КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ПОЛЯРОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ВЫРОЖДЕННЫМ КРАЕМ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ

Гифейсман Ш. Н., Коропчану В. П.

В полупроводниковых соединениях $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^{V}$ с вырожденным потолком валентной зоны Γ_8 вследствие частично ионного характера химической связи при построении теории свободных и связанных носителей необходимо учитывать взаимодействие с продольными оптическими фононами — поляронный эффект. При этом важную роль играют такие параметры теории, как радиус состояния полярона и среднее число виртуальных оптических фононов в поле, возникающем вблизи медленно движущегося носителя при $T=0$. В настоящей работе эти поляронные параметры рассчитываются в случае вырожденных зон.

Если $\rho(\mathbf{r}')$ — среднее значение плотности поляризационных зарядов в случае, когда носитель помещен в начало координат, то радиус состояния полярона можно определить соотношением [1]

$$\frac{1}{R}=\int\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}'|}d\tau'\Big/\int\rho(\mathbf{r}')\,d\tau'\,. \tag{1}$$

Для соединений $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^{V}$ характерна слабая поляронная связь (константа связи $\alpha \ll 1$), т. е. электрон-фононное взаимодействие в этих кристаллах есть плавная функция координат. Поэтому задача о взаимодействии с оптическими фононами может быть рассмотрена в рамках континуальной модели и приближении метода эффективной массы, так что в базисе вырожденного состояния Γ_8 оператор дырочно-фононного взаимодействия имеет диагональный вид [2]

$$\hat{\mathrm{H}}_{\text{опт}}=\sum_{\mathbf{q}}\left(V_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{q}}e^{i(\mathbf{qr})}+V_{\mathbf{q}}^{*}\hat{a}_{\mathbf{q}}^{+}e^{-i(\mathbf{qr})}\right)1\,. \tag{2}$$

Здесь $\mathbf{q}$ — волновой вектор продольных оптических колебаний, $\hat{a}_{\mathbf{q}}^{+}$ и $\hat{a}_{\mathbf{q}}$ — соответственно операторы порождения и уничтожения фононов, $V_{\mathbf{q}}$ — коэффициенты связи континуальной теории поляронов:

$$V_{\mathbf{q}}=\frac{ie}{q}\left(\frac{2\pi c\hbar\omega}{L^3}\right)^{1/2},\quad c=\frac{1}{\varepsilon_\infty}-\frac{1}{\varepsilon_0}, \tag{3}$$

где ω — предельная частота продольных оптических колебаний, ε_∞ и ε_0 — соответственно высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости кристалла, L^3 — нормировочный объем.

В нулевом приближении волновые функции дырочно-колебательной системы представляют собой произведение плавных волновых функций метода эффективной массы [3]

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{k}) = \frac{e^{i(\mathbf{kr})}}{L^{3/2}} \left\| \begin{matrix} S_{1i} \\ S_{2i} \\ S_{3i} \\ S_{4i} \end{matrix} \right\| \tag{4}$$

на волновые функции свободных фононов $\prod_{\mathbf{q}j} | n_{\mathbf{q}j} \rangle$.

Функции (4) при $i = 1$, 4 описывают состояния тяжелых дырок, а при $i = 2$, 3 — легких. Унитарная матрица $\mathbf{S}$ диагонализует сферически симметричный матричный (4×4 для зоны Γ_8) гамильтониан, описывающий спектр энергии дырок. Явный вид этой матрицы приведен в [2].

В первом порядке теории возмущений по оператору дырочно-фононного взаимодействи (2) волновая функция дырочно-колебательной системы при T=0 записывается в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{\Psi}_i(\mathbf{k}) &= \mathbf{S}_i(\mathbf{k})\, e^{i(\mathbf{kr})} \,|0\rangle + \\ &+ \sum_{j,\mathbf{q}} \frac{V^*_{\mathbf{q}}(\mathbf{S}^+_j(\mathbf{k}-\mathbf{q}),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))}{\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}} - (\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega)} \mathbf{S}_j(\mathbf{k}-\mathbf{q})\, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q},\mathbf{r})} \,|1_{\mathbf{q}}\rangle . \end{aligned} \tag{5}$$

Средняя плотность поляризационных зарядов из (1), индуцируемая дыркой с координатой $\mathbf{r}$, определяется из уравнения Пуассона. Входящий в это уравнение потенциал электрического поля получается усреднением оператора (2) на волновых функциях (5), поскольку взаимодействие (2) определяет потенциальную энергию дырки в поле поляризационных зарядов [4]. Имеем

$$\rho_i(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{c\hbar\omega e}{2L^3} \sum_{j,\mathbf{q}} \frac{|(\mathbf{S}^+_j(\mathbf{k}-\mathbf{q}),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))|^2}{\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}} - (\varepsilon^{(j)}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega)} [e^{i(\mathbf{q},\mathbf{r}'-\mathbf{r})} + \text{c. c.}], \tag{6}$$

при этом полный заряд

$$Q = -ce\hbar\omega \sum_j \frac{|(\mathbf{S}^+_j(\mathbf{k}),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))|^2}{\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}} - (\varepsilon^{(j)}_{\mathbf{k}} + \hbar\omega)} = ce \tag{7}$$

представляет собой ионный заряд, индуцированный на внутренней поверхности диэлектрической среды, окружающей точечный заряд e.

Для радиуса состояния полярона получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{R_i} &= \frac{1}{Q} \int \frac{\rho_i(\mathbf{r}')}{r'} d\tau' = \\ &= -\frac{4\pi\hbar\omega}{L^3} \sum_{j,\mathbf{q}} \frac{|(\mathbf{S}^+_j(\mathbf{k}-\mathbf{q}),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))|^2}{\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}} - (\varepsilon^{(j)}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega)} \frac{1}{q} \int_0^\infty \sin qr dr . \end{aligned} \tag{8}$$

Выражение (8) следует, очевидно, просуммировать по компонентам крамерсова дублета конечного состояния и усреднить по таковым для начального. В результате в выражения для радиусов состояний поляронов с тяжелой и легкой дырками R_h и R_l входят коэффициенты

$$K_{hh} = \sum_{i,j=1,4} |(\mathbf{S}_j(\mathbf{k}'),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))|^2 = \frac{1}{2}\left[1 + 3\frac{(\mathbf{k},\mathbf{k}')^2}{k^2k'^2}\right], \tag{9}$$

$$K_{ll} = K_{hh}, \quad K_{hl} = K_{lh} = \frac{3}{2}\left[1 - \frac{(\mathbf{k},\mathbf{k}')^2}{k^2k'^2}\right]. \tag{10}$$

Так, например,

$$\frac{1}{R_h} = -\frac{2\pi\hbar\omega}{L^3}\times$$
$$\times \sum_{\mathbf{q}}\left\{\frac{K_{hh}}{\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2\mu_h} - \frac{\hbar^2}{2\mu_h}(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2 - \hbar\omega} + \frac{K_{hl}}{\frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2\mu_h} - \frac{\hbar^2}{2\mu_l}(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2 - \hbar\omega}\right\}\times$$
$$\times\frac{1}{q}\int_0^\infty \sin qr dr, \tag{11}$$

где μ_h и μ_l — соответственно эффективные массы тяжелых и легких дырок.

Формулы (9) и (10) являются частным случаем более общей формулы (32.58) из [3], полученной с учетом гофрировки изоэнергетических поверхностей.

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением медленных дырок при T=0, для которых $\varepsilon_{\mathbf{k}} < \hbar\omega$, и будем пренебрегать в знаменателе формулы (8) членами, содержащими k. После вычисления интегралов находим окончательно

$$R_h = R_l = \left(\sqrt{\frac{\mu_h\omega}{2\hbar}} + \sqrt{\frac{\mu_l\omega}{2\hbar}}\right)^{-1}. \tag{12}$$

В отсутствие вырождения, когда $\mu_h = \mu_l = \mu$, радиус состояния полярона $R = (\hbar/2\mu\omega)^{1/2}$, что совпадает со значением, полученным в [4].

Теперь вычислим среднее число фононов, окружающих дырку. Оно определяется выражением

$$N = \left\langle\Psi\left|\sum_{\mathbf{q}}\hat{a}^+_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{q}}\right|\Psi\right\rangle, \tag{13}$$

в котором $\sum_{\mathbf{q}}\hat{a}^+_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{q}}$ есть оператор полного числа фононов. Выполняя усреднение на волновых функциях (5), получаем

$$N_i = \sum_{i,\mathbf{q}}\frac{|V_{\mathbf{q}}|^2\,|(\mathbf{S}^+_j(\mathbf{k}-\mathbf{q}),\ \mathbf{S}_i(\mathbf{k}))|^2}{[\varepsilon^{(i)}_{\mathbf{k}} - (\varepsilon^{(j)}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega)]^2}. \tag{14}$$

Выражение (14) также надлежит просуммировать по компонентам крамерсова дублета конечного состояния и усреднить по таковым для начального. Вычисляя интегралы, находим

$$N = \frac{\alpha_h + \alpha_l}{4}, \tag{15}$$

где

$$\alpha_{h(l)} = c\left(\frac{\mu_{h(l)}e^4}{2\hbar^3\omega}\right)^{1/2} \tag{16}$$

— соответственно константы связи теории поляронов для тяжелых и легких дырок.

При $\mu_h=\mu_l=\mu$ $N=\alpha/2$, что совпадает с результатом, полученным в [4]. Параметр $\alpha_p=(\alpha_h+\alpha_l)/2$ в случае вырожденной зоны Γ_8 определяет (в единицах $\hbar\omega$) сдвиг уровня энергии основного состояния полярона слабой связи [5–7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Fedyanin V. K., Rodriguez C. // Physica. 1982. V. 112 A. N 3. P. 615—630.
[2] Перлин Ю. Е., Гифейсман Ш. Н. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 5. С. 865—872.
[3] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
[4] Lee T. D., Low F. E., Pines D. // Phys. Rev. 1953. V. 90. N 2. P. 297—302.
[5] Trebin H.-R., Rosler U. // Phys. St. Sol. (b). 1975. V. 70. N 2. P. 717—726.
[6] Beni G., Rice T. M. // Phys. Rev. B. 1977. V. 15. N 2. P. 840—843.
[7] Перлин Ю. Е., Гифейсман Ш. Н., Коропчану В. П. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 8. С. 1463—1468.

Кишиневский государственный университет
им. В. И. Ленина

Получено 11.02.1991
Принято к печати 26.12.1991

ФТП, том 26, вып. 5, 1992

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЭКСТРАГИРОВАННОГО ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ

Савицкий А. В., Ткачук В. И., Ткачук П. Н.

Для решения ряда практических задач, например создания детекторов ионизирующего излучения, необходимы монокристаллы CdTe с низким уровнем остаточных примесей. Зонная очистка полупроводниковых соединений от быстро диффундирующих примесей не всегда эффективна вследствие диффузного выравнивания в твердой фазе [1]. В работе [2] показана возможность очистки монокристаллов CdS, ZnSe и ZnTe от примесей Cu и Ag методом экстракции в расплаве одного из компонентов соединения. Применительно к CdTe разработка метода экстракции в жидком кадмии и проверка его эффективности с использованием радиоактивных изотопов ^{64}Cu и ^{110}Ag проведены в [3]. Причем в работе отмечалось, что применение в качестве исходного материала образцов с большим содержанием примесей Cu и Ag ($\sim 10^{19}$ см$^{-3}$ и более) приводит к появлению в процессе экстракции дефектов неизвестной природы, которые слабо экстрагируются.

В данной работе показано влияние паро- и жидкофазной экстракции на электрические свойства специально не легированных монокристаллов CdTe. Монокристаллы n-CdTe с низким уровнем электрически активных фоновых примесей (см. таблицу, образец *1*) получали из расплава методом Бриджмена в контейнерах

Электрофизические параметры исходных и экстрагированных монокристаллов CdTe

№ образца	Метод термообработки	N_D, см$^{-3}$	N_A, см$^{-3}$	N_A/N_D	μ_n (300 K), см^2/В · с	E_D, эВ
1	—	$6.30\cdot10^{14}$	$2.4\cdot10^{14}$	0.38	950	0.013
2	Парофазный	$1.25\cdot10^{15}$	$1.0\cdot10^{15}$	0.79	750	0.012
3	»	$2.70\cdot10^{15}$	$2.4\cdot10^{15}$	0.89	70	0.010
4	Жидкофазный	$8.30\cdot10^{14}$	$5.0\cdot10^{13}$	0.06	1070	0.14

Примечание. Экстракция проводилась в контейнерах из оптического (образцы *2* и *4*) и обычного (образец *3*) кварца.