

# Поперечный эффект Нернста–Эттингсгаузена в кристаллах HgSe:Fe,Ga, содержащих примеси железа со смешанной валентностью

© И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, Г.Л. Штрапенин, И.Ю. Арапова

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

(Поступила в Редакцию 5 февраля 1997 г.)

Экспериментально и теоретически исследован поперечный эффект Нернста–Эттингсгаузена на образцах HgSe:Fe,Ga с различным содержанием примесей железа и галлия. Показано, что необычные зависимости величины и знака эффекта от содержания примесей галлия обусловлены их влиянием на степень пространственного упорядочения трехвалентных ионов железа и соответственно на характер рассеяния электронов проводимости. Результаты расчета качественно согласуются с экспериментальными данными.

В работах [1–3] проведено исследование явлений электронного переноса в кристаллах HgSe:Fe,Ga с различным содержанием примесей железа и галлия с целью определения влияния хаотически распределенных ионов Ga на корреляционные свойства примесей железа со смешанной валентностью  $Fe^{2+}-Fe^{3+}$  и на подвижность электронов. Такие исследования являются актуальными, поскольку кристаллы HgSe:Fe обычно содержат неконтролируемые собственные дефекты с концентрацией порядка  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ , которые обуславливают заметный разброс значений подвижности электронов в образцах с одинаковым содержанием примесей железа при гелиевых температурах [4]. В отличие от собственных дефектов концентрацию примесей галлия можно легко контролировать.

При малом содержании примесей железа и галлия, когда уровень Ферми расположен ниже донорного уровня железа, увеличение концентрации галлия приводит к росту вероятности рассеяния электронов. Трехвалентные ионы  $Fe^{3+}$  и  $Ga^{3+}$  вносят аддитивный вклад в релаксацию электронного импульса, и правило Маттиссена выполняется. Однако характер электронного рассеяния в HgSe:Fe,Ga резко меняется, когда суммарная концентрация ионов железа и галлия превышает значение  $N^* = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , и на уровне Ферми образуется состояние со смешанной валентностью (ССВ). В работах [1–3] показано, что в этом случае в электрон-примесном рассеянии возникают три новых эффекта по сравнению с рассеянием на хаотической совокупности ионов (ХСИ). Во-первых, для фиксированного значения  $N_{Fe}$  увеличение концентрации галлия  $N_{Ga} = N_{2+}$  приводит к уменьшению концентрации заряженных ионов  $N(Fe^{3+}) = N_{1+} = N_+ - N_{2+}$  и росту концентрации нейтральных в решетке ионов железа  $N(Fe^{2+}) = N_0 = N(Fe) - N_{1+}$ , поскольку в условиях ССВ полная концентрация заряженных центров  $N_+ = N_{1+} + N_{2+} = n_e$  остается постоянной. Изменение соотношения между концентрациями  $N_0$  и  $N_{1+}$  приводит к изменению степени порядка в коррелированной системе ионов (КСИ)  $Fe^{3+}$ . При  $N_0 < N_{1+}$  степень

пространственного упорядочения КСИ  $Fe^{3+}$  возрастает при увеличении содержания примесей галлия, а вероятность рассеяния электронов на ионах  $Fe^{3+}$  уменьшается. Во-вторых, система ионов железа  $Fe^{2+}-Fe^{3+}$  со смешанной валентностью существенно ослабляет рассеяние электронов на ХСИ  $Ga^{3+}$ . Это связано с тем, что кулоновские корреляции ионов галлия и положительных зарядов на ионах железа ( $d$ -дырок) приводят к эффективной экранировке взаимодействия электронов с ионами  $Ga^{3+}$  [1]. Третьим эффектом, который имеет место в системах со смешанной валентностью, является нарушение правила Маттиссена из-за взаимного влияния механизмов рассеяния электронов на двух типах заряженных примесей  $Fe^{3+}$  и  $Ga^{3+}$  [2].

В области концентраций  $N_{Fe} > 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  выполняется условие  $N_0 > N_{1+}$ , степень пространственного упорядочения КСИ  $Fe^{3+}$  и подвижность электронов являются монотонно убывающими функциями содержания галлия [3]. При меньшем содержании примесей железа степень пространственного упорядочения ионов железа и подвижность электронов, согласно теории [1,3], должны быть немонотонными функциями концентрации галлия. Однако экспериментально обнаружить увеличение подвижности электронов в кристаллах HgSe:Fe,Ga с  $N_{Fe} = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  с ростом содержания галлия нам не удалось из-за наличия в исследованных образцах значительного числа собственных дефектов и относительно слабой чувствительности величины подвижности к изменению степени упорядочения заряженных центров.

Известно, что термомагнитные эффекты являются гораздо более тонкими индикаторами механизмов рассеяния электронов, чем подвижность [5]. В работе [6] показано, что в кристаллах HgSe:Fe при увеличении концентрации примесей железа происходит изменение характера рассеяния электронов, обусловленное возрастанием степени пространственного упорядочения КСИ  $Fe^{3+}$ . При этом знак поперечного эффекта Нернста–Эттингсгаузена (НЭ) при  $N_{Fe} \sim 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  меняется с отрицательного, характерного для рассеяния на КСИ  $Fe^{3+}$  в области слабых корреляций, на положительный,

Основные характеристики исследованных образцов

$N_{\text{Fe}}, \text{cm}^{-3}$	Номер образца	$N_{\text{Ga}}, 10^{18} \text{cm}^{-3}$	$n_e, 10^{18} \text{cm}^{-3}$	$\mu, 10^4 \text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$	$\Omega\tau$ (4.2 kOe)	$Q_{\perp}, 10^{-2} \text{CGSM}$	$T, \text{K}$
$5 \cdot 10^{18}$	1	0	4.8	5.1	2.1	-0.5	10
	2	2	4.8	2.9	1.2	+1.5	
	3	3	5.1	3.1	1.3	+1.5	
	4	10	12.4	1.1	0.46	-0.3	
$1 \cdot 10^{19}$	5	0	4.7	8.3	3.5	+2.1	15
	6	1	4.8	8.45	3.5	+1.95	
	7	2	4.7	8.1	3.4	+1.9	
	8	3	4.8	5.3	2.2	+0.5	
	9	10	12.4	1.2	0.51	-0.1	
$2 \cdot 10^{19}$	10	2	4.9	6.4	2.7	+2.0	12
	11	3	4.9	5.5	2.3	-0.4	
	12	5	5.9	1.6	0.67	-0.1	

что соответствует сильным пространственным корреляциям в КСИ  $\text{Fe}^{3+}$ . Поэтому представляло интерес экспериментально исследовать зависимость коэффициента поперечного эффекта НЭ  $Q_{\perp}$  от концентрации галлия на кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  с различным содержанием железа. Это позволит определить характер влияния ХСИ галлия на пространственное упорядочение в КСИ  $\text{Fe}^{3+}$  и получить важную информацию о механизмах рассеяния электронов в этих соединениях. Далее приводятся результаты измерений и количественный анализ зависимостей  $Q_{\perp}(N_{2+})$  для кристаллов  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  с различным содержанием примесей железа.

## 1. Результаты эксперимента

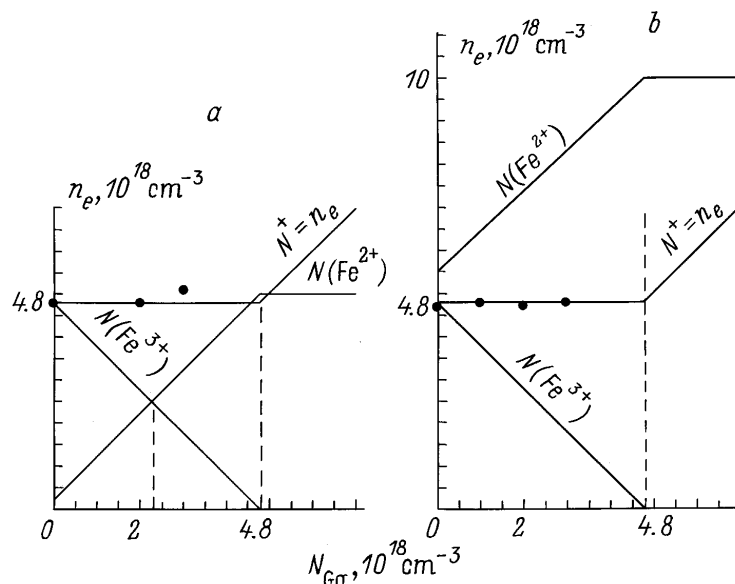
Измерения поперечного эффекта НЭ были проведены на образцах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  с различными концентрациями железа и галлия в магнитном поле  $H = 4.2 \text{ kOe}$  при температурах от 10 до 15 К. Погрешность измерений величин  $Q_{\perp}$  не превышала 10%. Средние размеры образцов составляли  $8.2 \times 2.0 \times 1.0 \text{ mm}$ . Расстояние между температурными зондами варьировалось в пределах 2.5–3 мм. Измеряемая разность температур составляла 5–10% от средней температуры образца. Основные характеристики исследованных образцов: концентрация электронов  $n$ , подвижность  $\mu$  и значения параметра  $\Omega\tau$  ( $\Omega$  — циклотронная частота) — приведены в таблице. Зависимости концентраций электронов  $n_e$  и ионов железа  $\text{Fe}^{2+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$  от содержания Ga в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  приведены на рис. 1. Как видно из рис. 1, концентрация электронов практически не изменяется в интервале содержания примесей галлия  $0 < N_{\text{Ga}} < 3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Это доказывает, что уровень Ферми в исследуемых образцах зафиксирован на донорном уровне железа и на уровне Ферми образуется ССВ ионов железа.

В таблице представлены значения коэффициента поперечного эффекта НЭ  $Q_{\perp}$  для образцов с различным содержанием железа и галлия. Обращает на себя внимание

тот факт, что для образцов с  $N_{\text{Fe}} = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  коэффициент  $Q_{\perp}$  с ростом  $N_{2+}$  дважды меняет знак. Заметим, что возрастание  $Q_{\perp}$  и смену знака поперечного эффекта НЭ с ростом  $N_{\text{Fe}}$  на образцах  $\text{HgSe}:\text{Fe}$  в работе [6] удалось количественно объяснить переходом от области слабых к области сильных кулоновских корреляций в КСИ  $\text{Fe}^{3+}$ . Поэтому экспериментально наблюдаемую смену знака  $Q_{\perp}$  с отрицательного на положительный для образцов с  $N_{\text{Fe}} = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  можно связать с ростом степени корреляций в системе ионов  $\text{Fe}^{3+}$  при увеличении содержания ХСИ  $\text{Ga}^{3+}$ . При содержании ионов галлия  $N_{2+} \geq 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  уровень Ферми расположен выше донорного уровня железа, и концентрация  $N_{1+} = 0$ , а  $N_0 = N_{\text{Fe}}$ . Поэтому для образцов № 4, 9, 12 коэффициент  $Q_{\perp}$  имеет отрицательный знак, что характерно для рассеяния электронов на ХСИ  $\text{Ga}^{3+}$ .

Следует отметить, что исследуемые образцы кроме примесей железа и галлия содержат неконтролируемые собственные дефекты, которые могут приводить к определенному разбросу значений  $Q_{\perp}(N_{2+})$ . Для серии образцов с  $N_{\text{Fe}} = 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  (образцы № 5–8) в области ССВ величина эффекта НЭ убывает с ростом содержания галлия. Знак поперечного эффекта НЭ для образцов № 5–8 положительный, что свидетельствует о преобладании рассеяния на КСИ  $\text{Fe}^{3+}$ . Это утверждение относится и к образцу № 10 с  $N_{\text{Fe}} = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Отрицательный знак  $Q_{\perp}$  у образца № 11 связан, по-видимому, с наличием собственных дефектов, концентрация которых, согласно оценке по величине подвижности электронов  $\mu$  [3], составляет  $\sim (1-2) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Таким образом, суммарная концентрация ХСИ для данного образца превышает значение  $4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

Для объяснения столь необычного поведения  $Q_{\perp}(N_{2+})$  в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  проанализируем сначала зависимость времени релаксации электронов от энергии. Затем мы проведем расчет поперечного эффекта НЭ с учетом рассеяния электронов на ХСИ  $\text{Ga}^{3+}$ , КСИ  $\text{Fe}^{3+}$ , сплавном потенциале, а также эффекта увлечения электронов фононами.



**Рис. 1.** Зависимости концентраций электронов  $n_e$  и ионов железа  $N(\text{Fe}^{2+})$  и  $N(\text{Fe}^{3+})$  от содержания Ga в кристаллах HgSe:Fe,Ga для разных концентраций  $N_{\text{Fe}}$ .  $N_{\text{Fe}}$  ( $10^{19} \text{cm}^{-3}$ ):  $a$  — 0.5,  $b$  — 1. Точками обозначены экспериментальные данные.

## 2. Время релаксации электронов в кристаллах HgSe: Fe,Ga

Систему ионов в HgSe:Fe,Ga будем рассматривать в соответствии с моделью, предложенной в [7], как бинарный сплав, состоящий из заряженных  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$  и нейтральных в решетке ионов  $\text{Fe}^{2+}$ . Релаксация импульса электронов обусловливается взаимодействием электронов с этими центрами. Взаимодействие электронов с нейтральными центрами  $\text{Fe}^{2+}$  считается контактным. При вычислении времени релаксации электронов учитывается непараболичность зоны проводимости HgSe в рамках двузонной модели Кейна с параметрами:  $\epsilon_g = 0.22 \text{eV}$  и эффективной массой электрона на дне зоны  $m_n = 0.02m_0$ , где  $m_0$  — масса свободного электрона.

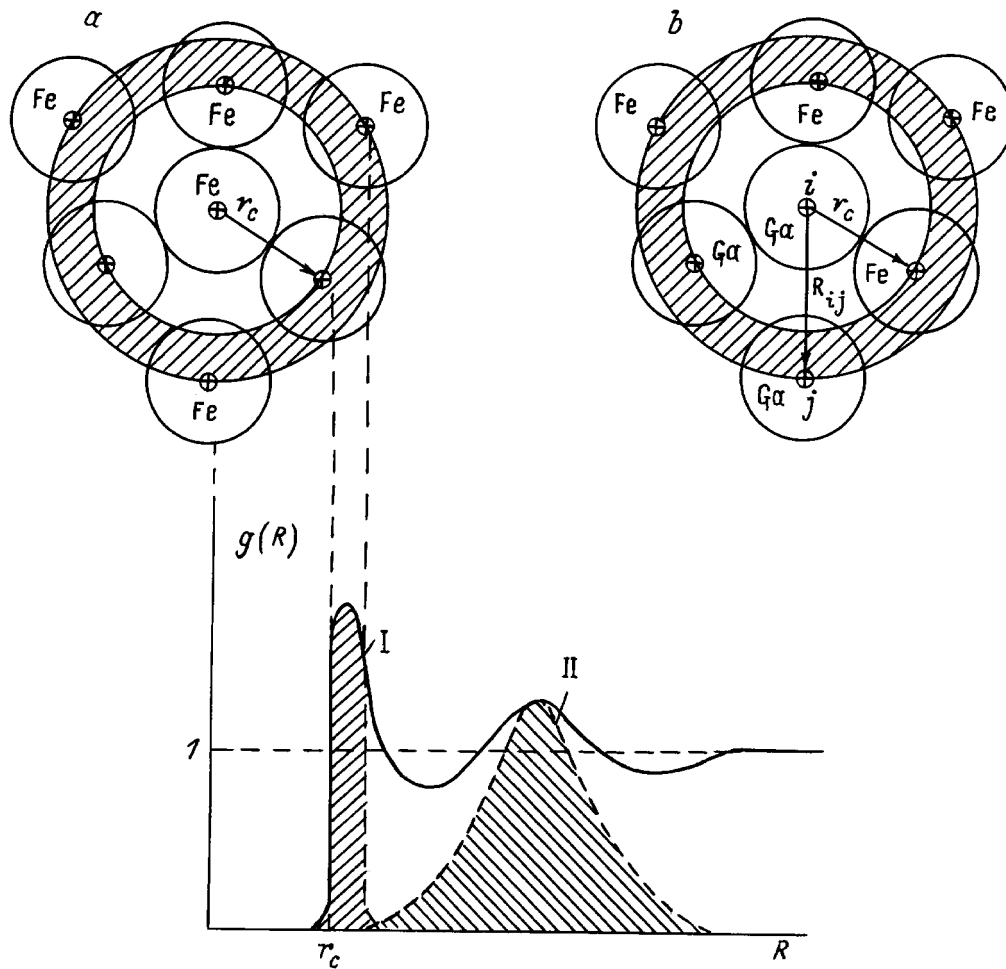
Для вычисления времени релаксации электронов  $\tau(\epsilon)$  в кристаллах HgSe:Fe,Ga с учетом эффектов взаимного влияния механизмов рассеяния электронов на двух типах заряженных доноров  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$  воспользуемся методом, предложенным в работах [2,3]. Этот метод основан на варианте модели короткодействующих корреляций (МКК), предложенном в [7], который справедлив для случая произвольных по величине кулоновских корреляций ионов  $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{3+}$ . Такой подход позволил количественно объяснить зависимость  $\mu(N_{\text{Fe}})$  в широком интервале концентраций железа  $N_{\text{Fe}}$  [7]. Кулоновское отталкивание между одноименными зарядами на примесях железа приводит к их пространственному упорядочению лишь в том случае, если на уровне Ферми образуется ССВ. Такая ситуация реализуется в кристаллах HgSe:Fe при  $N_{\text{Fe}} > N^*$ ; в этом случае  $d$ -дырки могут перераспределяться по узлам решетки, занятым иона-

ми  $\text{Fe}^{2+}$ . Максимальный выигрыш свободной энергии при упорядочении ионов  $\text{Fe}^{3+}$  обеспечивается тогда, когда близко расположенные  $d$ -дырки удаляются друг от друга [8], и вокруг каждого иона  $\text{Fe}^{3+}$  образуется корреляционная сфера радиуса  $r_c$ , в которой нет других ионов  $\text{Fe}^{3+}$  (рис. 2). С ростом полной концентрации железа  $N_{\text{Fe}}$  увеличивается число свободных мест для перераспределения  $d$ -дырок, поэтому радиус корреляционной сферы  $r_c$  и степень пространственного упорядочения возрастают. Это позволяет аппроксимировать систему ионов  $\text{Fe}^{3+}$  системой твердых сфер с диаметром  $d = r_c$  [7,8]. Как видно из рис. 2, при этой аппроксимации центры ионов  $\text{Fe}^{3+}$  не могут находиться ближе, чем радиус корреляционной сферы. Степень упорядочения в такой системе характеризуется параметром упаковки  $\eta = \pi d^3 N_{1+} / 6 = V_c N_{1+} / 8$ , который равен отношению объема, занятого твердыми сферами, к полному объему системы.

Введение в кристалл неупорядоченно расположенных ионов галлия уменьшает объем корреляционной сферы. Это уменьшение пропорционально вероятности найти ион  $\text{Ga}^{3+}$  в объеме  $V_c$  в окрестности иона  $\text{Fe}^{3+}$ . Для пуассоновского распределения примеси галлия параметр упаковки может быть определен из уравнения [3]

$$\eta = \eta_L \exp\left(-p \frac{\eta}{\eta_L} \frac{N_{2+}}{N_{1+}}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{\eta}{\eta_L} \frac{N_{\text{Fe}}}{N_{1+}}\right)\right]. \quad (1)$$

Здесь  $\eta_L = 0.45$  соответствует состоянию сильно коррелированной кулоновской жидкости [7]. Параметр теории  $p$  введен потому, что процедура учета влияния ионов  $\text{Ga}^{3+}$  на степень упорядочения ионов  $\text{Fe}^{3+}$ , описываемая уравнением (2), является приближенной. Значение параметра  $p$  было определено из анализа экспериментальных зависимостей  $\mu(N_{\text{Fe}}, N_{2+})$  в работе [3] и составляет 0.2.



**Рис. 2.** Схема пространственного упорядочения ионов  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$  в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe}$  (a) и  $\text{HgSe}:\text{Fe,Ga}$  (b). I и II — номера координационных сфер корреляционной функции  $g(R)$ . Штриховая линия  $g(R) = 1$  соответствует хаотическому распределению частиц.

При вычислении скорости релаксации импульса электронов в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe,Ga}$  необходимо учитывать пространственные корреляции ионов  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$ . Дело в том, что ионы  $\text{Ga}^{3+}$  закреплены в узлах кристаллической решетки, а  $d$ -дырки (положительные заряды на ионах железа) в результате кулоновского отталкивания могут перераспределяться по позициям, занятым ионами  $\text{Fe}^{2+}$ . Поэтому можно предположить [3], что за счет кулоновского отталкивания  $d$ -дырок и ионов  $\text{Ga}^{3+}$  вокруг части ионов галлия  $\delta N_{2+}$ , расположенных на расстояниях, больших радиуса  $r_c$ , образуются корреляционные сферы, в которых нет других положительных зарядов (рис. 2, b), и эти примеси  $\text{Ga}^{3+}$  рассеивают электроны так же, как КСИ  $\text{Fe}^{3+}$ . Остальные ионы  $\text{Ga}^{3+}$  с концентрацией  $N_r = (1 - \delta)N_{2+}$ , находящиеся на расстояниях, меньших  $r_c$ , рассеивают электроны как неупорядоченная совокупность заряженных центров (по Бруксу–Херрингу), т. е.

$$N_+ = N_{1+} + N_{2+} = N_c + N_r, \quad N_c = N_{1+} + \delta N_{2+}. \quad (2)$$

Для пуассоновского распределения примесей параметр  $\delta$  определяется вероятностью того, что в корреляционном объеме  $V_c$  нет других (кроме рассматриваемого) ионов галлия. Величина  $\delta$  может быть выражена через параметр упаковки  $\eta$

$$\delta = \exp\left(-p \frac{\eta}{\eta_L} \frac{N_{2+}}{N_{1+}}\right). \quad (3)$$

Разделение всей системы заряженных центров  $\text{Fe}^{3+}$  и  $\text{Ga}^{3+}$  на две подсистемы КСИ с концентрацией  $N_c$  и ХСИ с концентрацией  $N_r$  позволяет исключить эффекты взаимного влияния и воспользоваться правилом Маттисена для обратных времен релаксации электронов при рассеянии на двух типах заряженных примесей. Поэтому выражение для обратного времени релаксации электронов можно представить в виде суммы трех вкладов, обусловленных рассеянием на КСИ, ХСИ и на сплавном потенциале. Оно получается аналогично тому, как это

сделано в работах [3,6,7]:

$$\begin{aligned} \tau(N_{1+}, N_{2+}, \varepsilon) &= \left( \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_c} + \frac{1}{\tau_{al}} \right)^{-1} \\ &= \left( \frac{1}{\tau_+} + \frac{1}{\tau_{al}} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $1/\tau_+ = 1/\tau_{1+} + 1/\tau_{2+}$  — обратное время релаксации для рассеяния электронов на заряженных центрах  $\text{Ga}^{3+}$  и  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $1/\tau_{al}$  — обратное время релаксации электронов для рассеяния на сплавном потенциале

$$\frac{1}{\tau_{al}} = \frac{1}{\tau_{ВН}} \left\{ \frac{\Lambda}{\Phi_{ВН}} \left[ 2 \left( \frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \frac{\Phi_{+0}}{y} + \frac{\Lambda}{2} y \frac{N_0}{N_+} \right] \right\}^{-1}, \quad (5)$$

где  $\tau_{ВН}$  — подвижность электронов для рассеяния на неупорядоченной совокупности ионов (согласно теории Брукса–Херринга,  $1/\tau_{ВН} = 3\pi\hbar\Phi_{ВН}/\varepsilon_B(\varepsilon)y^3$ ),  $\Phi_{ВН} = \ln(1 + b_s) - 1/(1 + b_s^{-1})$ ,  $b_s = (2k_F r_s)^2 y^2$ ,  $y = k/k_F$ ,  $r_s$  — радиус экранирования Томаса–Ферми,  $m(\varepsilon) = m_n(1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g)$ ,  $m_n$  — масса электрона на дне зоны проводимости,  $\varepsilon_B(\varepsilon) = m(\varepsilon)e^4/2\chi\hbar^2$  — боровская энергия,  $\chi$  — диэлектрическая проницаемость,  $\hbar k_F$  — фермиевский импульс,  $\Phi_{+0} = 1 - b_s^{-1} \ln(1 + b_s)$ ,  $\Lambda$  есть отношение констант взаимодействия электронов с нейтральными и заряженными центрами (согласно оценкам [7],  $\Lambda = 0.1$ ). При рассеянии на коррелированной системе ионов  $\text{Fe}^{3+}$  выражение для обратного времени релаксации имеет вид

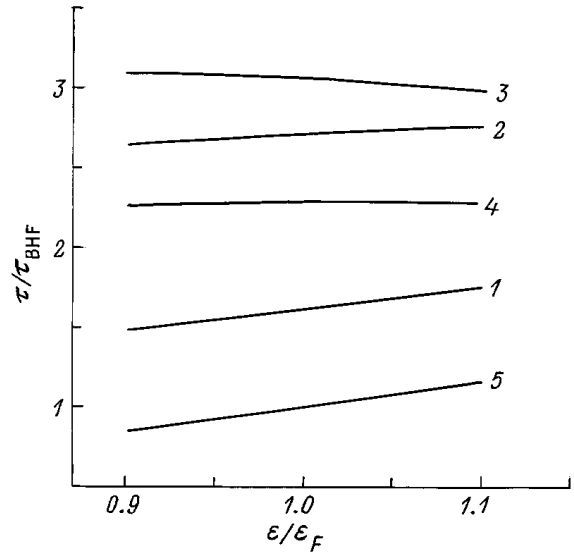
$$\frac{1}{\tau_{1+}} = \frac{1}{\tau_{ВН}} \frac{N_{1+}}{N_+} \frac{\Phi_c}{\Phi_{ВН}}, \quad \Phi_c(k_F) = 2 \int_0^1 \frac{x^3 S(2k_F x)}{(x^2 + b_s^{-1})^2} dx, \quad (6)$$

где  $S(q)$  — структурный фактор, характеризующий степень упорядочения системы доноров, определенный в [7]. Для неупорядоченной системы  $S(q) = 1$  и  $\Phi_c(k_F) = \Phi_{ВН}$ . Влияние неупорядоченно распределенных примесей  $\text{Ga}^{3+}$  проявляется в уменьшении концентрации  $N_{1+} = N_+ - N_{2+}$  и зависимости параметра  $\eta$  от величины  $N_{2+}$  (см. [3]). Вклад в релаксацию импульса от рассеяния на ХСИ  $\text{Ga}^{3+}$  определяется выражением

$$\frac{1}{\tau_{2+}} = \frac{1}{\tau_{ВН}} \frac{N_{2+}}{N_+} \left[ 1 - \delta \left( 1 - \frac{\Phi_c}{\Phi_{ВН}} \right) \right]. \quad (7)$$

Как видно из (7), наличие ССВ ионов железа приводит к пространственным корреляциям  $\text{Fe}^{3+}$ – $\text{Ga}^{3+}$  и к ослаблению рассеяния электронов на ХСИ  $\text{Ga}^{3+}$ , которое учитывается в (7) множителем в квадратных скобках.

Расчитанные по формулам (4)–(7) зависимости времени релаксации от энергии рассеиваемого электрона  $\tau(\varepsilon)$  в окрестности уровня Ферми для  $N_{\text{Fe}} = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  и различных значений  $N_{2+}$  приведены на рис. 3. Как видно из этого рисунка, с ростом содержания примеси галлия, энергетическая зависимость времени релаксации претерпевает качественные изменения: для



**Рис. 3.** Зависимость времени релаксации электронов от энергии в кристаллах HgSe: Fe, Ga для  $N_{1+} = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Концентрации ионов галлия  $N_{2+}$  ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ): 1 — 0, 2 — 1, 3 — 2, 4 — 3, 5 — 5.

$N_{2+} = (0, 1, 5) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  производная  $d\tau/d\varepsilon > 0$ , тогда как при  $N_{2+} = (2-3) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  величина  $d\tau/d\varepsilon < 0$ . Ясно, что такое поведение  $\tau(\varepsilon)$  в окрестности энергии Ферми должно решающим образом сказаться на зависимости термомагнитных эффектов от концентрации примесей галлия.

### 3. Расчет поперечного эффекта Нернста–Эттингсгаузена для кристаллов HgSe: Fe, Ga

Наблюдаемые на опыте значения  $Q_{\perp}(N_{\text{Fe}}, N_{2+})$  при низких температурах определяются суммой электронной и фононной составляющих. Для вырожденного электронного газа (в условиях эксперимента неравенство  $\varepsilon \gg k_B T$  хорошо выполняется) этот кинетический коэффициент может быть представлен в виде [9]

$$\begin{aligned} Q_{\perp}(N_{\text{Fe}}, N_{2+}) &= -\frac{\pi^2}{3e} \frac{k_B^2 T}{H \varepsilon_F} \frac{\Omega \tau}{1 + (\Omega \tau)^2} D \\ &\times \left[ 1 + \frac{k_B T}{\varepsilon_F} A_{\text{ph}} G_{\text{ph}} \right], \end{aligned} \quad (8)$$

где  $D = \varepsilon_F \left\{ \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln \left( \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right) \right\}_{\varepsilon=\varepsilon_F}$ ,  $G_{\text{ph}} = \varepsilon_F \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln(A_{\text{ph}}(\varepsilon))_{\varepsilon=\varepsilon_F}$ , а выражение для фононной силы увлечения  $A_{\text{ph}}$  имеет вид [9,10]

$$\begin{aligned} A_{\text{ph}} &= \frac{6m(\varepsilon)s^2}{k_B} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \frac{W(\mathbf{q})}{v_{\text{ph}}} \frac{dN_{\mathbf{q}}^0}{dT} \left( 1 - \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} \right) \\ &\times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \delta_{\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь  $W(q) = \pi E_l^2 q / \rho s$ ,  $E_l$  — константа деформационного потенциала,  $\rho$  — плотность кристалла,  $s = (1/3)(1/s_l + 2/s_t)^{-1}$  — средняя скорость звука, а  $s_l$  и  $s_t$  — скорость продольных и поперечных фононов соответственно,  $\nu_{ph}$  — частота релаксации длинноволновых фононов.

Если в выражении (4) для времени релаксации  $\tau(\varepsilon)$  учесть и рассеяние на акустических фононах, то для  $D$  аналогично [9] получим

$$D = \frac{\varepsilon_g + 2\varepsilon_F}{2(\varepsilon_g + \varepsilon_F)} \left[ \frac{K_+ + K_a - K_{ph}}{K_b + K_{ph}} \right] - \frac{4\varepsilon_F}{\varepsilon_g + \varepsilon_F},$$

$$K_a = \Lambda \left[ 2 \frac{N_{1+}}{N_+} \left( \frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \left( \Phi_{+0} - \frac{\partial \Phi_{+0}}{\partial y} \Big|_{y=1} \right) - \frac{N_0}{2N_+} \Lambda \right],$$

$$K_b = \frac{N_r}{N_+} \Phi_{BH} + \frac{N_c}{N_+} \Phi_c + \Lambda \left[ 2 \frac{N_{1+}}{N_+} \left( \frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \Phi_{+0} + \frac{\Lambda N_0}{2N_+} \right],$$

$$K_+ = \frac{N_c}{N_+} \left( 3\Phi_c - \frac{\partial \Phi_c}{\partial y} \Big|_{y=1} \right) + \frac{N_r}{N_+} \left( 3\Phi_{BH} - \frac{\partial \Phi_{BH}}{\partial y} \Big|_{y=1} \right),$$

$$K_{ph} = \frac{3E_l^2 m_F k_F k_B T}{4\hbar^2 \varepsilon_{BF} \rho s^2}. \quad (10)$$

Система заряженных центров  $Fe^{3+}$  и  $Ga^{3+}$  является полностью разупорядоченной, если уровень Ферми находится ниже  $d$ -уровня железа ( $N_{Fe} + N_{2+} < N^*$  и  $N_0 = 0$ ) или уровень Ферми расположен выше донорного уровня железа ( $N_{2+} > N^*$  и  $N_{1+} = 0$ ). Тогда  $S_q = 1$ , и в выражениях (10) следует произвести замену  $\Phi_c(k) \rightarrow \Phi_{BH}(k)$ .

Вид функции  $A_{ph}(\varepsilon, T, N_{Fe}, N_{2+})$ , определяющий вклад эффекта увлечения, зависит от механизма электрон-фононного взаимодействия и частоты релаксации фононов  $\nu_{ph}$ . Как показали оценки [9,11], основной вклад в релаксацию импульса длинноволновых фононов в кристаллах  $HgSe:Fe,Ga$  в интервале температур 10–15 К вносят механизмы Херринга, Релея и рассеяние фононов на электронах и на границах образца. Поэтому для частоты релаксации фононов  $\nu_{ph}$  имеем

$$\nu_{ph} = \nu_{phH} + \nu_{phR} + \nu_{phe} + \nu_{phL}, \quad (11)$$

где  $\nu_{phH} = \Lambda_H x^2$ ,  $x = q/q_T$ ,  $\Lambda_H = B_2 T^3 s^2 q_T^2$ ,  $q_T k_B T / \hbar s$  — тепловой импульс фононов,  $\nu_{phR} = \Lambda_R x^4$ ,  $\Lambda_R = A s^4 q_T^4$ ,  $\nu_{phe} = \nu_{phe}^0 x$ ,  $\nu_{phe}^0 = \frac{1}{2\pi} \frac{E_l^2 m(\varepsilon)}{\rho \hbar^3} q_T$ ,  $\nu_{phL} = s/1.12(L_1 L_2)^{1/2}$ ,  $L_1 L_2$  — поперечное сечение образца. Согласно работе [11], значения параметров  $B_2 = 1.14(1 \pm 0.3) \cdot 10^{-11} \text{ cm/s} \cdot \text{K}^3$  и  $A = (8.24 + 12.1 N_+ \cdot 10^{-18}) \cdot 10^{-22} \text{ cm}^4/\text{s}$ . Ограничиваясь рассмотрением этих механизмов релаксации, выражения величин  $A_{ph}$  и  $G_{ph}$  можно представить в виде

$$A_{ph} = \frac{3}{2} \left( \frac{q_T}{k} \right)^3 J_{2k}, \quad J_{2k} = \int_0^{x_{2k}} F(x) dx, \quad (12)$$

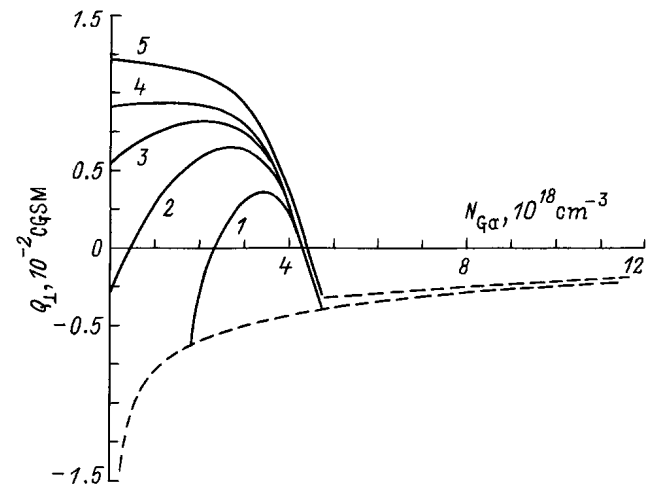
$$F(x) = \frac{\nu_{phe}^0 x^5 \exp(x)}{(\exp(x) - 1)^2 \left\{ \nu_{phL} + \nu_{phe}^0 x + \Lambda_H x^2 + \Lambda_R x^4 \right\}},$$

$$G_{ph} = \frac{4\varepsilon_F}{\varepsilon_g + 2\varepsilon_F} - \frac{3\varepsilon_g + 2\varepsilon_F}{2\varepsilon_g + \varepsilon_F} + \frac{1}{2} \frac{(\varepsilon_g + 2\varepsilon_F)}{(\varepsilon_g + \varepsilon_F)} \frac{x_{2kF} F(x_{2kF})}{J_{2kF}}, \quad (13)$$

где  $x_{2kF} = 2k_F/q_T$ .

Выражения (8)–(13) позволяют численно рассчитать зависимость коэффициента  $Q_{\perp}(N_{2+})$  для кристаллов  $HgSe:Fe,Ga$  при учете эффекта увлечения. Результаты этого расчета приведены на рис. 4. В расчете были использованы следующие значения параметров [9,11]:  $m(\varepsilon_F) \approx 0.07m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона),  $\chi = 20$ ,  $\varepsilon_l = 0.7 \text{ eV}$ ,  $s = 1.95 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$  — средняя скорость акустических фононов. Как видно из рис. 4, при малых концентрациях примесей железа  $N_{Fe} < 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  зависимости величины  $Q_{\perp}(N_{2+})$  имеют немонотонный характер (кривые 1–3), а для  $N_{Fe} = (3–5) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  коэффициент  $Q_{\perp}(N_{2+})$  дважды меняет знак с ростом содержания галлия. При  $N_{Fe} > 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  коэффициент  $Q_{\perp}(N_{2+})$  монотонно убывает с ростом концентрации галлия (кривые 4, 5). Следует отметить, что необычный характер эффекта НЭ в соединении  $HgSe:Fe,Ga$ , так же как и в  $HgSe:Fe$  [6,9], связан с образованием ССВ ионов железа. В режиме донорных примесей, когда уровень Ферми расположен либо ниже  $d$ -уровня железа ( $N_{Fe} + N_{2+} < N^*$ ), либо выше  $d$ -уровня железа ( $N_{2+} > N^*$ ), знак эффекта отрицателен, и величина  $Q_{\perp}$  незначительно возрастает при увеличении концентрации легирующей примеси. На рис. 4 эти зависимости изображены штриховыми линиями.

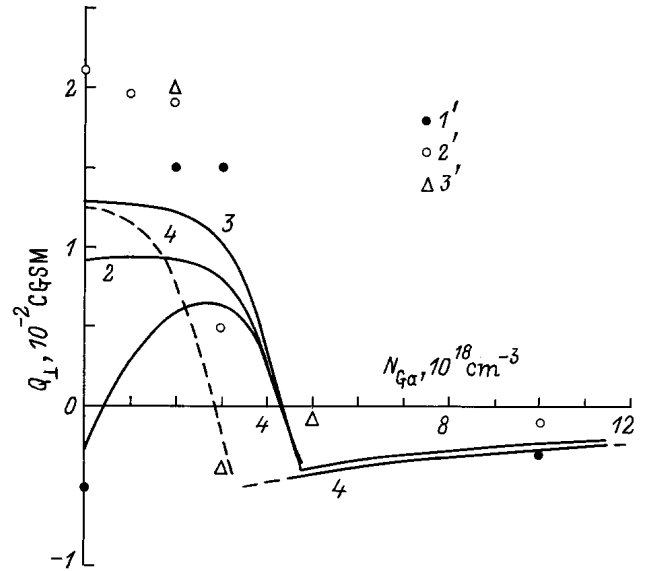
Качественно поведение поперечного эффекта НЭ в зависимости от содержания примесей галлия и железа



**Рис. 4.** Рассчитанные зависимости коэффициента НЭ  $Q_{\perp}$  от содержания примесей галлия  $N_{Ga}$  для кристаллов  $HgSe:Fe,Ga$  при  $T = 10 \text{ K}$ .  $N_{Fe}$  ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ): 1 — 3, 2 — 5, 3 — 7, 4 — 10, 5 — 50.

может быть объяснено следующим образом. Знак эффекта определяется зависимостью времени релаксации электронов от энергии. Эффекты НЭ имеют положительный знак при рассеянии электронов на акустических фононах [5] и, как было показано [6], при рассеянии на КСИ Fe<sup>3+</sup> при  $N_{Fe} > 6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . В случае рассеяния электронов на КСИ знак термомагнитных эффектов отрицателен. В кристаллах HgSe:Fe,Ga со сравнительно небольшим содержанием примесей железа  $N_{Fe} \sim (3-7) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , когда  $N_0 < N_{1+}$ , рост степени порядка в системе заряженных центров ограничивается концентрацией  $N_0$  — числом свободных мест, на которые могут перераспределяться  $d$ -дырки. Как видно из рис. 1, увеличение концентрации  $N_{2+}$  приводит к уменьшению величины  $N_{1+}$  и к росту концентрации  $N_0$ . При этом степень упорядочения КСИ Fe<sup>3+</sup> возрастает, и усиливаются пространственные корреляции ионов Fe<sup>3+</sup>-Ga<sup>3+</sup> до тех пор, пока выполняется неравенство  $N_0 < N_{1+}$ . В результате не только происходит ослабление рассеяния электронов проводимости системой заряженных центров [3], но и изменяется характер зависимости времени релаксации электронов от энергии (рис. 3). При  $N_{1+} < N_0$  степень пространственного упорядочения убывает при увеличении содержания КСИ Ga<sup>3+</sup>, поскольку в этом случае она определяется преимущественно концентрацией  $d$ -дырок  $N_{1+}$  [3]. Последняя уменьшается с ростом концентрации  $N_{Ga}$  (рис. 1). Такое поведение степени пространственного упорядочения КСИ Fe<sup>3+</sup> приводит к немонотонным зависимостям коэффициента НЭ от содержания галлия при сравнительно небольших концентрациях примесей железа и монотонному убыванию величины эффекта при  $N_{Fe} \geq 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Отметим, что эффект увлечения вносит малый вклад (порядка 1–5%) в величину коэффициента НЭ  $Q_{\perp}$  в отличие от его вклада в термоэдс [9]. Как видно из выражения в квадратных скобках в формуле (8), эта малость обусловлена наличием множителя  $k_B T / \epsilon_F \ll 1$ .

На рис. 5 проведено сравнение теоретически рассчитанных зависимостей коэффициента  $Q_{\perp}(N_{2+})$  с экспериментальными данными, приведенными в таблице. Как видно из этого рисунка, результаты расчета качественно согласуются с экспериментом. Для образца № 1 с  $N_{1+} = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  и  $N_{2+} = 0$  знак эффекта НЭ отрицателен, что характерно для рассеяния на КСИ Fe<sup>3+</sup> в области слабых пространственных корреляций в системе ионов железа [6]. Для образцов с концентрациями  $N_{2+} = (2, 3) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  знак эффекта, как и следует из нашей теории, положителен. При  $N_{2+} = 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  (образец № 4) отрицательный знак эффекта НЭ обусловлен рассеянием на КСИ Ga<sup>3+</sup>. Таким образом, можно сделать вывод о том, что нам удалось экспериментально обнаружить возрастание степени пространственного упорядочения системы заряженных центров в кристаллах HgSe:Fe,Ga с ростом концентрации неупорядоченно распределенных ионов Ga<sup>3+</sup> при сравнительно небольшом содержании примесей железа. Для образцов с концентрацией примесей железа



**Рис. 5.** Рассчитанные (линии) и экспериментальные (точки) зависимости коэффициента НЭ  $Q_{\perp}$  от концентрации галлия  $N_{Ga}$  для образцов HgSe:Fe,Ga.  $N_{Fe}$  ( $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ): 1, 1' — 0.5 ( $T = 10 \text{ K}$ ); 2, 2' — 1 ( $T = 15 \text{ K}$ ); 3, 3', 4 — 2 ( $T = 12 \text{ K}$ ). Штриховая кривая 4 — зависимость  $Q_{\perp}(N_{Ga})$  с учетом концентрации собственных дефектов, равной  $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

$\sim (1-2) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  величина эффекта НЭ, как видно из рис. 5, убывает с ростом содержания КСИ Ga<sup>3+</sup> и становится отрицательной при  $N_{2+} > 4 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Этот результат согласуется с выводами работы [3] о том, что степень пространственного упорядочения КСИ Fe<sup>3+</sup> при большом содержании примесей железа убывает с ростом концентрации примесей галлия. Из рис. 5 видно, что величина коэффициента  $Q_{\perp}$  для образца № 11 значительно отклоняется от теоретической зависимости  $Q_{\perp}(N_{2+})$  (кривая 3). Однако согласие заметно улучшается, если учесть наличие собственных дефектов (кривая 4 на рис. 5). Это подтверждает сделанное выше предположение о влиянии собственных дефектов на величину и знак эффекта НЭ для данного образца. Из рис. 5 также следует, что экспериментально измеренные значения  $Q_{\perp}(N_{Ga})$  для образцов № 2, 3, 5–7 и 10 заметно превышают теоретически рассчитанные. Это связано по нашему мнению, с недостаточно полным учетом непараболичности зонной структуры кристаллов HgSe:Fe,Ga в рамках двузонной модели Кейна. В действительности эффект непараболичности необходимо учитывать не только через зависимость эффективной массы электрона  $m(\epsilon)$ , но и через характерные для зоны  $\Gamma_8$  блоховские амплитуды волновых функций [12]. Однако этот расчет выходит за рамки данной работы и требует отдельного рассмотрения. Как показали оценки, учет блоховских амплитуд для зоны  $\Gamma_8$  приведет лишь к изменению величины эффекта НЭ (возрастанию коэффициента  $Q_{\perp}$  в области положительных значений). Качественно же зависимости  $Q_{\perp}(N_{2+})$  не изменятся.

Таким образом, в работе проанализированы экспериментально обнаруженные необычные зависимости поперечного эффекта НЭ от содержания примесей галлия в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$  при низких температурах. Проведенные нами исследования убедительно показали, что характер влияния хаотически распределенных примесей галлия на корреляционные свойства системы ионов  $\text{Fe}^{3+}$  зависит от концентрации примесей железа. В области небольших концентраций железа  $N_{\text{Fe}} \sim (3-7) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  рост содержания галлия приводит к немонотонным зависимостям степени пространственного упорядочения системы ионов  $\text{Fe}^{3+}$  и соответственно коэффициента НЭ  $Q_{\perp}$ . При значительном содержании примесей железа  $N_{\text{Fe}} > 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  степень пространственного упорядочения и коэффициент НЭ  $Q_{\perp}$  монотонно убывают с ростом содержания галлия. Качественное согласие рассчитанных зависимостей коэффициента НЭ от концентрации галлия с экспериментальными данными позволяет надеяться на то, что развитая нами теория правильно учитывает основные механизмы рассеяния электронов в кристаллах  $\text{HgSe}:\text{Fe},\text{Ga}$ .

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 95-02-03847) и программы ИНТАС (грант № 93-3657 EXT).

## Список литературы

- [1] И.Г. Кулеев, И.М. Цидильковский, А.Т. Лончаков, Н.К. Леринман, Л.Д. Сабирзянова. Тр. II Рос. конф. по физике полупроводников. СПб. (1996). Т. 1. С. 72.
- [2] И.М. Цидильковский, И.Г. Кулеев, Г.Л. Штрапенин. ДАН **347**, 4, 472 (1996).
- [3] И.М. Цидильковский, И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, Н.К. Леринман, Л.Д. Сабирзянова. ФТП **30**, 2113 (1996).
- [4] И.М. Цидильковский. УФН **162**, 63 (1992).
- [5] И.М. Цидильковский. Термомагнитные явления в полупроводниках. Наука, М. (1960).
- [6] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ **103**, 1447 (1993).
- [7] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ **102**, 1652 (1992).
- [8] И.Г. Кулеев. ФТТ **39**, 2, 250 (1997).
- [9] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. ФТП **28**, 937 (1994).
- [10] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Наука, М. (1985).
- [11] C.R. Whitsel, D.A. Nelson, J.G. Broerman, R. Paghia. Phys. Rev. **B7**, 4625 (1973).
- [12] W. Szymanska, P. Boguslawski, W. Zawadzki. Phys. Stat. Sol. (b) **65**, 641 (1974).