

К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в теллуриде свинца

© Д.М. Заячук

Черновицкий государственный университет,
274012 Черновцы, Украина

(Получена 30 января 1995 г. Принята к печати 24 апреля 1996 г.)

Критически проанализировано современное состояние вопроса о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в теллуриде свинца. Показано, что в большинстве известных на данное время работ роль кулоновского потенциала вакансий и деформационного потенциала акустических фононов в процессах рассеяния носителей в РbТе сильно завышалась. Кроме того, роль оптических колебаний решетки при высоких температурах неоправданно сводилась только к полярной составляющей. Показано, что наряду с этим механизмом существенную роль в процессах рассеяния носителей при температурах порядка комнатной, играет деформационный потенциал оптических фононов, роль которого при высоких концентрациях носителей оказывается наиболее существенной.

Вопрос о доминирующих механизмах рассеяния свободных носителей заряда в теллуриде свинца обсуждается и анализируется очень давно (см. [1–7] и др.). Установлено, что такими механизмами являются рассеяние носителей на собственных точечных дефектах и на тепловых колебаниях кристаллической решетки. Их относительная роль в процессах рассеяния сводится к следующему.

При низких температурах, порядка гелиевых, носители заряда рассеиваются преимущественно заряженными вакансиями. При этом при высоких концентрациях носителей, порядка 10^{19} см^{-3} и выше, доминирует рассеяние на короткодействующем потенциале вакансий; при низких, порядка $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и меньше, — рассеяние на кулоновском потенциале последних. Заряд вакансий при анализе принимается равным $\pm e$ или $\pm 2e$, где e — заряд электрона.

При повышении температуры роль вакансионных механизмов рассеяния носителей заряда падает и возрастает роль процессов рассеяния на тепловых колебаниях кристаллической решетки. Последние доминируют при температурах порядка комнатной, и основной вклад дают рассеяние на деформационном потенциале акустических фононов и поляризационное рассеяние на оптических фононах. При этом константа акустического деформационного потенциала оценивается на уровне 24 эВ для электронов и 27 эВ для дырок [1–7].

Однако существующее представление о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в РbТе, сложившееся еще в начале 70 гг., требует существенной корректировки. Оно не дает ответа на вопрос, почему в РbТе подвижность электронов более чем в 2 раза превышает подвижность дырок. Согласно современным представлениям, валентная зона (v -зона) и зона проводимости (c -зона) РbТе являются зеркальным отражением друг друга, а эффективные массы электронов и дырок у экстремумов зон прак-

тически совпадают между собой (см., например, [5]). Если бы при таких условиях при низких концентрациях носителей заряда доминировало рассеяние их на кулоновском потенциале вакансий, то из-за равенства масс электронов и дырок их подвижности также должны были бы быть равными. Из сказанного следует, что роль кулоновского потенциала вакансий в процессах рассеяния носителей заряда в РbТе требует переосмысления. Кроме того, по-видимому, нуждается в переосмыслении и подход к оценке роли оптических колебаний решетки в рассматриваемых процессах, в частности вопрос о деформационном потенциале оптических фононов.

Учитывая изложенное, была предпринята попытка еще раз проанализировать вопрос о доминирующих механизмах рассеяния носителей заряда в РbТе, исходя из нынешнего уровня знаний. Проведенный далее анализ базируется на использовании известных экспериментальных зависимостей холловской подвижности носителей заряда от их концентрации и на зонной модели Кейна

$$\varepsilon(1 + \varepsilon/\varepsilon_g) = \hbar^2 k_t^2 / 2m_t + \hbar^2 k_l^2 / 2m_l. \quad (1)$$

Анализ проведен при комнатной температуре и температуре жидкого гелия, при которых все существенные в РbТе механизмы рассеяния могут быть описаны в приближении времени релаксации. В этом приближении при произвольном вырождении носителей заряда их холловская подвижность μ_H может быть рассчитана как [8]

$$\mu_H = e \langle [\tau(\varepsilon)/m_0(\varepsilon)]^2 \rangle / \langle \tau(\varepsilon)/m_0(\varepsilon) \rangle, \quad (2)$$

где угловые скобки означают усреднение

$$\langle A(\varepsilon) \rangle = \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) A(\varepsilon) d\varepsilon / \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$f_0(\varepsilon)$ — функция распределения Ферми-Дирака, $m_0 = 3m_t m_l / (2m_l + m_t)$. Зависимости времени

релаксации τ от приведенной энергии $x = \varepsilon/k_0T$ для механизмов рассеяния, считающихся в РbTe доминирующими, имеют вид [2,8]:

а) — кулоновский потенциал вакансий:

$$\tau_C(x) = \frac{\varepsilon_0^2(2m_n)^{1/2}(k_0T)^{3/2}(x + \beta x^2)^{3/2}}{\pi(Ze^2)^2 N_v [\ln(1 + \xi) - \xi/(1 + \xi)](1 + 2\beta x)}, \quad (3)$$

где $\xi = (2kr_v)^2$, k — волновой вектор носителя, r_v — радиус экранирования потенциала вакансий;

б) — поляризационное рассеяние на оптических фононах ($T \gg \theta$):

$$\tau_{PO}(x) = \frac{\hbar^2(x + \beta x^2)^{1/2} F^{-1}}{e^2(2m_n k_0 T)^{1/2} (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1})(1 + 2\beta x)}, \quad (4)$$

где

$$F = 1 - \delta \ln(1 + \delta^{-1}) - \frac{2\beta x(1 + \beta x)}{(1 + 2\beta x)^2} [1 - 2\delta + 2\delta^2 \ln(1 + \delta^{-1})],$$

$\delta = (2kr_0)^{-2}$, r_0 — радиус экранирования оптических фононов;

в) — короткодействующий потенциал вакансий и деформационный потенциал акустических фононов:

$$\tau_m(x) = \frac{\tau_{0,m}(T)(x + \beta x^2)^{-1/2}}{(1 + 2\beta x)[(1 - A)^2 - B]}, \quad (5)$$

$$A = \beta x(1 - K_m)/(1 + 2\beta x),$$

$$B = 8\beta x(1 + \beta x)K_m/3(1 + 2\beta x)^2,$$

где для короткодействующего потенциала вакансий индекс $m = v$ и

$$\tau_{0,v} = \pi \hbar^4 / m_n (2m_n k_0 T)^{1/2} U_{vc}^2 N_v, \quad K_v = U_{vv} / U_{vc}, \quad (6)$$

для деформационного потенциала акустических фононов индекс $m = a$ и

$$\tau_{0,a} = 2\pi \hbar^4 C_l / E_{ac}^2 (2m_n k_0 T)^{3/2}, \quad K_a = E_{av} / E_{ac}. \quad (7)$$

В формулах (3)–(7) m_n — эффективная масса плотности состояний в одном эллипсоиде на краю зоны, ε_0 и ε_∞ — статическая и высокочастотная диэлектрические проницаемости соответственно, Ze — заряд вакансии, $U_{vc, vv}$, $E_{ac, av}$ — соответственно короткодействующие потенциалы вакансии и деформационные потенциалы для c -зоны и v -зоны, N_v — концентрация вакансий, C_l — комбинация упругих постоянных. При смешанном рассеянии суммарное время релаксации рассчитывалось как обычно [8]:

$$\tau_\Sigma^{-1} = \sum_i \tau_i^{-1}. \quad (8)$$

Использовавшиеся для расчета μ_H основные параметры кристаллов РbTe приведены в таблице.

Основные параметры РbTe, использовавшиеся для расчета холловской подвижности электронов

Параметр	4.2 К	300 К	Примечание
ε_g , эВ	0.19	0.315	} [10-12]
m_i/m_0	0.026	0.0453	
m_l/m_0	0.24	0.24	
ε_0	1470	400	
ε_∞	38.5	32.6	
C_l , дин/см ²	$8.1 \cdot 10^{11}$	$7.1 \cdot 10^{11}$	[2,5,15]
$\hbar\omega_0$, эВ		0.0136	[2]
a , Å		6.461	[5]
ρ , г/см ²		8.24	[5]
Z	0.14		[9]
E_{ac} , эВ	15	15	} Данные этой работы
E_{oc} , эВ		26	
U_{vc} , эрг/см ³	$3 \cdot 10^{-34}$	$3 \cdot 10^{-34}$	
$K_{v,a,o}$	1.5	1.5	

Параметры E_{ac} и U_{vc} выступали в качестве подгоночных и их значения были определены из условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных зависимостей подвижности электронов от их концентрации. При зеркальности c - и v -зоны РbTe отношения значений этих параметров для указанных зон должны, в наипростейшем варианте, обеспечивать отличие в подвижностях электронов и дырок в исследуемом материале. В качестве нулевого приближения было принято, что как для короткодействующего потенциала вакансий, так для акустического деформационного потенциала эта величина одна и та же и равна 1.5, что согласуется с известными литературными данными [2] и обеспечивает необходимый уровень величины отношения подвижности электронов и дырок в РbTe.

Обобщенные по известным литературным данным экспериментальные результаты зависимости $\mu_H(n)$ при 4.2 и 300 К, подлежащие анализу, представлены на рис. 1 и 2. Прежде всего надлежало оценить возможную роль длинноволновых акустических фононов в формировании подвижности электронов при 4.2 К. Для этого сравнивались максимальные из известных экспериментальные значения последней с рассчитанными по формулам (2), (5) и (7) при различных значениях E_{ac} (см. рис. 3). Видно, что E_{ac} в РbTe не может превышать 19 эВ, так как в противном случае подвижность электронов при 4.2 К не могла бы достигать величины порядка $5.6 \cdot 10^6$ см²/В · с, наблюдающейся в эксперименте.

При анализе возможного вклада кулоновского потенциала вакансий в процессы рассеяния носителей заряда в РbTe были учтены результаты последних теоретических исследований характера локализации на вакансиях электрического заряда, связанного с ними [9]. Согласно этой работе, на вакансии, дающей два свободных носителя, как это имеет место в исследуемом материале [10], локализуется заряд величиной 0.14e. Остальной же избыточный заряд размыт

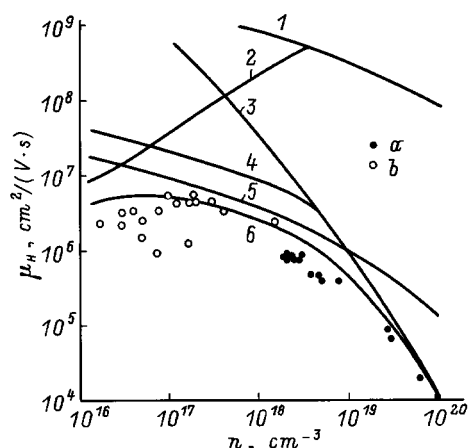


Рис. 1. Зависимость холловской подвижности электронов μ_H от их концентрации n ($T = 4.2$ К) по данным из работ: a — [2], b — [6]. Линии — расчет для механизмов рассеяния: 1, 2 — на кулоновском потенциале вакансий, 3, 4 — на короткодействующем потенциале вакансий, 5 — на деформационном потенциале акустических фононов; 6 — суммарного по формуле (8) для зависимостей 2, 4, 5. Значения параметров, принимавшиеся при расчете: 1, 3 — $N_v = n/2$, 2, 4 — $N_v = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при $n < 4 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$ и $N_v = n/2$ при $n \geq 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, 5 — $E_{ac} = 15$ эВ.

по кристаллу. Таким образом, в выражении (3) для времени релаксации величина Z должна быть принята равной 0.14, а не 1 или 2, как считалось ранее. Из-за малости заряда, локализованного на вакансиях, и большой диэлектрической проницаемости РЬТе роль кулоновского потенциала вакансий в рассеянии носителей заряда оказывается второстепенной во всем интервале концентрации (рис. 1, кривая 1), если последовательно придерживаться линии, что одна вакансия дает два свободных носителя [10,11], т.е. $N_v = n/2$. Наши расчеты показывают, что роль кулоновского потенциала вакансий в рассеянии носителей заряда в РЬТе может стать заметной только в сильно компенсированных кристаллах, когда суммарная концентрация вакансий намного больше концентрации свободных носителей заряда (рис. 1, кривая 2). В связи с этим для удовлетворительного количественного объяснения экспериментальных результатов при низких концентрациях электронов (главным образом — достаточно четко выраженной тенденции к некоторому уменьшению μ_H при уменьшении n ниже уровня 10^{17} см^{-3}) приходится, однако, допустить, что однозначная взаимосвязь между концентрациями носителей и вакансий существенно нарушается. Наилучшее совпадение результатов расчета с экспериментом получено нами при условии, что при $n < 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ концентрация N_v стабилизируется на уровне $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, и при значениях параметров $U_{vc} = 3 \cdot 10^{-34} \text{ эрг/см}^3$ и $E_{ac} = 15$ эВ (рис. 1, кривая 6). Интересно отметить, что величина минимального уровня дефектности кристаллов РЬТе

порядка $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, которая следует из вышеприведенного анализа, прекрасно коррелирует с типичной концентрацией дырок в выращиваемых из расплава кристаллах [16–18]. Необходимо обратить внимание на то, что величина $E_{ac} = 15$ эВ, предложенная нами в результате анализа низкотемпературной подвижности электронов, намного меньше общепринятого значения $E_{ac} = 24$ эВ, которое было найдено из анализа высокотемпературной подвижности [1–6]. А это значит, что роль акустического деформационного потенциала в процессах рассеяния носителей заряда в РЬТе систематически завышалась.

При 300 К проще всего оценить вклад в процессы рассеяния от полярных оптических фононов, поскольку формируемая ими подвижность может быть рассчитана без подгоночных параметров. Как видно из рис. 2 (кривая 1), этот вклад достаточно существен при малых концентрациях носителей, что согласуется с уже известными результатами ([1–5] и др.).

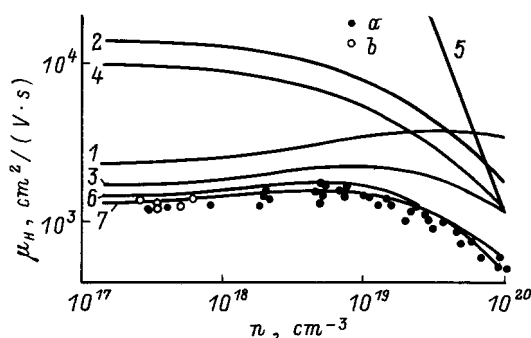


Рис. 2. Зависимость холловской подвижности электронов μ_H от их концентрации n ($T = 300$ К) по данным: a — [2], b — нашим. Линии — расчет для механизмов рассеяния: 1 — поляризационное на оптических фононах (PO); 2 — на деформационном потенциале акустических фононов (DA); 3 — PO + DA; 4 — на деформационном потенциале оптических фононов (DO) по формулам (5), (9); 5 — DO по формуле (10); 6 — PO + DA + DO, DO — по формуле (10); 7 — PO + DA + DO, DO — по формулам (5), (9).

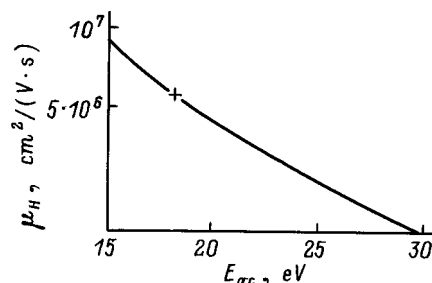


Рис. 3. Расчет холловской подвижности электронов при 4.2 К и $n = 1.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ при их рассеянии деформационным потенциалом акустических фононов в зависимости от величины E_{ac} . Значком отмечено максимальное экспериментальное значение подвижности электронов в РЬТе при 4.2 К.

При совместном действии полярных оптических фононов и акустического деформационного потенциала расчетные значения подвижности при значении $E_{ac} = 15$ эВ оказываются значительно больше, чем экспериментальные (рис. 2, кривая 3). Формально их можно согласовать, полагая E_{ac} равным 24 эВ, как это и делалось раньше [1–7]. Однако трудно найти удовлетворительное объяснение столь значительному увеличению константы деформационного потенциала с ростом T , так как обычно она считается независимой от температуры [1–5]. Скорее, приведенные оценки указывают на недостаточность учета этих двух механизмов рассеяния для правильного объяснения процесса формирования подвижности носителей заряда в РbТе при высоких температурах. Логичнее будет сделать вывод, что в этих условиях существенным становится также рассеяние на оптическом деформационном потенциале.

Для учета возможной роли последнего использовались различные выражения для времени релаксации: стандартное (5), в котором согласно [8], (принимая $m = 0$)

$$\tau_{0,o} = 2\hbar^2 a^2 \rho (\hbar\omega_0)^2 / \pi (2m_n k_0 T)^{3/2} E_{oc}^2, \quad K_o = E_{ov} / E_{oc}, \quad (9)$$

и полученное в работе [19]

$$\tau_l^{-1} = (2m_n)^{3/2} \Omega k_0 T \varepsilon^{3/2} (1 + \varepsilon/\varepsilon_g)^{3/2} \times C^2 / \pi M \hbar^4 \omega_0^2 \varepsilon_g (1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g), \quad (10)$$

где a — постоянная решетки, ρ — плотность кристалла, ω_0 — частота оптического фонона, M — приведенная масса ионов, E_{oc} , E_{ov} — константы оптического деформационного потенциала для c - и v -зон, C — матричный элемент, взятый по волновым функциям c - и v -зоны, Ω — объем элементарной ячейки.

Использование выражений (9), (10) для рассматриваемого времени релаксации в комбинации с полярными оптическими фононами и акустическим деформационным потенциалом позволяет достичь удовлетворительного согласия теории с экспериментом (рис. 2, кривые 6, 7). Для этого при использовании для $\tau_0(x)$ выражений (5) и (9) величина E_{oc} должна быть положена равной 26 эВ (рис. 2, кривая 7), при использовании выражения (10) величина C — равной $4 \cdot 10^8$ эВ/см (рис. 2, кривая 6). И в том и в другом случае при исследуемой температуре вклад оптического деформационного потенциала в формирование подвижности носителей заряда при высокой их концентрации оказывается наиболее существенным (см. рис. 2, кривые 1, 2 и 4, 5).

Заключение

Доминирующими механизмами рассеяния носителей заряда в РbТе являются рассеяние на вакансиях и на тепловых колебаниях кристаллической решетки.

Вакансионный механизм рассеяния реализуется главным образом через рассеяние на короткодействующем потенциале вакансий, доминирующем при низких температурах и высоких концентрациях носителей заряда. Его составляющая, связанная с кулоновским потенциалом, подавлена из-за сильной дelokализации связанного с вакансией электрического заряда и высокой диэлектрической проницаемости и практически не играет никакой роли в рассеянии носителей в некомпенсированных кристаллах.

Роль акустических колебаний решетки в процессах рассеяния носителей заряда велика при 4.2 и 300 К. При температурах, близких к комнатной, существенный вклад в исследуемые процессы вносят также оптические колебания кристаллической решетки. При низких концентрациях носителей эти колебания влияют на процессы рассеяния последних преимущественно через полярную составляющую, при высоких — через оптический деформационный потенциал, роль которого в суммарном рассеянии носителей становится наиболее существенной.

Список литературы

- [1] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца* PbTe, PbSe, PbS (М., Наука, 1968).
- [2] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. *Phys. St. Sol. (b)*, **43**, 11 (1971); **43**, 453 (1971).
- [3] W. Szymanska. *Postepy Fizyki*, **26**, 5 (1975).
- [4] L. Palmetshofer, K.H. Gresslehner, L. Ratschbacher, A. Lopez-Otero. *Lect. Not. Phys.*, **152**, 391 (1982).
- [5] G. Nimtz, B. Schlicht. *Narrow-gap semiconductors* (Berlin, 1985) p. 1.
- [6] R. Granger, A. Lasbley, C.M. Pelletier, S. Rolland. *J. Physique*, **46**, 1185 (1985).
- [7] Н.П. Гавалешко, П.Н. Горлей, В.А. Шендеровский. *Узкозонные полупроводники: Получение и физические свойства* (Киев, Наук. думка, 1984).
- [8] Б.М. Аскеров. *Электронные явления переноса в полупроводниках* (М., Наука, 1985).
- [9] O.A. Pankratov, P.P. Povarov. *Sol. St. Commun.*, **66**, 847 (1988).
- [10] K. Cuff, M. Ellet, C. Kuglin, C. Williams. *Proc. Int. Conf. Phys. Semicond.* (Paris, 1964) p. 690.
- [11] E. Palik, D. Mitchell, J. Zemel. *Phys. Rev. A*, **135**, 763 (1964).
- [12] Д.М. Заячук, В.И. Микитюк, П.М. Старик. *ФТП*, **20**, 1679 (1986).
- [13] H. Kawamura. *Lect. Not. Phys.*, **150**, 470 (1980).
- [14] G. Dionne, J.C. Wooley. *Phys. Rev. B*, **6**, 3898 (1972).
- [15] V. Houston, R.E. Strakna, H.S. Belson. *J. Appl. Phys.*, **39**, 3913 (1968).
- [16] N.J. Parada, G.W. Pratt. *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 180 (1969).
- [17] Б.А. Волков, О.А. Панкратов. *ЖЭТФ*, **88**, 280 (1985).
- [18] Д.М. Заячук, В.И. Микитюк, В.А. Шендеровский. *Доповіді АН УССР, Сер. А, № 8*, 57 (1990).
- [19] Л.Я. Морговский, Ю.И. Равич. *ФТП*, **5**, 974 (1971).

Редактор Т.А. Полянская

On dominating mechanisms of carrier scattering in lead telluride

D.M.Zayachuk

Chernovtsy State University,
274012 Chernovtsy, the Ukraine

Abstract A critical analysis of modern state of the problem of dominant mechanisms of carrier scattering in PbTe crystals is made. It has been shown that most authors of papers devoted to this problem exaggerate contributions of Coulomb potential of vacancies at low temperatures and of acoustical deformation potential at high temperatures to the processes of carrier scattering. Contribution of the optical vibrations of crystal lattice to scattering processes at high temperatures was unjustifiably ascribed solely to the influence of a polar component. It is shown that the optical deformation potential has considerable influence on processes of carrier scattering alongside with polar optical phonons, its contribution to these processes at room temperature being larger than that of the acoustical deformation potential.