

УДК 539.23: 537.311

Л.І. Никируй

Інтерференційні ефекти у кристалах халькогенідів свинцю

*Фізико-хімічний інститут Прикарпатського університету імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, м. Івано-Франківськ, 76000*

Проведено розрахунок інтерференційного доданка, як уточнення до розрахунку сумарного часу релаксації τ при одночасній дії декількох механізмів розсіювання носіїв у халькогенідах свинцю. Підтверджено справедливість застосування правила Маттісена для розрахунку τ .

Ключові слова: механізми розсіювання, інтерференційний доданок, акустичні, оптичні фонони.

Стаття поступила до редакції 27.10.2002; прийнята до друку 23.01.2003

Відомо, що у напівпровідникових кристалах для будь-якого концентраційного чи температурного діапазону можна виділити переважаючий механізм розсіювання, який в основній мірі визначає електричні чи інші властивості матеріалу [1]. Також існують області, у яких перекривається вплив кількох механізмів розсіювання, кожен з яких претендує на роль домінуючого. Але у всіх вказаних випадках крім домінуючого механізму розсіювання, хоча і менш помітний, але все-таки важливий внесок і інших видів розсіювання. Тому реально для розрахунку явищ переносу слід враховувати одночасну дію кількох різних механізмів розсіювання носіїв струму. У зв'язку із цим виникає питання про обчислення рухливості та інших кінетичних коефіцієнтів при спільній дії декількох механізмів. Ця задача вирішується за допомогою правила Маттісена, яке для сумарного часу релаксації τ має наступний вигляд [2]

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i}, \quad (1)$$

тут τ_i – час релаксації для i -го механізму.

Однак, для реалізації даного правила повинна виконуватись умова альтернативності механізмів розсіювання носіїв струму. Це означає, що електрон в одному акті взаємодії розсіюється лише з врахуванням одного з декількох можливих механізмів. Тільки тоді загальна ймовірність розсіювання буде рівна сумі ймовірностей розсіювання для кожного окремого механізму:

$$W = \sum_i W_i, \quad (2)$$

що і призводить до правила (1).

Співвідношення (2) справедливе незалежно від того, чи можна ввести відповідний час релаксації для того чи іншого механізму розсіювання; воно не

залежить також від яких-небудь припущень відносно ізоτροпії системи.

Проте, в загальному випадку [3], при одночасній взаємодії носіїв струму з декількома потенціалами виникає потреба враховувати інтерференційні ефекти, що призводить до порушення правила Маттісена. З цих позицій у роботі проводиться аналіз розрахунку інтерференційного доданка з врахуванням двох механізмів розсіювання носіїв: на деформаційних потенціалах оптичних і акустичних фононів [4-8].

Для визначення ймовірності розсіювання для цих двох процесів потрібно розрахувати матричний елемент оператора збурення, який являє собою суму H'_{ak} і H'_{opt} на хвильових функціях незбуреної задачі.

Хвильова функція системи (електрон + коливання ґратки) без врахування взаємодії H'_{ak} і H'_{opt} має вигляд:

$$\Psi_{\vec{k}, N(\vec{q}, s)_{ak}, N(\vec{q}, s)_{opt}} = \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \prod_{\vec{q}s} \Psi_{N(\vec{q}, s)_{ak}} \prod_{\vec{q}s} \Psi_{N(\vec{q}, s)_{opt}}, \quad (3)$$

де $\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\vec{r}}$, а $N = G^3$ – число атомів

в основній області; $\Phi_{N_{ak}} = \prod_{\vec{q}s} \Psi_{N(\vec{q}, s)_{ak}}$ і

$\Phi_{N_{opt}} = \prod_{\vec{q}s} \Psi_{N(\vec{q}, s)_{opt}}$ – хвильові функції, що описують

відповідно акустичні і оптичні коливання ґратки.

Запишемо тепер явний вигляд операторів H'_{ak} і H'_{opt} :

$$H'_{ak} = i \sum_q \sum_{s=1}^3 E_{\alpha\beta} q_\alpha \zeta_\beta \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\vec{q},s)}} \times \\ \times \left(b(\vec{q},s) e^{i\vec{q}\vec{r}} - b(\vec{q},s)^* e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right) \quad (4)$$

$$H'_{opt} = \sum_{s \geq 4} \sum_q E_{\alpha\beta}^{(0)}(s) n_\beta \zeta_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\vec{q},s)}} \times \\ \times \left(b(\vec{q},s) e^{i\vec{q}\vec{r}} - b(\vec{q},s)^* e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right) \quad (5)$$

де $b(\vec{q},s)$ – комплексні нормальні координати.

Перепишемо для зручності оператори H'_{ak} і H'_{opt} наступним чином:

$$H'_{ak} = \sum_{q,s} \left(H'_{ak}(\vec{q},s) b(\vec{q},s) e^{i\vec{q}\vec{r}} - \right. \\ \left. - H'_{ak}^*(\vec{q},s) b(\vec{q},s)^* e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right) \quad (6)$$

$$H'_{opt} = \sum_{q,s} \left(H'_{opt}(\vec{q},s) b(\vec{q},s) e^{i\vec{q}\vec{r}} - \right. \\ \left. - H'_{opt}^*(\vec{q},s) b(\vec{q},s)^* e^{-i\vec{q}\vec{r}} \right) \quad (7)$$

де

$$H'_{ak}(\vec{q},s) = i E_{\alpha\beta} q_\alpha \zeta_\beta \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\vec{q},s)}} \quad (8)$$

$$H'_{opt}(\vec{q},s) = E_{\alpha\beta}^{(0)}(s) n_\beta \zeta_\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2MG\omega(\vec{q},s)}} \quad (9)$$

А тепер перейдемо до обчислення матричного елемента $\langle \vec{k}', N'_{ak}, N'_{opt} | H'_{ak} + H'_{opt} | \vec{k}, N'_{ak}, N'_{opt} \rangle$:

$$\langle \vec{k}', N'_{ak}, N'_{opt} | H'_{ak} + H'_{opt} | \vec{k}, N'_{ak}, N'_{opt} \rangle = \\ = \langle \vec{k}', N'_{ak}, N'_{opt} | H'_{ak} | \vec{k}, N'_{ak}, N'_{opt} \rangle + \\ + \langle \vec{k}', N'_{ak}, N'_{opt} | H'_{opt} | \vec{k}, N'_{ak}, N'_{opt} \rangle \quad (10)$$

Отже, маємо 2 доданки. Розглянемо перший з них:

$$\langle \vec{k}', N'_{ak}, N'_{opt} | H'_{ak} | \vec{k}, N'_{ak}, N'_{opt} \rangle = \\ = \sum_s \sum_q \left[H'(\vec{q},s) I_1 + H'^*(\vec{q},s) I_2 \right] \quad (11)$$

де

$$I_1 = \int \Psi_{\vec{k}}^* e^{i\vec{k}\vec{r}} \Psi_{\vec{k}} d\vec{r} \int \Phi_{N'_{ak}} b(\vec{q},s) \Phi_{N'_{ak}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} \times \\ \times \int \Phi_{N'_{opt}}^* \Phi_{N'_{opt}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} \quad (12)$$

$$I_2 = \int \Psi_{\vec{k}}^* e^{-i\vec{k}\vec{r}} \Psi_{\vec{k}} d\vec{r} \int \Phi_{N'_{ak}} b^*(\vec{q},s) \Phi_{N'_{ak}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} \times \\ \times \int \Phi_{N'_{opt}}^* \Phi_{N'_{opt}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} \quad (13)$$

Тепер проаналізуємо інтеграли від добутку хвильових функцій оптичних фононів. Враховуючи ортогональність і нормованість хвильових функцій, що описують коливання ґратки, ми отримуємо:

$$\int \Phi_{N'_{opt}}^* \Phi_{N'_{opt}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} = 1 \text{ при } N'_{opt} = N_{opt},$$

або

$$\int \Phi_{N'_{opt}}^* \Phi_{N'_{opt}} \prod_{\vec{q},s} dx_{\vec{q},s} = 0 \text{ - в усіх інших}$$

випадках.

Це означає, що імовірність розсіювання на акустичних фононах відмінна від нуля лише в тому випадку, коли $N'_{opt} = N_{opt}$, що має місце при відсутності розсіювання на оптичних фононах. Аналогічний результат ми отримуємо і для розсіювання на оптичних фононах, коли розглядаємо другий доданок: імовірність розсіювання на оптичних фононах відмінна від нуля лише в тому випадку, коли $N'_{ak} = N_{ak}$, що у свою чергу має місце при відсутності розсіювання на акустичних фононах. Отже, електрон зазнає розсіювання або на оптичних, або на акустичних коливаннях ґратки. Даний висновок означає, що ці процеси є альтернативними і для сумарного розсіювання на оптичних та акустичних фононах слід використовувати правило Маттісена.

Автор висловлює подяку доктору фізико-математичних наук, професору кафедри фізики твердого тіла Прикарпатського університету **Рувінському Марку Ауновичу** за надані консультації та цінні зауваження.

Никурий Л.І. – вчений секретар Фізико-хімічного інституту.

- [1] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, Н.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbSe, PbTe, PbS* // М.: Наука, 384 с. (1968).
- [2] Б.М. Аскеров. *Кинетические эффекты в полупроводниках*. Наука, Л. 112 с. (1970).
- [3] Ю. Каган, А.П. Жернов. К теории электропроводности металлов с немагнитными примесями // ЖЭТФ, 50(4), сс. 1107-1123 (1966).
- [4] В.Л. Волков. Электрон-фононное взаимодействие в узкощелевых полупроводниках // ФТП, 12(2), сс. 396-398 (1978).
- [5] В.Л. Волков, И.В. Кучеренко, В.Н. Моисеенко, А.П. Шотов. Электрон-фононное взаимодействие в кристаллах Pb1-XSnXSe (x=0,06) p-типа // ФТП, 9(9), сс. 1824-1826 (1975).

- [6] S. Katayama. Anomalous resistivity in structural phase of IV-VI compound: p-SnTe // *Solid State Commun.*, **19**(4), pp. 381-383 (1976).
- [7] K.L.I. Kobayashi, Y. Kato, S. Katayama, K.F. Komatsubara. Resistance anomaly due to displacive phase transition in SnTe // *Solid State Commun.*, **17**(7), pp. 875-878 (1975).
- [8] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников*. Наука, М. 525 с. (1978).

L.I. Nykyruy

Interference Effects on Lead Chalkogenides Crystals

*Physical-Chemical Institute at the Vasyk Stefanyk Prekarpathian University,
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000*

It is calculate the interference item, as sum time of relaxation τ definition at the simultaneous realization any scattering mechanisms on lead chalkogenides crystals. The Mattisen's rule used is confirmation for τ calculate.