

©1995

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОДВИЖНОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В HgSe:Fe В МОДЕЛИ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННОЙ КУЛОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ

И.Г.Кулеев, И.И.Ляпин, И.М.Цидильковский

Институт физики металлов Уральского отделения
Российской академии наук, 620219, Екатеринбург, Россия
(Поступила в Редакцию 17 января 1995 г.)

Проанализирована температурная зависимость подвижности электронов для кристаллов HgSe:Fe с различным содержанием железа в модели сильно коррелированной кулоновской жидкости. Найдены вклады в подвижность от рассеяния на пространственно коррелированной системе заряженных доноров Fe(3+), в которой возможно образование ближнего порядка, и сплавном потенциале. Показано, что наличие ближнего порядка является главной причиной наблюдаемых «аномальных» зависимостей подвижности электронов от температуры.

Интерес к изучению соединений HgSe:F обусловлен необычным характером зависимостей ряда электронных характеристик от концентрации примесей железа N_{Fe} и температуры T [1]. Так, в определенном интервале концентраций атомов железа (до $\approx 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) подвижность электронов μ при низких температурах ($T < 100 \text{ K}$) возрастает с ростом N_{Fe} , тогда как, согласно классической теории рассеяния на неупорядоченной совокупности ионов примеси (теория Брукса-Херринга), подвижность μ должна убывать при увеличении N_{Fe} . Температурная зависимость подвижности $\mu(T)$ для концентраций $N_{\text{Fe}} > 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ также «аномальна»: при понижении температуры от ≈ 40 до $\approx 5 \text{ K}$ подвижность увеличивается, тогда как, согласно теории Брукса-Херринга, она не должна зависеть от температуры, как это имеет место для образцов с $N_{\text{Fe}} < 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, где все доноры (атомы железа) ионизованы и образуют хаотическую совокупность заряженных центров.

Наблюдаемые аномалии кинетических коэффициентов связаны с тем, что примеси железа находятся в двух зарядовых состояниях: Fe(3+) и Fe(2+). Аномальные температурные и концентрационные зависимости кинетических коэффициентов (подвижности μ [2], термомагнитных коэффициентов Нернста-Эттинсгаузена [3]) обусловлены пространственной корреляцией в системе заряженных примесей железа Fe(3+). Было показано, что именно кулоновские корреляции в системе ионов Fe(3+) приводят к возникновению пространственного упорядочения в их расположении и существенно влияют на рассеяние зонных носителей заряда.

Модель короткодействующих корреляций (МКК) между ионами $\text{Fe}(3+)$ в $\text{HgSe}:\text{Fe}$, предложенная в [4], основана во многом на интуитивных физических соображениях и простейшем выборе корреляционной функции $g(r)$ в виде ступенчатой функции $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)$, где \mathbf{r}_c — радиус корреляции. Эта модель получила ясное физическое обоснование и строгое математическое развитие в работах [2,5], в которых для описания корреляционных свойств ионов железа в системе со смешанной валентностью $\text{Fe}(2+)-\text{Fe}(3+)$ в $\text{HgSe}:\text{Fe}$ были привлечены методы, развитые для систем частиц с ближним порядком [6]. Эти методы успешно применялись для изучения электронных свойств сильно коррелированных систем, таких как жидкие металлы и сплавы [6,7]. Использование их для систем ионов железа со смешанной валентностью в $\text{HgSe}:\text{Fe}$ позволило сформулировать МКК на основе интегральных уравнений Орнштейна–Зернике для парной корреляционной функции и приближения Перкуса–Иевики.

Постулировав в рамках МКК ступенчатый вид парной корреляционной функции, авторы [4] качественно интерпретировали увеличение подвижности электронов $\mu(N_{\text{Fe}})$. В [2] температурная зависимость подвижности была рассчитана в приближении прямой межионной корреляции и квантового экранирования. Расчет был выполнен при двух упрощающих предположениях: не учитывалось рассеяние на сплавном потенциале, а при вычислении вклада в подвижность от рассеяния на коррелированной системе ионов $\text{Fe}(3+)$ пренебрегалось интегральным членом в уравнении Орнштейна–Зернике для парной функции распределения $g(r)$. Несмотря на сделанные предположения, было получено неплохое согласие между вычисленными и экспериментально определенными значениями подвижности. Такое согласие связано, очевидно, с тем, что сплавное рассеяние и рассеяние на коррелированной системе заряженных доноров вносят все более различающиеся вклады в подвижность при увеличении концентрации железа N_{Fe} в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$. Рост N_{Fe} приводит к усилению рассеяния электронов на сплавном потенциале, а рассеяние на коррелированной системе ионов $\text{Fe}(3+)$ при этом ослабляется. В результате вычисленная температурная зависимость подвижности оказывается несколько сглаженной.

В [5] было показано, что аномальный характер изменения подвижности с концентрацией железа $\mu(N_{\text{Fe}})$ для кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$ — рост до концентрации $N_m = N_{\text{Fe}} \approx 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и убывание при $N_{\text{Fe}} \geq N_m$ — количественно хорошо описывается комбинацией рассеяния электронов на потенциале коррелированно расположенных доноров $\text{Fe}(3+)$ и сплавном потенциале. Было также установлено, что в системе ионов $\text{Fe}(3+)$ при низких температурах и концентрациях железа $[(N_{\text{Fe}} - N_{\text{Fe}(3+)})/N_{\text{Fe}}] \ll 1$ межионные корреляции достаточно слабы, так что в целом совокупность ионов $\text{Fe}(3+)$ подобна газу низкой плотности. При более высоких концентрациях $[(N_{\text{Fe}} - N_{\text{Fe}(3+)})/N_{\text{Fe}}] > 1$ в системе ионов $\text{Fe}(2+)-\text{Fe}(3+)$ имеется достаточно большое число мест для перераспределения d -электронов, и кулоновское отталкивание между заряженными донорами приводит к сильным пространственным корреляциям в расположении ионов $\text{Fe}(3+)$. Было показано, что при большом содержании железа система ионов $\text{Fe}(3+)$ по своим свойствам

близка к жидкости. Заметим, что расчет подвижности, выполненный авторами [4] в приближении ступенчатой парной корреляционной функции, соответствует случаю слабо коррелированного газа ионов $\text{Fe}(3+)$ и может быть использован только для начального участка роста кривой подвижности $\mu(N_{\text{Fe}})$, т.е. до значений $N_{\text{Fe}} \leq (5.5-6) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

В [2] в качестве потенциала ион-ионного взаимодействия выбран потенциал квантовой теории экранирования Хартри. В условиях нашей задачи потенциал Томаса-Ферми $U_{TF}(r)$ является недостаточным для описания межионного взаимодействия, поскольку он изменяется в пространстве сравнительно резко: радиус экранирования потенциала $r_s < r_i$, где r_i — среднее межионное расстояние. Для упрощения вычислений мы аппроксимировали довольно громоздкое выражение для потенциала Хартри модифицированным потенциалом Томаса-Ферми

$$U(\mathbf{r}) = \begin{cases} U_{TF}(\mathbf{r}) - U_{TF}(\mathbf{r}_c), & r < r_{cr}, \\ 0, & r > r_{cr}. \end{cases} \quad (1)$$

Точка r_{cr} соответствует первому обращению в нуль потенциала Хартри. В актуальной для нашей задачи области $U \leq k_B T$ модифицированный потенциал (1) близок к потенциалу Хартри. Очевидно, что при $T=0$ функция распределения $g_0(\mathbf{r}) \approx \exp(-U(\mathbf{r})/k_B T)$ имеет вид ступеньки, характерной для потенциала твердых сфер, так что r_c есть не что иное, как диаметр твердой сферы. Как показано в [4], при $T \neq 0$ температурная зависимость подвижности определяется главным образом не положением точки r_{cr} , а поведением потенциала ион-ионного взаимодействия в окрестности точки r_{cr} . При возрастании концентрации железа в области $N_{\text{Fe}} > N_m$ концентрация электронов n , энергия Ферми ϵ_F и радиус экранирования r_s перестают зависеть от N_{Fe} . Поэтому поведение потенциала ион-ионного взаимодействия (1) в окрестности точки r_{cr} , как и само значение r_{cr} , не изменяется при возрастании концентрации нейтральных в решетке HgSe центров $\text{Fe}(2+)$. Однако с увеличением концентрации нейтральных центров система ионов $\text{Fe}(3+)$ все более упорядочивается. Поэтому потенциал, в котором находится ион $\text{Fe}(3+)$, определяется самосогласованным действием потенциалов других ионов $\text{Fe}(3+)$, окружающих данный. Именно этот самосогласованный потенциал $U_s(\mathbf{r})$ обуславливает перераспределение d -электронов (если имеется достаточное число нейтральных центров) так, чтобы обеспечить минимум свободной энергии в местах расположения ионов $\text{Fe}(3+)$.

Анализ, проведенный в [5], показывает, что зависимость потенциала $U_s(\mathbf{r})$ от концентрации нейтральных примесей $\text{Fe}(2+)$ сказывается на зависимости диаметра твердой сферы от N_{Fe} . Вследствие экранирования полей заряженных центров $\text{Fe}(3+)$ электронами последние также вносят вклад в $U_s(\mathbf{r})$.

Итак, несмотря на то, что температурная зависимость подвижности электронов в HgSe:Fe была рассмотрена в [2], представлялось целесообразным более глубоко исследовать аномальное поведение $\mu(T)$ с учетом сильных межионных корреляций и сплавного рассеяния.

Согласно модели, предложенной нами в [5], систему ионов Fe(3+)-Fe(2+) в HgSe: Fe будем рассматривать как бинарный сплав, состоящий из заряженных Fe(3+) и нейтральных в решетке Fe(2+)-центров. Релаксация импульса электронов осуществляется за счет взаимодействия электронов с этими центрами. В борновском приближении частота релаксации импульса $\tau^{-1}(\varepsilon)$ квадратична по взаимодействию электронов с рассеивателями, вследствие чего вклад в τ^{-1} вносят рассеяние на коррелированно расположенных парах ионов Fe(3+)-Fe(3+) и на неупорядоченно распределенных парах Fe(2+)-Fe(2+) (см. [5]). Взаимодействие электронов с нейтральными центрами Fe(2+) считается контактным. При вычислении времени релаксации электронов примем во внимание непараболичность зоны проводимости HgSe. В двухзонном приближении закон дисперсии для электронов зоны проводимости имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left\{ \left[1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_n \varepsilon_g} \right]^{1/2} - 1 \right\}, \quad (2)$$

где m_n — эффективная масса электрона на дне зоны, $\varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_6)$, m_0 — масса свободного электрона. Для HgSe $\varepsilon_g = 0.22$ eV, $m_n \cong 0.02m_0$.

Согласно [5], выражение для подвижности электронов как функции концентрации железа и температуры может быть записано в виде

$$\mu(N_{\text{Fe}}) = \mu_c \left\{ 1 + \frac{\Delta}{2\Phi_c} \left(\frac{N_0}{N_c} \right)^{1/2} \left[4\Phi_{+0} + \Lambda \left(\frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \right] \right\}^{-1}. \quad (3)$$

Здесь $\mu_c = \mu_{\text{BH}} \Phi_{\text{BH}} / \Phi_c$, μ_{BH} есть подвижность электронов для рассеяния на неупорядоченной системе примесных ионов (теория Брукса-Херринга), $\Phi_{\text{BH}} = \ln(1 + b_s^2) - b_s^2 / (1 + b_s^2)$, $b_s = 2k_F r_s$,

$$\Phi_c(k_F) = 2 \int_0^1 \frac{\chi^3 S(2k_F)}{(\chi^2 + b_s^{-2})} dx, \quad \Phi_{+0}(k_F) = 1 - b_s^{-2} \ln(1 + b_s^2), \quad (4)$$

N_+ , N_0 — концентрация заряженных Fe(3+)- и нейтральных Fe(2+)-центров. Безразмерный параметр $\Lambda = \frac{m_{\text{aB}} k_F^2 U_0}{\pi \hbar^2}$ есть отношение констант взаимодействия электронов с нейтральными и заряженными центрами, a_B — борковский радиус, $U_0 = \Omega \Delta U$, Ω — объем элементарной ячейки, ΔU — потенциал, на котором реализуется сплавное рассеяние. Согласно [5], $\Lambda \cong 0.1$, а $\Delta U = (0.32-0.35)$ eV.

2. Рассеяние на коррелированной системе ионов Fe(3+)

Для оценки корреляционного вклада в подвижность $\mu(N_{\text{Fe}}, T)$ необходимо найти структурный фактор $S(q)$, величина которого характеризует степень упорядочения ионов Fe(3+). При полном беспорядке $S(q) = 1$. Структурный фактор может быть выражен через парную корреляционную функцию $g(r)$ следующим образом:

$$S(q) = 1 - 4\pi N[\text{Fe}(3+)] \int_0^{\infty} [g(r) - 1] \frac{r \sin(qr)}{q} dr. \quad (5)$$

В области сильных кулоновских корреляций для определения структурного фактора необходимо решать нелинейное интегральное уравнение для парной функции $g(r)$. Такая задача была решена в приближении Перкуса-Йевики для модельной системы твердых сфер [5]. Использование этого приближения оправдывается тем, что результаты расчетов термодинамических и кинетических характеристик сильно коррелированных систем (жидких металлов, сплавов) хорошо согласуются с вычислениями, выполненными методом Монте-Карло. Анализ зависимости подвижности от концентрации показал, что имеется полная аналогия между корреляционными свойствами системы ионов в жидкости и в системе заряженных доноров HgSe:Fe. Структура и свойства жидкостей определяются главным образом резко меняющейся отталкивающей частью потенциала ион-ионного взаимодействия [7], которую можно с хорошей точностью аппроксимировать потенциалом твердых сфер. Такой подход оказался плодотворным и для описания системы заряженных доноров в HgSe:Fe [5], в которой пространственные корреляции обусловлены именно кулоновским отталкиванием. Однако результаты работы [5] относятся к случаю $T = 0$. Для анализа поведения подвижности при конечных температурах мы воспользуемся приемом, который применялся при исследовании температурной зависимости кинетических коэффициентов жидких металлов и сплавов [8], — приближением так называемых «мягких» сфер, в котором учитывается изменение диаметра корреляционной сферы с температурой.

Поскольку температурная зависимость подвижности чувствительна лишь к поведению потенциала $U_s(r)$ в непосредственной близости от точки r_{cr} [2], где $\Delta U_s(r_{\text{cr}}) = U_s(r_{\text{cr}} + \Delta r) - U_s(r_{\text{cr}}) \leq 3/2k_B T$, то в окрестности r_{cr} можно разложить потенциал по малому смещению Δr ($\Delta r \ll R$, R — среднее расстояние между заряженными донорами). Из приведенного здесь условия можно определить вид температурной зависимости диаметра корреляционной сферы

$$d(T) = d_0 \left(1 - \frac{\Delta r}{d_0} \right), \quad \frac{\Delta r}{d_0} = \beta_1 \left\{ \sqrt{1 + \beta_2 T} - 1 \right\}, \quad (6)$$

где

$$\beta_1 = \frac{\alpha_1}{2\alpha_2}, \quad \beta_2 = \frac{6\alpha_1}{(\alpha_2)^2}, \quad \alpha_1 = d_0 \frac{dU(r)}{dr} \Big|_{r=r'_{\text{cr}}}, \quad \alpha_2 = d_0^2 \frac{d^2 U(r)}{d^2 r} \Big|_{r=r'_{\text{cr}}}. \quad (6a)$$

Если $\left. \frac{dU(r)}{dr} \right|_{r=r_{cr}} = 0$, как это принимается при интерпретации температурной зависимости диаметра корреляционной сферы в жидких металлах [8], то

$$\Delta r/d_0 = \beta_3 T^{1/2}, \quad \beta_3 = \left[\frac{k_B T}{\alpha_2} \right]^{1/2}. \quad (7)$$

Потенциал $U_s(r)$ создается ближайшим окружением данного иона, где существует ближний порядок в системе заряженных доноров.

$$U_s(r) = \sum_{j \neq i} V(R_{ij}) [g(R_{ij}) - 1]. \quad (8)$$

Здесь $V(R_{ij})$ — потенциал, создаваемый j -м ионом в точке R_i , $g(R_{ij})$ — парная функция распределения. Для экранированного кулоновского потенциала (8) можно представить в виде

$$U_s(r) = \frac{e^2}{\chi \pi} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{q^2 + r_s^{-2}} [S(q) - 1] \frac{\sin(qr)}{qr}. \quad (9)$$

Структурный фактор $S(q)$ выражается через фурье-образ прямой корреляционной функции $C(q)$ следующим образом [5]:

$$S(q) = [1 - N_+ C(q)]^{-1}. \quad (10)$$

Здесь

$$C(q) = \frac{4d^3}{u^3} \left\{ \left[\beta + 2\gamma + 4\delta - \frac{24}{u^2} \right] \sin u + \left[\frac{2}{u}(\gamma + 6\delta) - (\beta + \gamma + \delta) - \frac{24}{u^3} \right] \times \right. \\ \left. \times \cos u + \frac{24\delta}{u^3} - \frac{2\gamma}{u} \right\},$$

$$\beta = \frac{(1 + 2\eta)^2}{(1 - \eta)^4}, \quad \gamma = \frac{6\eta(1 + 0.5\eta)}{(1 - \eta)^4}, \quad \delta = 0.5\beta\eta, \quad u = qd.$$

Величина $\eta = \eta(T) = \eta_0 [1 - \Delta r/d_0]^3$ есть параметр упаковки, определяющий изменение степени корреляции в расположении «мягких» сфер с температурой, т.е. ближний порядок в системе заряженных доноров железа. При $T = 0$ параметр упаковки $\eta_0(N_{Fe}) = \pi d_0^3 N_+ / 6$ определяется уравнением, справедливым для случая сильной корреляции ионов $Fe(3+)$ [5].

$$\eta(N_{Fe}) = \eta_L \left\{ 1 - \exp \left[\frac{\eta N_{Fe}}{\eta_L N_+} \right] \right\}, \quad (11)$$

где $\eta_L \cong 0.45$ — значение параметра упаковки для жидкости. Выражение (9) позволяет непосредственно вычислить параметры β_1 и β_2 , определяющие температурную зависимость диаметра твердой сферы.

Заметим, что кулоновское взаимодействие между ионами $\text{Fe}(3+)$ приводит к установлению ближнего порядка в системе этих ионов и к расщеплению резонансной d -зоны на зону пустых состояний $\text{Fe}(3+)$, расположенную выше уровня Ферми, и зону заполненных d -состояний, которая лежит ниже уровня Ферми. В результате в системе $\text{Fe}(3+)$ - $\text{Fe}(2+)$ возникает новый канал неупругого рассеяния электронов [9]. Процессы рассеяния такого типа связаны с возбуждением d -электронов из заполненной в пустую зону (т.е. с ионов $\text{Fe}(2+)$ на $\text{Fe}(3+)$) в результате акта рассеяния электрона. Энергия, необходимая для перезарядки ионов, расположенных в точках R_i и R_j , равна $\Delta\epsilon_{ij} = U_s(R_i) - U_s(R_j)$. Поскольку минимальное расстояние между ионами $\text{Fe}(3+)$ и $\text{Fe}(2+)$ составляет один или несколько периодов решетки, то $\Delta\epsilon_{ij} \geq \epsilon_{\min}$. Оценки ϵ_{\min} , найденные по формуле (9), дают $\epsilon_{\min} \approx 5$ К.

С ростом температуры интенсивность таких прыжков возрастает, все более нарушается ближний порядок в системе ионов $\text{Fe}(3+)$ и соответственно уменьшается диаметр корреляционной сферы. Поэтому в результате перескоков d -электроны между ионами $\text{Fe}(2+)$ и $\text{Fe}(3+)$ система ионов $\text{Fe}(3+)$ при низких температурах и достаточно высоких концентрациях нейтральных центров становится подобной жидкости.

Для того чтобы найти температурную зависимость $d(T)$ и определить параметры потенциала $U_s(r)$, поступим следующим образом. Из экспериментальных значений подвижности вычтем вклад сплавного рассеяния и выделим таким образом подвижность, обусловленную рассеянием только на коррелированной системе заряженных доноров,

$$\mu_e^{(\text{exp})}(N_{\text{Fe}}T) = \mu_{\text{BH}} \left\{ \frac{\mu_{\text{BH}}}{\mu^{\text{exp}}} - \frac{\Lambda}{2\Phi_{\text{BH}}^*} \left(\frac{N_0}{N_c} \right)^{-1} \left[4\Phi_{+0} + \Lambda \left(\frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \quad (12)$$

Здесь звездочками отмечены величины, относящиеся к концентрации ионов железа, выше которой концентрация зонных электронов не меняется с N_{Fe} , $N_{\text{Fe}}^* = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $\mu_{\text{BH}}^* = 3 \cdot 10^4 \text{ см}^2/\text{V} \cdot \text{с}$, $\Phi_{\text{BH}}^* = 2.3$.

Найденные таким способом значения подвижности $\mu_c^{(\text{exp})}(N_{\text{Fe}}, T)$ для различных концентраций примесей железа представлены на рис. 1. Из этого рисунка видно, что при увеличении концентрации железа, когда уровень Ферми пиннингуется донорным уровнем железа, в области низких температур подвижность $\mu_c^{(\text{exp})}(N_{\text{Fe}}, T)$ все сильнее зависит от температуры. Это свидетельствует о заметном ослаблении рассеяния на коррелированной системе заряженных примесей. При высоком содержании железа ($N_{\text{Fe}} > 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) температурные зависимости подвижности перестают зависеть от содержания железа в $\text{HgSe}; \text{Fe}$. Это подтверждает вывод [5] о том, что при большом содержании железа основное состояние системы ионов $\text{Fe}(3+)$ есть состояние сильно коррелированной кулоновской жидкости. Вероятность рассеяния на коррелированно распределенных заряженных донорах достигает при этом предельной величины.

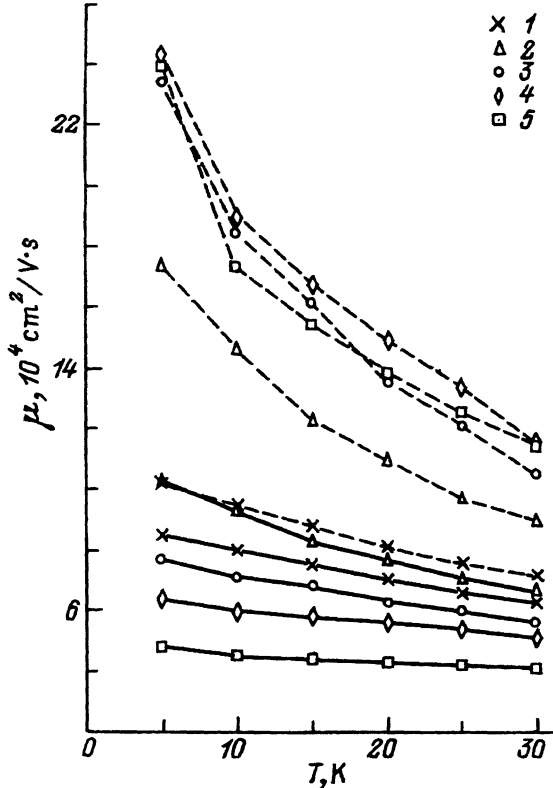


Рис. 1. Зависимость подвижности электронов от температуры для кристаллов HgSe:Fe. Сплошными линиями соединены экспериментальные точки, соответствующие ионам железа (в единицах 10^{18} cm^{-3}): 1 — 7,5, 2 — 15, 3 — 50, 4 — 80, 5 — 150. Штриховые линии описывают зависимость подвижности без учета вклада сплавного рассеяния.

Используя теперь выражение для структурного фактора $S(q)$, рассчитаем связь между подвижностью $\mu_c = \mu_{\text{ВН}} \Phi_{\text{ВН}} / \Phi_c$ и параметром упаковки η . Сравнив затем вычисленные значения $\mu_c(\eta)$ и экспериментально найденные значения $\mu_c(N_{\text{Fe}}, T)$, можно будет найти зависимость $\eta(T)$ для различных концентраций железа. Эту процедуру следует ограничить температурным интервалом 5–30 К. Действительно, при более высоких температурах ($T > 30 \text{ K}$) становится существенным вклад рассеяния электронов на фононах. При более низких температурах подвижность μ перестает зависеть от температуры и выходит на постоянное значение. Порог насыщения $\mu(T)$, как было показано в [10], определяется температурой замораживания перескоков d -электронов в системе ионов Fe(2+) и Fe(3+). Более подробно вопрос о насыщении подвижности электронов при сверхнизких температурах в кристаллах HgSe:Fe мы напомним рассмотреть в одной из последующих работ.

Найденная таким образом зависимость $\eta(T)$ для кристаллов HgSe:Fe с различным содержанием железа приведена на рис. 2. Видно, что как при понижении температуры, так и при увеличении концентрации железа параметр η увеличивается. При концентрациях $N_{\text{Fe}} \geq 5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ и низких температурах η достигает предельного значения $\eta \approx 0.45$, характерного для жидкости, а сама температурная зависимость $\eta(T)$ при этом практически не зависит от концентрации железа. Параметры β_1 и β_2 также остаются неизменными при варьировании величины N_{Fe} .

Как уже отмечалось, при низких температурах ($T \leq 5$ К) [5] и содержании железа $N_{\text{Fe}} > 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ подвижность становится постоянной. Такое поведение $\mu(N_{\text{Fe}}, T)$, а следовательно, и параметра упаковки $\eta(T)$ можно использовать для оценки параметров β_1 и β_2 , определяющих диаметр $d(T)$ «мягкой» сферы. С этой целью в (6) для $d(T)$ можно ввести характерную температуру $T^* \approx 5$ К, т.е. заменить T на $T - T^*$. Значения параметров β_1 и β_2 , найденные в результате подгонки теоретических кривых (формула (7) и рис. 2) к экспериментальным значениям для высоких концентраций железа ($N_{\text{Fe}} = (50, 80, 150) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$), оказались равными $\beta_1 \approx 0.02$, $\beta_2 \approx 3.2$. Значения этих параметров, вычисленные непосредственно из величины корреляционного потенциала (9), равны $\beta_1 \approx 0.05$, $\beta_2 \approx 2.5$.

Корреляции в системе заряженных доноров заметно ослабляются при понижении концентрации железа, что приводит к нарушению ближнего порядка в системе ионов $\text{Fe}(3+)$. Это сказывается и на зависимости параметров β_1 и β_2 от концентрации N_{Fe} . Анализ формул (6а) и (9) показывает, что параметр β_1 должен монотонно возрастать, а параметр β_2 монотонно убывать при уменьшении концентрации железа. Значения параметров, найденные путем подгонки рассчитанных значений параметра упаковки η к экспериментально определенным для концентраций железа $N_{\text{Fe}} = (7.5, 15) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, оказались равными $\beta_1 \approx 0.04$, $\beta_2 \approx 0.3$ и $\beta_1 \approx 0.03$, $\beta_2 \approx 1.5$ соответственно. Изменения параметров β_1 и β_2 при изменении концентрации железа согласуются с зависимостями, которые следуют из нашего расчета. Некоторые различия эмпирически найденных и вычисленных значений β_1 и β_2 связаны с упрощениями, допускаемыми в использованной модели при описании температурных зависимостей $\eta(T)$.

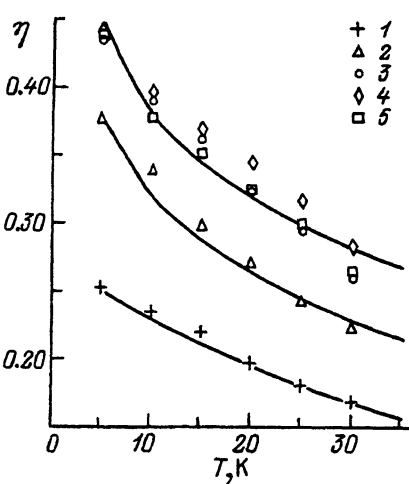


Рис. 2. Зависимость параметра порядка η от температуры для кристаллов HgSe:Fe с различным содержанием железа.

Обозначения экспериментальных точек те же, что и на рис. 1. Линии — результат расчета.

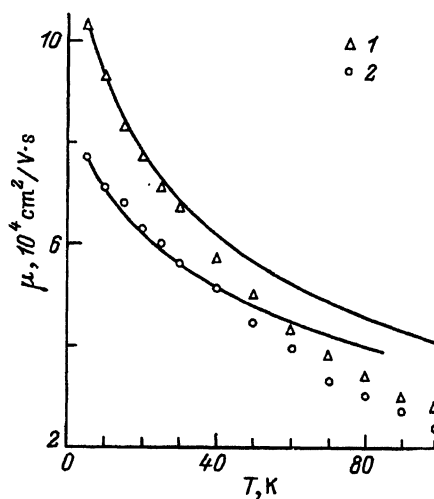


Рис. 3. Рассчитанные (линии) и экспериментальные (символы) зависимости подвижности электронов от температуры для кристаллов HgSe:Fe с различной концентрацией железа. N_{Fe} (в единицах 10^{18} см^{-3}): 1 — 15, 2 — 50.

На рис. 3 приведены температурные зависимости подвижности $\mu(T)$ для разных концентраций железа N_{Fe} в кристаллах HgSe:Fe , рассчитанные в рамках рассмотренной выше модели в более широком интервале температур (≈ 100 K). Видно, что низкотемпературное поведение подвижности хорошо описывается нашим расчетом для различных степеней корреляции в системе заряженных доноров железа. Это позволяет заключить, что предложенная модель и использованные приближения вполне удовлетворительно описывают наблюдаемые температурные зависимости подвижности электронов для кристалла HgSe:Fe . При высоких температурах рассчитанные значения подвижности оказываются несколько выше, чем наблюдаемые. Эти различия связаны с механизмами рассеяния электронов, которые проявляются при высоких температурах, например с рассеянием на фононах.

Физический смысл изложенного выше расчета температурного изменения подвижности электронов в HgSe:Fe совершенно очевиден. При конечных температурах $T > 0$ электроны мигрируют между ионами $\text{Fe}(2+)$ и $\text{Fe}(3+)$. С повышением температуры эта миграция усиливается, кулоновские корреляции среди заряженных доноров $\text{Fe}(3+)$ ослабляются, корреляционный радиус уменьшается, и система примесных ионов $\text{Fe}(3+)$ все больше хаотизируется. В результате вероятность рассеяния электронов на ионах $\text{Fe}(3+)$ возрастает, а подвижность μ падает.

Резюмируя все изложенное выше, необходимо подчеркнуть, что описанный метод расчета температурной зависимости подвижности, основанный на учете корреляционного и сплавного рассеяния электронов и на использовании приближения «мягких» сфер, позволил вполне удовлетворительно количественно объяснить аномалию температурной зависимости подвижности электронов в кристаллах HgSe , легированных железом. Рассмотрение системы заряженных доноров $\text{Fe}(3+)$ при высоких концентрациях железа как жидкости, в которой образуется ближний порядок, дало возможность количественно описать не только температурные зависимости подвижных электронов, но и аномалии других кинетических коэффициентов в зависимости как от концентрации железа, так и от температуры.

Список литературы

- [1] Пидильковский И.М. УФН **162**, 2, 63 (1992).
- [2] Пидильковский И.М., Кулеев И.Г., Ляпилин И.И. ЖЭТФ **102**, 326 (1992).
- [3] Кулеев И.Г., Ляпилин И.И., Пидильковский И.М. ЖЭТФ **103**, 4, 1447. (1993).
- [4] Wilamowski Z., Swiatek K., Dietl T., Kossut J. Solid. State Commun. **74**, 8, 883 (1990).
- [5] Кулеев И.Г., Ляпилин И.И., Пидильковский И.М. ЖЭТФ **102**, 5(11), 1652 (1992).
- [6] Займан Дж. Модели беспорядка. М. (1982). С. 592.
- [7] Физика простых жидкостей. Сб. перевод. статей / Под ред. Д.Н. Зубарева, Н.М. Плакиды М. (1971).
- [8] Protarapas P., Parlee N. 1974. High Temper Science **6**, 1, 1 (1974).
- [9] Кулеев И.Г., Ляпилин И.И., Пидильковский И.М. ЖЭТФ **106**, 4(10), 1205 (1994).
- [10] Кулеев И.Г., Ляпилин И.И., Леринман Н.К., Сабирзянова Л.Д., Пидильковский И.М. ФТП **27**, 3, 519 (1993).