'язку рівняння Больцмана. Видно, що в інтервалі температур 120–300 К близькодійуча модель розсіювання дає добре узгодження з експериментом (відхилення становить $\sim 10\text{--}20\%$), тоді як криві, розраховані на основі далекодіючої моделі розсіювання, відрізняються від експериментальних даних в 1.9–3.8 раза.

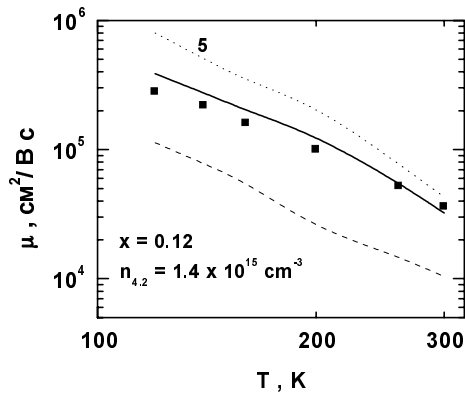
Для встановлення ролі окремих механізмів розсіяння на рис. 3д точковими лініями зображені відповідні температурні залежності для складу $x = 0,17$. Видно, що усьому розглянутому інтервалі температур домінуючим є внутрішньозонне розсіяння на полярних оптичних фононах (ПО11), решта механізмів розсіяння – розсіяння на акустичних (АК), п'єзоакустичних (ПАК) та неполярних оптичних (НПО) фононах, розсіяння неупорядкованості (НП) та на іонізованих домішках (ІД) – дають малий внесок. Аналогічна ситуація спостерігається і для кристалів іншого складу.



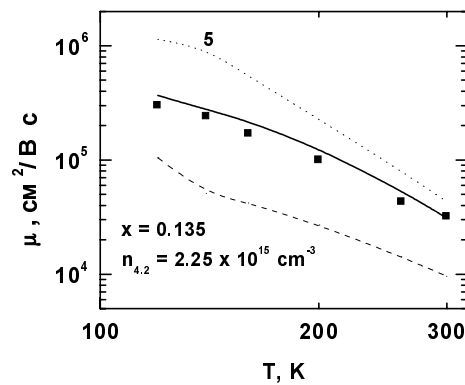
a



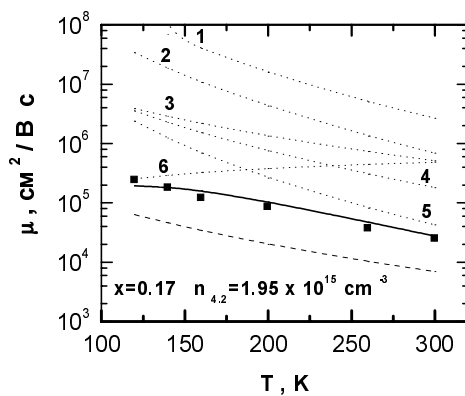
б



в



г



д

Рис. 3. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах $Cd_xHg_{1-x}Te$. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння (близькодійюча модель); штрихова лінія – змішаний механізм розсіяння (далекодійюча модель); 1,2,3,4,5,6 – відповідно НПО-, АК-, ПАК-, НП-, ПО11- та ІД-механізми розсіяння. Експеримент – [2]

Висновок

Розроблена близькодiюча модель непружного розсiяння електронiв на полярних оптичних фононах в $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$, яка в межах точного розв'язку стацiонарного рiвняння Больцмана дає добре узгодження теорiї з експериментом в iнтервалi температур $T = 120\text{--}300\text{ K}$.

1. Szymanska W., Dietl T. // *J. Phys. Chem. Solids.*, 1978. **39**. – P.1025–1040.
2. Dubowski J., Dietl T., Szymanska W. // *J. Phys. Chem. Solids.*, 1981. **42**. – P.351–362.
3. Малик О.П. // *УФЖ.*, 2002. **47**. – С.842–845.
4. Malyk O.P. // *Journal of Alloys and Compounds.*, 2004. – прийнято до друку.
5. Бонч-Бруевич В.Л., Калашиников С.Г. *Физика полупроводников.* – М.: Наука, 1977.
6. Малик О.П. // *УФЖ.*, 1990. **35**. – С.1374–1376.
7. Mani R., Anderson J., Choi J., Nelson D. // *Phys. Rev. B: Condens. Matter.*, 1987. **36**. – P.9146–9149.

УДК 621.382.2:539.1.074

О.М. Пігур, Д.І. Цюцюра, В.Б. Британ, Д.Д. Шуптар, С.Г. Крилюк¹
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
¹Інститут фізики напівпровідників НАН України

ФОТОПРОВІДНІСТЬ CdTe , ЛЕГОВАНОГО АЛЮМІНІЄМ

© Пігур О.М., Цюцюра Д.І., Британ В.Б., Шуптар Д.Д., Крилюк С.Г., 2004

O.M. Pigur, D.I. Tsiutsiura, V.B. Brytan, D.D. Shuptar, S.G. Krylyuk

PHOTOCONDUCTIVITY OF AL-DOPED CdTe

© Pigur O.M., Tsiutsiura D.I., Brytan V.B., Shuptar D.D., Krylyuk S.G., 2004

Проведено дослідження фотопровідності і фотолюмінесценції CdTe:Al , вирощеного методом сублімації. Проаналізовано процес рекомбінації носіїв заряду в залежності від температури. Із вимірювань фотолюмінесценції при 5 К отримано спектр домішок і дефектів за участю Al. Відмічено особливості фотопровідності CdTe:Al , пов'язані з величиною і напрямком електричного поля.

The researches of photoconductivity and photoluminescence of CdTe:Al , brought up by a method of sublimation are carried out. The process of recombination of carriers of a charge in depending un temperature is analysed. A spectrum of impurity and defects with participation of Al is received from measurements of photoluminescence at 5 K. The special features of photoconductivity of CdTe:Al , connected with size and direction of an electrical field, are marked.

Вступ

Однією з умов використання CdTe в напівпровідниковій промисловості є великі значення питомого опору ($\sim 10^9\text{ Ом}\cdot\text{см}$) і добутку $\tau\mu$ ($\sim 10^{-2}\text{ см}^2\cdot\text{В}^{-1}$). Відомо, що нелеговані напівпровідники CdTe , вирощені методом Бріджмена, при 300 К мають питомий опір $10^4\text{--}10^5\text{ Ом}\cdot\text{см}$ і є досить дефектними. Основними дефектами в цьому матеріалі є вакансії Cd (V_{Cd}), Te (V_{Te}), які можуть бути в різному зарядовому стані та міжвузлові атоми Cd і Te, а також неконтрольовані домішки. Для компенсації акцепторів, якими є V_{Cd} і за даними багатьох авторів можуть досягати концентрації 10^{16} см^{-3} , кристали легують елементами III (Ga, In, Al) або VII (Cl, Br, J) груп таблиці Менделєєва. Легування CdTe алюмінієм приділена найменша увага. Тим не менше легування CdTe Al дає