

О.П. Малик¹, Г.А. Ільчук², В.М. Родич²

Локальна взаємодія електронів з потенціалом дефектів у кристалах CdTe:Cl

¹Національний університет «Львівська політехніка», кафедра напівпровідникової електроніки, пл. Св. Юра 1, 79013, Львів, Україна, тел. 258-26-27, e-mail: omalyk@mail.lviv.ua

²Національний університет «Львівська політехніка», кафедра фізики, вул. Ст. Бандери 12, 79013, Львів, Україна, тел. 258-23-42, e-mail: gilchuk@polynet.lviv.ua

Розглянуто процеси розсіяння електронів на близькодючому потенціалі обумовленому взаємодією з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, полем статичної деформації, іонізованими домішками в зразках CdTe, легованих хлором до концентрації $\sim 5 \times 10^{16} \div 5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Розраховано температурну залежність рухливості та Холл-фактора електронів в інтервалі 25 ÷ 590 К.

Ключові слова: явища переносу, розсіяння носіїв заряду, телурид кадмію

Стаття поступила до редакції 11.08.2014; прийнята до друку 15.09.2014.

Вступ

Телурид кадмію з домішками хлору знаходить широке застосування при виготовленні високочутливих не охолоджуваних детекторів ядерного випромінювання [1, 2]. Подальший прогрес в розробленні приладів, створених на основі телуриду кадмію, вимагає детального моделювання фізичних параметрів цього матеріалу. Одним з таких параметрів є рухливість носіїв заряду. Дослідження залежності рухливості електронів від температури в CdTe, легованому хлором, представлені в роботі [3]. Теоретична інтерпретація цих даних проводилася в наближенні часу релаксації. Особливістю цього методу є використання для опису явищ переносу в цьому матеріалі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. В цих моделях припускалося, що носій взаємодіє з усім кристалом (електрон-фононна взаємодія) або носій взаємодіє з потенціалом зарядженої домішки, радіус дії якого $\sim 20 - 100a_0$ (a_0 – стала ґратки). Однак, таке припущення містить наступні протиріччя: а) воно суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу; б) воно суперечить атомістичному принципу, згідно з яким носій взаємодіє (відає енергію) тільки з одним атомом, а не з багатьма атомами одночасно. Крім того, для

дефектів з потенціалом взаємодії $U \approx \frac{1}{r^n}$ ($n = 1, 2$)

на відстанях $\sim 10 a_0$ потенціал стає величиною другого порядку малості, тоді як зазначені вище моделі розглядаються в першому (борнівському) порядку теорії збурень. З іншого боку, в роботах [4-7] були запропоновані близькодючі моделі розсіяння носіїв заряду в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^V$, в яких вище вказані недоліки були відсутні. При цьому припускалося, що носій взаємодіє з потенціалом дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки. Метою теперішньої роботи є застосування цього підходу для опису процесів розсіяння електронів на різних типах дефектів кристалічної ґратки в CdTe.

I. Теорія

Згідно близькодючих моделей розсіяння в напівпровідниках зі структурою цинкової обманки ймовірності переходу носія заряду з стану k в стан k' , викликаного взаємодією з полярним оптичним (ПО), неполярним оптичним (НПО), п'єзооптичним (ПОП), п'єзоакустичним (ПАК), акустичним фононами (АК), іонізованою (ІД) домішкою та потенціалом статичної деформації (СД) матимуть вид [4, 5]:

$$W_{II}(k, k') = \frac{64 p^7 g_{PO}^{10} e^4}{225 e_0^2 a_0^4 G} \frac{M_{Cd} + M_{Te}}{M_{Cd} M_{Te}} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{LO})] + \right. \\ \left. + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (1)$$

$$W_{IIO}(k, k') = \frac{p^3 E_{NPO}^2}{288 a_0^2 G} \frac{M_{Cd} + M_{Te}}{M_{Cd} M_{Te}} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{LO})] + \right. \\ \left. + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (2)$$

$$W_{III}(k, k') = \left(\frac{32}{75} \right)^2 \frac{p^9 e^2 e_{14}^2 g_{PZ}^{10}}{e_0^2 G} \frac{M_{Nd} + M_{Te}}{M_{Cd} M_{Te}} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} N_{LO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{LO}) + \right. \\ \left. + (N_{LO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{LO}) + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(e' - e - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(e' - e + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (3)$$

$$W_{IAE}(k, k') = \frac{128 p^7 e^2 e_{14}^2 a_0^2 g_{PZ}^{10} k_B T}{225 e_0^2 \mathbf{h} G [M_{Cd} + M_{Te}]} \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}} \right)^2 d(e' - e); \quad (4)$$

$$W_{AE}(k, k') = \frac{p^3 k_B T E_{AC}^2}{144 \mathbf{h} G [M_{Cd} + M_{Te}]} \left(\frac{1}{c_{||}} + \frac{2}{c_{\perp}} \right)^2 d(e' - e); \quad (5)$$

$$W_{IA}(k, k') = \frac{p e^4 Z_i^2 N_{IA} g_{z}^4 a_0^4}{2 e_0^2 \mathbf{h} V} d(e' - e); \quad (6)$$

$$W_{NA}(k, k') = \frac{2^5 3^4 p^3 C^2 a_0^6 e^2 e_{14}^2 N_{NA}}{V e_0^2 \mathbf{h}} \frac{1}{q^2} d(e' - e), \quad (7)$$

де M_{Cd}, M_{Te} – маси атомів; G – кількість елементарних комірок в об'ємі кристалу; e_0 – діелектрична стала; e – заряд електрона; k_B – стала Больцмана; \mathbf{h} – стала Планка; N_{LO}, N_{TO} – число поздовжніх (LO) та поперечних (TO) фононів з частотою w_{LO} та w_{TO} відповідно; e_{14} – компонента

п'єзоелектричного тензора; $c_{||}, c_{\perp}$ – відповідні швидкості звуку; V – об'єм кристалу; N_{ID}, N_{CD} – концентрація іонізованих атомів та центрів статичної деформації відповідно; Z_i – кратність іонізації домішки; E_{AC}, E_{NPO} – акустичний та оптичний потенціали деформації відповідно; g_{PO}, g_{PZ}, g_{II} – підгоночні параметри, що визначають радіус дії близькодіючого потенціалу дефекту ($R = g a_0, 0 \leq g_{PO}, g_{PZ} \leq 0.86, 0 \leq g_{II} \leq 1$); $q = |k' - k|$; $C \gg 0.1$.

Таблиця 1

Параметри CdTe зі структурою цинкової обманки

Параметр матеріалу	Значення	Література
Постійна ґратки, a_0 (м)	6.481×10^{-10}	
Ширина забороненої зони, E_g (еВ)	$1.65 - 5.35 \times 10^{-4}$ Т	[9]
Енергетичний еквівалент матричного елемента, E_p (еВ)	21	[10]
Густина, r_0 (кг / м ³)	5.75×10^3	[11]
Спін-орбітальне розщеплення, еВ	0.92	[12]
Оптичний потенціал деформації, E_{NPO} (еВ)	22	[13]
Частота поперечних оптичних фононів, ω_{TO} (рад/с)	2.63×10^{13}	[14, 15]
Решіткова діелектрична стала, ϵ_L	3.1	[14, 15]
Високочастотна діелектрична стала, ϵ_{∞}	7.28	[14, 15]
Акустичний потенціал деформації, E_{AC} (еВ)	1.85	[16]
Пружні константи, Н/м ²	$C_1 = 6.32 \times 10^{10}$ $C_t = 1.538 \times 10^{10}$	[17, 18]
П'єзоелектрична стала, e_{14} (Кл / м ²)	$0.03457 - 1.39 \times 10^{-5}$ Т	[19, 20]

Слід зазначити, що сильна степенева залежність параметрів g_{PO}, g_{PZ}, g_{II} різко обмежує можливість вибору їх чисельного значення.

Параметри напівпровідника, які використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 1.

Обчислення компонентів тензора провідності проводилося на основі формалізму точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [8]. Використовуючи цей формалізм можна отримати додатковий підгочний параметр $g_{SS}N_{CD}$ (було покладено $g_{SS} = 1$) для CD- механізму розсіяння.

II. Порівняння теорії та експерименту

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в роботі [3] для двох зразків телуриду кадмію, легованих хлором до концентрації 5×10^{16} (зразок А)

Таблиця 2

Параметри g для різних механізмів розсіяння

Зразок	γ_{PO}	γ_{PZ}	γ_{II}	$\gamma_{SS} N_{CD} \times 10^{-16} \text{ cm}^{-3}$
А	0,67	0,47	1,0	7,5
Б	0,60	0,10	1,0	10,5

та $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (зразок Б) відповідно. Рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності $n = I/eR$, де R – експериментальне значення коефіцієнта Холла.

Теоретичні криві $m(T)$ для CdTe представлені на рис. 1 а, б. Суцільні лінії представляють криві, розраховані на основі близькодючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 2 представлені отримані значення параметрів розсіяння g для різних механізмів розсіяння. Штриховими лініями представлені криві, розраховані в наближенні часу релаксації. Відзначимо, що при розрахунках цих кривих використовувалися однакові

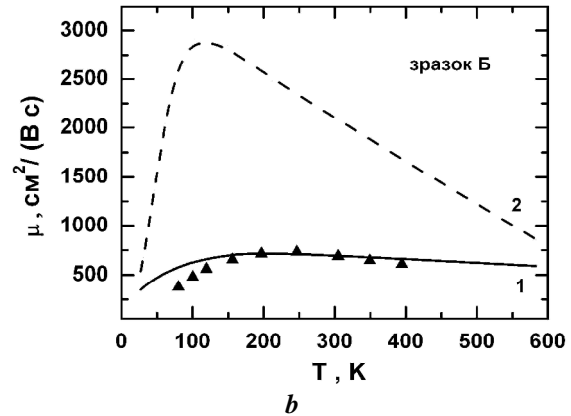
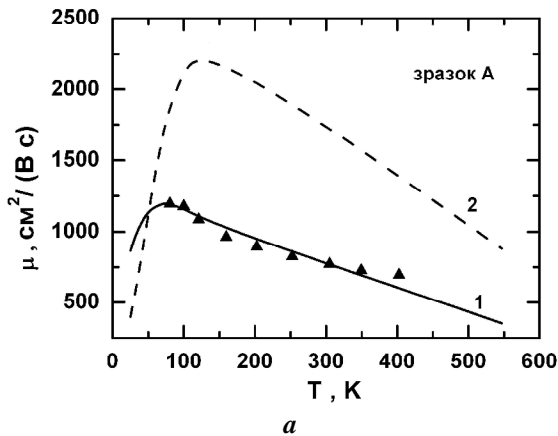


Рис. 1. Температурні залежності рухливості електронів в CdTe, легованому Cl. 1 – близькодючі моделі розсіяння; 2 – наближення часу релаксації.

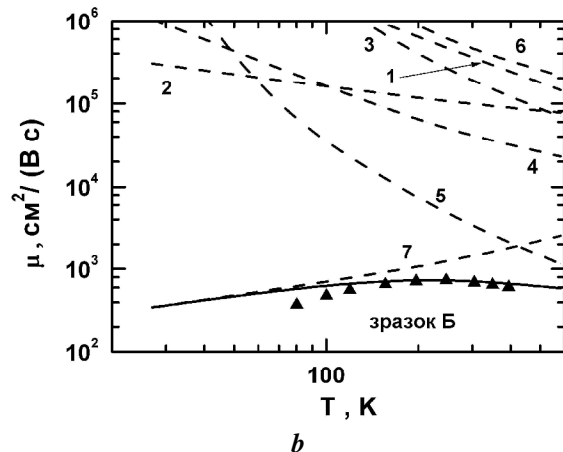
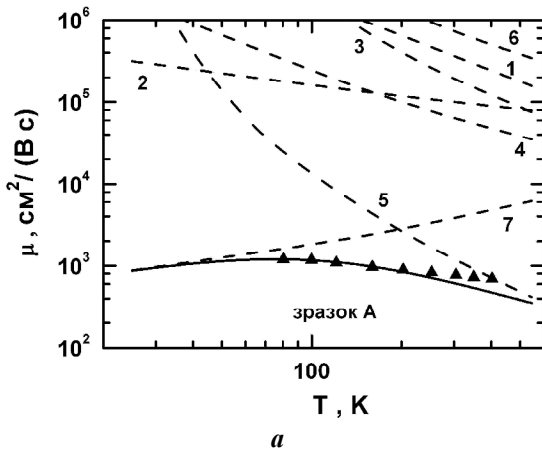


Рис. 2. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електронів в CdTe, легованому Cl. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння, 1,2,3,4,5,6,7 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, CD механізми розсіяння відповідно.

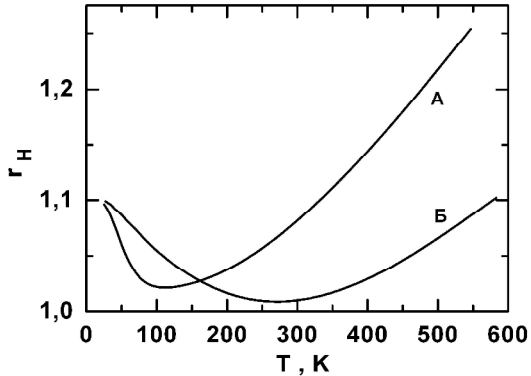


Рис. 3. Температурна залежність фактору Холла електронів в CdTe, легованому Cl.

механізми розсіяння носіїв заряду. Видно, що у всьому розглянутому інтервалі температур близькодійні моделі розсіяння дають достатньо добре узгодження теорії та експерименту, тоді як наближення часу релаксації дає відхилення теорії від експерименту в $2 \div 5$ разів. Це свідчить про те, що близькодійні моделі більш адекватно описують процеси розсіяння електронів в телуриді кадмію у порівнянні з наближенням часу релаксації.

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 2 а, б точковими лініями представлені відповідні залежності. Видно, що за низьких температур ($T < 100\text{K}$) основним механізмом розсіяння є розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації (крива 7). За більш високих температур ($T > 100\text{K}$) домінуючим стає розсіяння на полярних

оптичних фононах (крива 7). Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на неполярних оптичних фононах, розсіяння на п'єзооптичних та п'єзоакустичних фононах, акустичних фононах та іонізованих домішках – дають знехтувано малий внесок.

На основі отриманих параметрів розсіяння була розрахована температурна залежність Холл- фактору електронів, яка представлена на рис. 3. Видно, що мінімуми на цих кривих відповідають переходу від одного механізму розсіяння за низьких температур (СД – розсіяння) до іншого механізму за високих температур (ПО – розсіяння). Цей перехід спостерігається при тим вищій температурі, чим більша концентрація центрів статичної деформації.

Висновок

На основі принципу близькодії розглянуто процеси розсіяння електронів на різного типу дефектах ґратки в кристалах CdTe, легованому Cl. Встановлено достатньо добру узгодженість теорії та експериментальних даних у дослідженому інтервалі температур.

Малик О.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент.

Ільчук Г.А. – доктор фізико-математичних наук, професор.

Родич В.М. – інженер I-категорії.

- [1] Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук, Є.В. Корбут, М.М. Борисюк, Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості (Іван Федоров, Київ, 2000).
- [2] С.І. Будзуляк, О.П. Лоцько, Н.Д. Вахняк, С.М. Калитчук, Д.В. Корбутяк, Фізика і хімія твердого тіла 13(2), 351 (2012).
- [3] Н.В. Агринская, М.В. Алексеенко, О.А. Матвеев, ФТП.15, 1029 (1981).
- [4] О.П. Malyk, Mater. Sci. & Engineering B. 129, 161 (2006).
- [5] О.П. Malyk, Phys. Stat. Solidi C. 6, S86 (2009).
- [6] О.П. Malyk, Diamond Relat. Mater. 23, 23 (2012).
- [7] О.П. Malyk, Can. J. Phys. doi: 10.1139/cjp-2013 (2014).
- [8] О.П. Malyk, WSEAS Trans. Math. 3, 354 (2004).
- [9] G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Casselman, J. Appl. Phys. 53(10), 7099 (1982).
- [10] R. Dornhaus, G. Nimtz, Springer Tracts Mod. Phys. 166 (1983).
- [11] EMIS Datareviews Series No 3 : [J. Brice, P. Capper].- London: INSPEC, (1987).
- [12] G.G. Wepfer, T.C. Collins, R.N. Euwema, Phys. Rev. B. 4(4), 1296 (1971).
- [13] W. Pötz, P. Vogl, Phys. Rev.B. 24(4), 2025 (1981).
- [14] J. Baars, F. Sorger, Solid State Comm. 10(9), 875 (1972).
- [15] M. Grynberg, R. Le-Toullec, M. Balkanski, Phys. Rev. B. 9(2), 517 (1974).
- [16] G. Weill, C. Verie, C. R. Acad. Sci. 263(6), 463 (1966).
- [17] Ю.Х. Великов, А.П. Русаков, ФТТ. 13(4), 1157 (1971).
- [18] D.L. Rode, J.D. Wiley, Phys. Stat. Sol.(b). 56(2), 699 (1973).
- [19] Landolt- Bornstein Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. (New Series). V. III/11. – Berlin: Springer Verlag, (1984).
- [20] D. Berlincourt, H. Jaffe, L.R. Shiozawa, Phys. Rev. 129(3), 1009 (1963).

О.Р. Malyk¹, Н.А. Іл'чук², V.M. Rodych²

The Local Electron Interaction with the Defect Potential in CdTe:Cl Crystals

¹*Lviv Polytechnic National University, Semiconductor Electronics Department, 1 St. Yura square, 79013, Lviv, Ukraine*

²*Lviv Polytechnic National University, Physics Department, 12 Stepan Bandera Str., 79013, Lviv, Ukraine*

The processes of the electron scattering on the short-range potential caused by interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons, static strain, ionized impurities in Cl-doped CdTe samples with impurity concentration $\sim 5 \times 10^{16} \div 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ are considered. The temperature dependences of the electron mobility and Hall factor in temperature range 25 \div 590 K are calculated.

Keywords: transport phenomena, charge carrier scattering, cadmium tellurium.