

Влияние температуры на пространственные корреляции примесных ионов в HgSe:Fe

© В.М. Михеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: mikheev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 11 марта 2001 г.)

Корреляции в расположении ионов железа описываются парной корреляционной функцией, вычисленной в модели жестких сфер. Влияние температуры учтено путем замены радиуса корреляционной сферы на его термодинамическое среднее. Процедура термодинамического осреднения проведена с помощью подхода Эйнштейна. Вычислены температурные зависимости подвижности электронов при рассеянии на коррелированном распределении ионов железа. Проведено сравнение с экспериментом.

В HgSe:Fe резонансный уровень железа расположен в зоне проводимости, а сами атомы железа являются донорами, каждый из которых отдает один электрон в зону. При некоторой критической концентрации железа $n_c \simeq 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ уровень Ферми электронов проводимости сравнивается с резонансным уровнем. При концентрации атомов железа, меньшей критического значения, все атомы железа ионизованы. Будем считать, что атомы железа расположены в пространстве случайным образом. Поэтому при $n_{\text{Fe}} < n_c$ ионы железа также расположены в пространстве случайным образом. Если же концентрация атомов железа больше критической, то ионизована лишь часть атомов железа, а концентрация ионов железа $n_{\text{Fe}}^+ = n_c$. Поэтому даже при случайном распределении атомов железа пространственное распределение примесных ионов является коррелированным. Оно оказывается весьма специфичным, поскольку существенно зависит от наличия свободных мест, которыми являются нейтральные атомы железа. Влияние корреляций в распределении примесных ионов на подвижность электронов в HgSe:Fe широко изучалось в течение последнего десятилетия [1]. При низких температурах (в предельном случае $T = 0$) в работах, посвященных HgSe:Fe [1–4], эти специфические распределения примесных ионов рассчитывались в модели жестких сфер.

В области низких температур $0 \leq T \leq 50 \text{ K}$ HgSe:Fe наблюдается аномально большое уменьшение подвижности электронов с ростом температуры [1]. Поскольку в этом интервале температур степень вырождения электронного газа велика ($\varepsilon_F \approx 210 \text{ meV}$), а рассеяние электронов на фононах мало по сравнению с примесным рассеянием, эту аномалию объясняют ослаблением корреляции в расположении ионов железа с ростом температуры. В работе [5] авторы изучали аномалии температурной зависимости подвижности $\mu(T)$ в предположении, что ионы железа образуют вигнеровскую решетку. Авторы [6] вычислили температурные зависимости подвижности, используя для описания межионных корреляций функцию Майера. В обеих работах [5,6] для количественного описания наблюдаемой температурной зависимости $\mu(T)$ применялись подгоночные параметры.

В настоящей работе предлагается регулярная процедура вычисления температурных зависимостей парных корреляционных функций, описывающих пространственное распределение ионов железа. При этом в отличие от авторов [5,6] мы не привлекали дополнительно новых модельных представлений, ограничив себя моделями, которые использовались при вычислении пространственных корреляций ионов железа при $T = 0$ [3].

1. Энергия корреляции в расположении ионов железа

При $T = 0$ ионы железа принимают конфигурацию, в которой энергия кулоновского отталкивания минимальна. При температуре решетки, отличной от нуля, реализуются все возможные конфигурации, которые могут принять ионы железа. Определим энергию корреляции для заданной конфигурации ионов как разность между энергией взаимодействия ионов в данной конфигурации и энергией взаимодействия ионов, расположенных в пространстве случайным образом. Вероятность найти систему ионов в заданной конфигурации зависит от соответствующей этой конфигурации энергии корреляции. Поэтому прежде всего необходимо оценить энергию корреляции в заданной конфигурации примесных ионов.

Пусть n_{Fe}^+ — концентрация ионов железа (для простоты положим объем кристалла $V = 1$). Тогда энергия взаимодействия ионов равна

$$E_{ii} = \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i \neq j} V(r_{ij}), \quad (1)$$

где $V(r_{ij})$ — энергия взаимодействия двух ионов. Будем описывать взаимодействие между ионами потенциалом, вычисленным в модели Томаса–Ферми:

$$V(r) = \frac{e^2}{\kappa r} \exp\left(-\frac{r}{r_{TF}}\right),$$

где $r_{TF}^{-2} = 6\pi n_e e^2 / \kappa \varepsilon_F$. Для HgSe:Fe диэлектрическая проницаемость $\kappa = 20$, концентрация электронов

$n_e = n_c \simeq 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (при $n_{\text{Fe}} > n_c$), $\varepsilon_F \approx 210 \text{ meV}$, а $r_{TF} = 5.8 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$. Среднее значение энергии взаимодействия ионов $\langle E_{ii} \rangle$ вычислим по формуле [7]

$$\begin{aligned} \langle E_{ii} \rangle &= \left\langle \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \int dr_1 dr_2 n(r_1) n(r_2) V(r_{12}) g(r_1, r_2), \end{aligned} \quad (2)$$

где $g(r_1, r_2)$ — парная корреляционная функция, описывающая распределение частиц в пространстве. Для однородного и изотропного распределения ионов железа в пространстве формула (2) принимает вид

$$\langle E_{ii} \rangle = 2\pi n_{\text{Fe}}^+ \int_0^\infty r^2 dr V(r) g(r). \quad (3)$$

Энергия корреляции в расположении ионов железа E_c определяется разностью

$$E_c = \langle E_{ii} \rangle - \langle E_{ii}^h \rangle, \quad (4)$$

где $\langle E_{ii} \rangle$ — средняя энергия взаимодействия ионов железа, распределение которых описывается корреляционной функцией $g(r)$, а $\langle E_{ii}^h \rangle$ — средняя энергия взаимодействия ионов железа, расположенных в пространстве случайным образом ($g^h(r) = 1$). Подставляя (3) в формулу (4), получим выражение для энергии корреляции в расположении ионов, приходящейся на один ион, ε_c

$$E_c = n_{\text{Fe}}^+ \varepsilon_c = 2\pi n_{\text{Fe}}^+ \int_0^\infty r^2 dr V(r) [g(r) - 1]. \quad (5)$$

Энергия корреляции ионов железа в HgSe:Fe вычислялась в работах [8] и [9]. В [8] энергия корреляции определялась по формуле (5). Автора [9] почему-то не удовлетворило стандартное выражение для энергии корреляции (5), и он предложил свою достаточно фантастичную формулу (формула (9) работы [9])

$$U(R_i) = \sum_{i \neq j} V(R_{ij}) (g(R_{ij}) - 1).$$

Здесь $U(R_i)$ — корреляционный потенциал, а $V(R_{ij})$ — потенциал, создаваемый j -м ионом Fe^{3+} в точке R_i .

Корреляции в распределении ионов железа возникают при достаточно высоком легировании, когда $n_{\text{Fe}} > n_c$. В этом случае концентрация ионов железа n_{Fe}^+ фиксирована и равна критической концентрации n_c . При этом конфигурация, которую принимает система ионов, описывается корреляционной функцией $g(r)$. В модели жестких сфер корреляционная функция зависит от двух параметров: концентрации ионов железа и диаметра жесткой сферы, который отождествляется с минимальным расстоянием между ионами железа r_c . Поэтому

при фиксированной концентрации ионов железа конфигурация, которую принимает система ионов железа, однозначно определяется значением параметра r_c , а энергия корреляции является однозначной функцией этого параметра $\varepsilon_c(r_c)$. Само значение параметра r_c зависит от соотношения между концентрациями ионов железа и атомов железа [1–3]. В работе [3] мы получили уравнение, связывающее параметр r_c с отношением концентраций $n_{\text{Fe}}^+/n_{\text{Fe}}$, используя методы статистической физики:

$$\begin{aligned} n_{\text{Fe}}^+ &= n_{\text{Fe}} W(n_{\text{Fe}}^+, r_c, r_1), \\ W(n_{\text{Fe}}^+, r_c, r_1) &= \left(1 - \left(\frac{r_c}{r_1} \right)^3 \right)^a, \end{aligned} \quad (6)$$

где $W(n_{\text{Fe}}^+, r_c, r_1)$ — вероятность найти атом железа на расстоянии, большем r_c , от ближайшего иона железа, параметр $a = 4\pi r_1^3 n_{\text{Fe}}^+ / 3 = 5.92$ (r_1 — радиус первой корреляционной сферы для ГЦК-решетки).

Существуют стандартные вычислительные методы, с помощью которых парная корреляционная функция может быть рассчитана в модели жестких сфер с требуемой точностью [7]. В работах польских авторов [2] пространственное распределение ионов железа описывалось корреляционной функцией, при вычислении которой ограничили нулевым членом разложения по плотности, соответствующим первому вириальному коэффициенту,

$$g(r_c, r) = \begin{cases} 0, & r < r_c, \\ 1, & r \geq r_c. \end{cases} \quad (7)$$

В [8] энергия корреляции ε_c была вычислена по формуле (5) с помощью корреляционной функции (7). Результаты расчета представлены на рис. 1 кривой 1 (при расчетах использованы параметры $\varepsilon_F = 210 \text{ meV}$, $\kappa = 20$, $n_{\text{Fe}}^+ = n_e = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). В работе автора [3] использовалась парная корреляционная функция $g(r_c, r)$, вычисленная с учетом первого члена в разложении по плотности, который соответствует второму вириальному коэффициенту [7],

$$\begin{aligned} g(r_c, r) &= \begin{cases} 0, & r < r_c, \\ 1 + 8\eta \left[1 - \frac{3r}{4r_c} + \frac{1}{16} \left(\frac{r}{r_c} \right)^3 \right], & r_c \leq r \leq 2r_c, \\ 1, & 2r_c < r. \end{cases} \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь $\eta = \pi r_c^3 n_{\text{Fe}}^+ / 6$ — коэффициент упаковки. Энергия корреляции ε_c , вычисленная по формуле (5) с помощью корреляционной функции (8), представлена на рис. 1 кривой 2. В работе [9] для вычисления энергии корреляции использовалась корреляционная функция, полученная в приближении Перкуса–Йевики [7]. Результаты расчетов, воспроизведенные с помощью этой корреляционной функции, представлены на рис. 1 кривой 3. Результаты всех расчетов практически совпадают

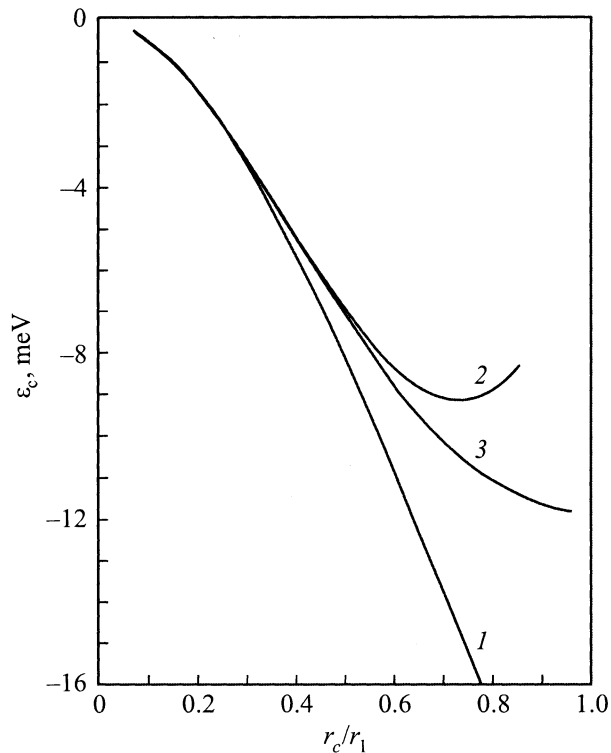


Рис. 1. Зависимость энергии корреляции от корреляционного радиуса. 1 — для корреляционной функции (7), 2 — для корреляционной функции (8), 3 — для корреляционной функции в приближении Перкуса–Йевики.

в интервале изменения радиуса корреляционной сферы $0 < r_c/r_1 < 0.5$. Согласно формуле (6), связывающей радиус корреляционной сферы r_c с концентрацией железа n_{Fe} , эти значения r_c соответствуют концентрации железа в интервале $4.5 \cdot 10^{18} < n_{\text{Fe}} < 10^{19} \text{ см}^{-3}$. В экспериментах [1,2] наблюдается рост электронной подвижности с увеличением концентрации железа в образцах HgSe:Fe с содержанием железа $4.5 \cdot 10^{18} \leq n_{\text{Fe}} \leq 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Согласно формуле (6), этим концентрациям железа соответствует интервал $0 \leq r_c/r_1 \leq 0.6$. В этом интервале изменения r_c приближение (7) для корреляционной функции является слишком грубым и приводит к завышенным значениям энергии корреляции. Из рис. 1 следует, что в интервале изменения концентрации железа, существенном в экспериментах, результаты расчетов энергии корреляции с корреляционной функцией (8) и с корреляционной функцией, полученной в приближении Перкуса–Йевики, практически совпадают. При больших концентрациях железа результаты расчетов начинают расходиться, однако, согласно оценкам [3], применение модели жестких сфер в этом случае становится проблематичным. Поэтому в наших расчетах мы ограничились тем существенным для эксперимента интервалом изменения концентрации железа, в котором расчеты с парной корреляционной функцией (8) представляют достаточно надежную оценку.

2. Вычисление средних значений физических величин

Парная корреляционная функция $g(r_c, r)$ зависит от единственного параметра r_c , изменяя значения которого, мы задаем конфигурацию ионов железа. Напомним, что по определению r_c есть минимальное расстояние между ионами железа (для случайного распределения ионов параметр $r_c = 0$). При $T = 0$ реализуется единственная конфигурация, соответствующая значению параметра r_c , которое вычисляется с помощью уравнения (6). При конечной температуре реализуются все конфигурации ионов, соответствующие всем возможным значениям корреляционного радиуса из интервала значений $0 < r_c^T < r_c$. При этом среднее значение корреляционного радиуса $\langle r_c^T \rangle = r_c(T)$ является функцией температуры.

Будем описывать корреляции в системе ионов железа при отличной от нуля температуре с помощью парной корреляционной функции, вычисленной в модели жестких сфер, $g(r_c(T), r)$, в которой корреляционный радиус r_c заменили на его среднее значение $\langle r_c^T \rangle = r_c(T)$. Этот метод широко применяется при изучении равновесных жидкостей и расплавов в модели жестких сфер (см. ссылки в [10]). В расплавах при вычислении температурных зависимостей диаметр жесткой сферы r_c заменяют на его равновесное значение $r_c(T)$, которое вычисляется путем минимизации свободной энергии системы.

В отличие от жидкости и расплава системы примесных ионов в полупроводниках, как правило, неравновесны. Образцы изготавливаются при высоких температурах ($T \approx 1000 \text{ К}$). При столь высоких температурах примеси ионизованы, а распределение ионов близко к случайному. С понижением температуры примесные ионы фиксируются, т.е. их пространственное распределение "замораживается". Это "замороженное" распределение мы описываем как случайное парной корреляционной функцией $g^h(r) = 1$. При низких температурах это "замороженное" случайное распределение взаимодействующих ионов неравновесно. Следует различать два случая: а) все примесные центры ионизованы; б) часть примесных центров ионизована, а часть нейтральна. В случае полной ионизации примесные ионы расположены в пространстве случайным образом. В случае частичной ионизации примесных центров благодаря наличию свободных мест (нейтральных примесей) примесные ионы перераспределяются в пространстве и их установившееся распределение окажется коррелированным. В том случае, когда доля самих ионов достаточно мала, а свободных мест много, устанавливается равновесное распределение.

В HgSe:Fe при концентрации железа $n_{\text{Fe}} > n_c$ концентрация ионов железа фиксирована ($n_{\text{Fe}}^+ = n_c \approx 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$), а наличие свободных мест приводит к корреляции в пространственном распределении ионов железа. Существо дела легко понять из рис. 1. С ростом концентрации железа увеличивается число свободных мест и происходит перераспределение ионов железа. При

этом, согласно уравнению (6), растет значение параметра r_c/r_1 , а вместе с ним увеличивается по модулю значение энергии корреляции ε_c . Все расчетные кривые (1–3), представленные на рис. 1, демонстрируют убывание энергии корреляции в экспериментально значимой области изменения параметра r_c/r_1 . Ход кривых во всей области изменения параметра $0 < r_c/r_1 < 1$ носит чисто иллюстративный характер и указывает на две возможности. Либо при некоторой концентрации железа $n_{\text{Fe}} = n_m$ энергия корреляции достигает экстремального значения, которое соответствует минимуму свободной энергии. Тогда этой концентрации железа отвечает некое равновесное коррелированное распределение примесных центров (кривая 2). Либо энергия корреляции монотонно убывает вплоть до значения параметра $r_c/r_1 = 1$, при котором равновесное состояние системы ионов железа соответствует вигнеровскому кристаллу (кривая 3). Элементарная модель, в рамках которой производятся расчеты, не позволяет нам сделать выбор при рассмотрении этих альтернатив. Но все варианты расчетов, представленные на рис. 1, свидетельствуют о том, что в существенном для эксперимента интервале изменения параметра r_c/r_1 энергия корреляции есть монотонно убывающая функция параметра r_c/r_1 (а следовательно, и концентрации железа), а сама система ионов железа неравновесна.

Поэтому в интересующем нас случае неравновесного распределения ионов железа в отличие от случая равновесных жидкостей и расплавов для нахождения установившегося значения $r_c(T)$ невозможно провести процедуру минимизации свободной энергии. В настоящей работе установившееся значение радиуса корреляционной сферы $r_c(T)$ мы отождествили с его термодинамическим средним.

При осреднении корреляционного радиуса будем придерживаться подхода Эйнштейна [11], который при описании неравновесных систем опирался на обобщенный принцип Больцмана. В качестве исходного выражения используется известная формула Больцмана

$$S = k_B \ln \Gamma,$$

где S — энтропия изолированной макросистемы в состоянии термодинамического равновесия, а Γ — ее статистический вес. Согласно концепции Эйнштейна, вероятность неравновесного макроскопического состояния полной системы ("термостат + изучаемая подсистема") описывается формулой

$$W \propto \exp\left(\frac{1}{k_B} S_h\right),$$

где S_h — энтропия полной системы. В широко известном курсе теоретической физики Ландау и Лифшица подход Эйнштейна используется при описании флуктуаций [12]. При дальнейшем изложении теории будем следовать монографии [12]. (Сравнительное описание подхода

Эйнштейна и подхода Гиббса, а также современное состояние проблемы детально обсуждаются в обзоре [13]).

Пусть система, состоящая из n_{Fe}^+ ионов железа, находится в равновесии с термостатом при температуре T . Тогда вероятность найти эту систему в конфигурации, соответствующей значению радиуса корреляции r_c^T ,

$$W(r_c) \propto \exp\left(-\frac{\Delta E - T\Delta S + P\Delta V}{T}\right),$$

где $\Delta E, \Delta S, \Delta V$ — изменение энергии, энтропии и объема в системе ионов при изменении корреляционного радиуса от нуля до заданного значения r_c^T , а P и T — давление и температура "среды" [12]. Объем, занимаемый ионами железа, совпадает с объемом, который занимают атомы железа, и не меняется при упорядочении ионов. Поэтому $\Delta V = 0$. Поскольку все величины, не зависящие от параметра r_c^T и стоящие в экспоненте, сократятся при нормировании выражения для вероятности W , получим

$$W(r_c^T) \propto \exp\left(-\frac{E_c - TS(r_c^T)}{T}\right), \quad (9)$$

где E_c — энергия корреляции системы ионов железа, а $S(r_c^T)$ — та часть энтропии, которая зависит от параметра r_c^T .

В случае однородного и изотропного распределения ионов энергия корреляции $E_c = n_{\text{Fe}}^+ \varepsilon_c$ определяется по формуле (5). Часть энтропии системы ионов железа, зависящая от параметра r_c , имеет вид

$$S(r_c^T) = n_{\text{Fe}}^+ \ln W(n_{\text{Fe}}^+, r_c^T, r_1), \quad (10)$$

где вероятность $W(n_{\text{Fe}}^+, r_c^T, r_1)$ вычисляется по формуле (6). При подстановке формул для энергии корреляции и энтропии в (9) в выражение для вероятности $W(r_c^T)$ факторизуется

$$W(r_c^T) = \prod_1^{n_{\text{Fe}}^+} W_0(r_c^T).$$

Здесь $W_0(r_c^T)$ — вероятность того, что при температуре T выделенный ион железа расположен на расстоянии, большем r_c^T , от ближайшего соседа,

$$W_0(r_c^T) = W(n_{\text{Fe}}^+, r_c^T, r_1) \exp\left(-\frac{\varepsilon_c}{T}\right). \quad (11)$$

Формула (11) позволяет произвести термодинамическое осреднение параметра r_c^T

$$\langle r_c^T \rangle = r_c(T) = \frac{\int_0^{r_c} x W_0(x) dx}{\int_0^{r_c} W_0(x) dx}. \quad (12)$$

Используя формулы (5), (6), (8), (11), (12), мы вычислили зависимость радиуса корреляции $r_c(T)$ от температуры для образцов HgSe:Fe с концентрациями

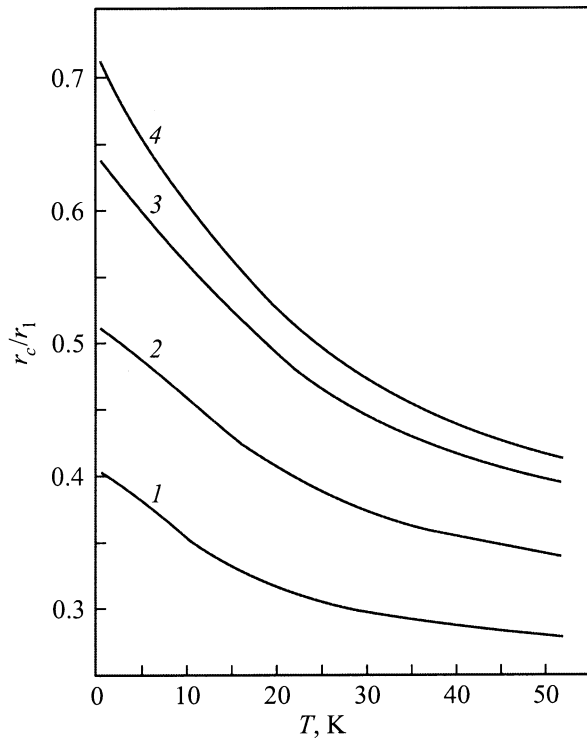


Рис. 2. Зависимость корреляционного радиуса от температуры в образцах HgSe:Fe с различной концентрацией железа. n_{Fe} , 10^{18} cm^{-3} : 1 — 7, 2 — 11, 3 — 29, 4 — 85.

железа от $n_{\text{Fe}} = 7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 1 на рис. 2) до $n_{\text{Fe}} = 8.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 4 на рис. 2). Как видно из рис. 2, при изменении температуры в интервале $0 < T < 50 \text{ K}$ среднее значение радиуса корреляции $r_c(T)$ уменьшается на 30–40%. Таким образом, в распределении ионов железа, которое мы описываем парной корреляционной функцией $g(r_c(T), r)$, пространственные корреляции ослабевают с ростом температуры.

3. Влияние температуры на подвижность электронов

Мы вычислили подвижность при отличной от нуля температуре теми же методами и с помощью той же корреляционной функции, что и при $T = 0$ [3]. Единственное отличие от вычислений, проведенных в работе [3], заключается в том, что мы заменили в корреляционной функции параметр r_c на термодинамическое среднее $r_c(T)$, вычисленное по формулам (5), (6), (8), (11), (12). Напомним расчетную схему, по которой вычисляется подвижность электронов μ [1–3]. Дифференциальное сечение рассеяния электрона $\sigma(\mathbf{q})$ (\mathbf{q} — вектор рассеяния) выражается через сечение рассеяния на отдельном центре $\sigma_0(\mathbf{q})$

$$\sigma(\mathbf{q}) = \sigma_0(\mathbf{q})S(\mathbf{q}). \quad (13)$$

Структурный фактор $S(\mathbf{q})$ в свою очередь связан с Фурье-образом парной корреляционной функции, описывающей пространственное распределение рассеивателей,

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n_{\text{Fe}}^+ \int [g(r_c(T), r) - 1] \exp(iqr) dr. \quad (14)$$

В модели Томаса–Ферми при рассеянии на случайном распределении примесных ионов подвижность электронов μ_0^+ описывается формулой Брукса–Херринга [14]. Отношение подвижности электронов при рассеянии на пространственно коррелированном распределении ионов μ^+ к подвижности при рассеянии на случайном распределении ионов μ_0^+ в соответствии с (13) может быть записано в виде [3]

$$\frac{\mu^+}{\mu_0^+} = \int_0^{2k_F} \frac{q^3 dq}{[q^2 + r_{TF}^{-2}]^2} / \int_0^{2k_F} \frac{S(\mathbf{q})q^3 dq}{[q^2 + r_{TF}^{-2}]^2}. \quad (15)$$

Используя формулы (5), (6), (8), (11), (12), (14), (15), мы вычислили зависимость подвижности электронов μ^+ от температуры для образцов HgSe:Fe с различным содержанием железа.

На рис. 3 представлены зависимости подвижности μ^+/μ_0^+ от температуры для образцов с концентрациями железа от $n_{\text{Fe}} = 7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 1) до $n_{\text{Fe}} = 8.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 4). Расчеты, представленные на рис. 3, показывают, что ослабление корре-

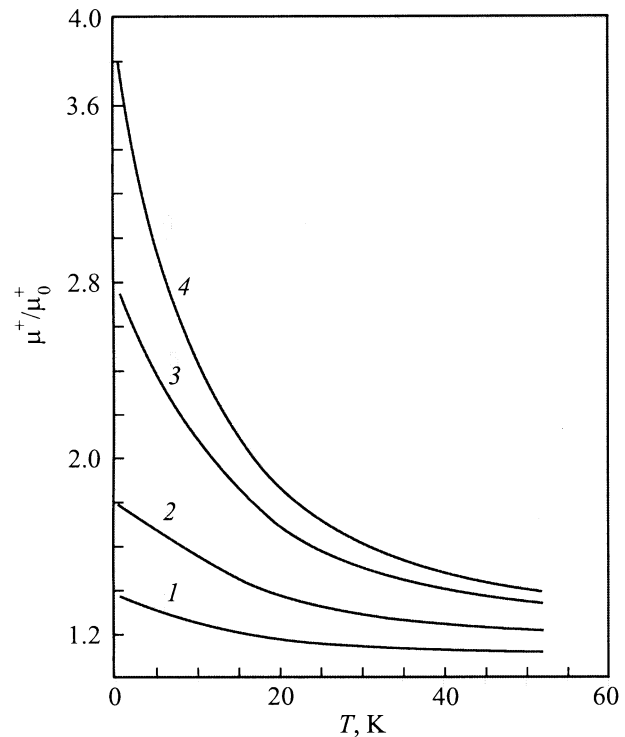


Рис. 3. Зависимость подвижности электронов при рассеянии на ионах железа μ^+ от температуры в образцах HgSe:Fe с различной концентрацией железа. Обозначение кривых то же, что и на рис. 2.

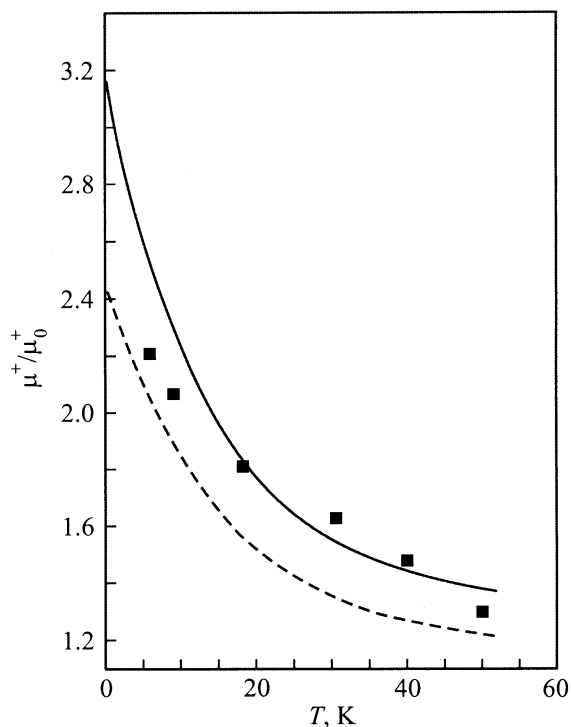


Рис. 4. Зависимость подвижности электронов от температуры в образце $\text{Hg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Se}$ с $x = 0.003$ ($n_{\text{Fe}} = 4.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Сплошная кривая — рассеяние на ионах железа, штриховая кривая — рассеяние на ионах и нейтральных атомах железа. Экспериментальные точки — данные [15].

ляций в расположении рассеивателей с ростом температуры приводит к существенному уменьшению подвижности вырожденных электронов в интервале температур $0 < T < 20$ К, при которых рассеяние электронов на фононах пренебрежимо мало. Величина эффекта зависит от степени корреляции в расположении рассеивателей при $T = 0$. Концентрации железа $n_{\text{Fe}} = 8.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 4) при $T = 0$ соответствует коэффициент упаковки $\eta(0) = 0.29$, а уменьшение подвижности составляет 50%. В случае $n_{\text{Fe}} = 7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (кривая 1) $\eta(0) = 0.05$, а уменьшение подвижности составляет 15%.

На рис. 4 представлена зависимость подвижности электронов от температуры для образца $\text{Hg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Se}$ с концентрацией железа $x = 0.003$ ($n_{\text{Fe}} = 4.5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Экспериментальные точки взяты из работы [15]. Значение подвижности μ_0^+ при рассеянии на случайном распределении ионов мы отождествляли с экспериментальным значением подвижности в образце с $n_{\text{Fe}} = n_c = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Согласно работе [15], $\mu_0^+ = 3.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$. Расчетная зависимость подвижности μ^+/μ_0^+ от температуры представлена на рис. 4 сплошной кривой. Штриховая кривая соответствует зависимости подвижности μ/μ_0^+ , вычисленной с учетом рассеяния электронов на нейтральных атомах железа

$$\mu^{-1} = \mu^{+-1} + \mu_0^{-1}. \quad (16)$$

Подвижность электронов, связанная с рассеянием на нейтральных атомах железа, вычислялась по формуле [4]

$$\mu_0 = A / (n_{\text{Fe}} - n_{\text{Fe}}^+), \quad (17)$$

где постоянная $A = 1.46 \cdot 10^{25} \text{ cm}^{-1} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$. Сравнение теоретических кривых с экспериментальными точками, проведенное на рис. 4, свидетельствует о вполне удовлетворительном согласии теории с экспериментом. Заметим, что в отличие от авторов [5,6] мы не использовали подгоночных параметров при вычислении температурной зависимости электронной подвижности.

Автор выражает благодарность Г.И. Харусу за детальное обсуждение работы.

Список литературы

- [1] Isaak M. Tsidilkovski. Elektron Spectrum of Gapless Semiconductors. Springer Series in Solid State Sciences. (1997). V. 116.
- [2] Z. Wilamowski, K. Swatek, T. Dietl, J. Kossut. Solid State Commun. **74**, 8, 833 (1990).
- [3] В.М. Михеев. ФТТ **41**, 11, 1994 (1999).
- [4] В.М. Михеев. ФТТ **43**, 3, 414 (2001).
- [5] Н.Н. Аблязов, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ **95**, 4, 1450 (1988).
- [6] И.М. Цидильковский, И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин. ЖЭТФ **102**, 7, 326 (1992).
- [7] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая методика. Мир, М. (1978). Т. 1. 405 с.
- [8] Z. Wilamowski. Acta Phys. Pol. **A77**, 1, 133 (1989).
- [9] И.Г. Кулеев. ФТТ **40**, 3, 425 (1998).
- [10] Е.И. Харьков, И.И. Лысов, И.Е. Федоров. Физика жидких металлов. Киев (1979). 247 с.
- [11] А. Эйнштейн. Избранные сочинения. Наука, М. (1966). Т. 3. 590 с.
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [13] Ю.Г. Рудой, А.Д. Суханов. УФН **170**, 12, 1265 (2000).
- [14] Ф. Блатт. Физика электронной проводимости в твердых телах. М. (1971). 470 с.
- [15] F.S. Pool, J. Kossut, U. Debska, R. Reifenberger. Phys. Rev. **B35**, 8, 3900 (1987).