

АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ

На правах рукопису

БОНДАРЕНКО ВІКТОР ВОЛОДИМИРОВИЧ

ВПЛИВ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ ТА МЕХАНІЗМІВ
РОЗСІЯННЯ НА КІНЕТИЧНІ ПРОЦЕСИ В ОБ'ЄМНИХ ТА
ШАРОВИХ СТРУКТУРАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ СВИНЦЮ

01.04.07 – фізика твердого тіла

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття вченого ступеня

кандидата фізико-математичних наук

КИЇВ – 1993

10 27.257

Робота виконана в Інституті фізики АН України

- Науковий керівник - доктор фізико-математичних наук,
професор Шендеровський В.А.
- Офіційні опоненти - доктор фізико-математичних наук,
професор Васько Ф.Т.
- доктор фізико-математичних наук,
професор Стахіра И.М.
- Провідна організація - Інститут фізики напівпровідників
АН Литви

Захист відбудеться "27" травня 1993 року о ___ годині
на засіданні Спеціалізованої ради К 016.04.01 при Інституті
фізики АН України

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Інституту
фізики АН України

Відгуки в двох примірниках, завірені печаткою установи,
просимо надсилати за адресою: 252650, Київ-28, проспект Науки,
46, Інститут фізики АН України, вченому секретареві Спец. ради
К 016.04.01 Пржонській О.В. тел. 265-67-13.

Автореферат розіслано "27" квітня 1993 року

Вчений секретар Спеціалізованої ради
кандидат фізико-математичних наук *О. Пржонська* Пржонська О.В.

ЛНБ ім. В. Стефаніка
АН України

ЛНБ України ім. В. Стефаніка



00803015 (H)

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Сполуки і тверді розчини халькогенідів свинцю та олова як об'ємні, так і надгратки та квантові ями на їх основі, є важливими об'єктами для сучасного приладобудування і для фундаментальних досліджень. Ці напівпровідники мають низку виняткових властивостей, а саме, контрольована ширина забороненої зони, велика рухливість носіїв в об'ємних матеріалах, висока чутливість до зовнішніх впливів, що дозволяє успішно їх використовувати для створення нових високоєфективних приладів для спектроскопії високої роздільної здатності, систем контролю забрудненості атмосфери, ІЧ-лазерів та детекторів. A_4B_6 -надгратки та структури з багатьма квантовими ямами є хорошою базою для створення ефективних приладів ІЧ-оптоелектроніки, котрі працюють при високих температурах, а загалом і для створення цілком нових приладів. Надгратки A_4B_6 демонструють цілий ряд рідкісних явищ, пов'язаних з особливостями їх зонної структури та іншими фізичними властивостями. Наприклад, дислокації невідповідності в надгратках формують квадратну сітку на межах сусідніх шарів, що, як припускається, може бути причиною дуже високої температури переходу в надпровідну фазу (біля 5,5 К), котра є найвищою для відомих напівпровідників.

Таким чином, великі можливості згаданих приладів та вимоги до їх параметрів висувають задачі технологічного і дослідницького характеру. Слід відмітити, що електронна енергетична структура в халькогенідах свинцю дуже складна. Закон дисперсії енергії носіїв визначається взаємодією шести зон і є сильно непараболічним. Оскільки в розрахунках майже у всіх роботах використовується спрощена двозонна модель, то вимагає дослідження вплив чотирьох далеких зон на транспорт носіїв. Крім того, багатодолинні халькогеніди свинцю відзначаються сильною анізотропією тензора обернених ефективних мас однієї долини, що зумовлює виникнення специфічних явищ, зокрема поздовжнього ефекта Холла (ПЕХ чи ефекта Грабнера), ефекта Сасаки. Що стосується механізмів розсіяння, то вважається, що для невивроджених напівпровідників при $T > 70$ К

ефективними є розсіяння на акустичних фононах та оптичних фононах. В той же час, не дослідженим в повній мірі залишається розсіяння на сплавному потенціалі в твердих розчинах, а також викликає зростаючий інтерес резонансне розсіяння.

Кінетичні процеси в шарових структурах (ШС) халькогенідів свинцю теоретично не досліджувались взагалі. Експериментальні результати по рухливості хоч і не узгоджуються добре між собою, однак свідчать, що ця рухливість порівняна з рухливістю в об'ємних халькогенідах свинцю. Основною проблемою теоретичного дослідження є те, що ще не стали загальнопринятими ті чи інші підходи до вивчення оптичних коливань ґратки ШС, тоді як саме взаємодія з оптичними фононами відіграє одну з найважливіших ролей в транспорті носіїв.

Метою роботи є теоретичне дослідження кінетики невироджених носіїв у вузькоцилінричних багатодолинних напівпровідниках типу халькогенідів свинцю як в об'ємних, так і в ШС. При цьому особливості матеріалів визначили такі основні напрямки досліджень.

1. Визначення ролі чотирьох далеких зон і різних механізмів розсіяння в процесах переносу носіїв. Вивчення "нетрадиційних" механізмів розсіяння: на сплавному потенціалі і на резонансних рівнях.

2. Вивчення особливостей поздовнього ефекта Холла.

3. Дослідження взаємодії носіїв з оптичними фононами та транспорту носіїв в ШС.

Практичний інтерес мають конкретні результати, котрі стосуються особливостей механізмів розсіяння, зокрема величина сплавного потенціалу та оцінка резонансного розсіяння, впливу чотирьох далеких зон на транспорт носіїв, особливостей поведінки носіїв в таких сильно анізотропних напівпровідниках, коли прикладені електричне і магнітне поля. А також низка результатів і висновків, що торкаються транспорту в ШС, а саме, існування трьох ефективних типів розсіяння на оптичних фононах в тришаровій структурі $PbTe/PbSnTe$, залежності рухливостей від товщини квантової ями та кутів між осями долин і ШС, вплив непараболічності закону дисперсії на рухливість. Отримані результати важливі для конструювання і вдосконалення приладів.

Крім того, для конкретних розрахунків можуть бути застосовані деякі аналітичні вирази, подані в даній роботі.

Наукова новизна полягає в тому, що вперше встановлено:

1. Чотири далекі зони спричиняють кількісні зміни на розрахованих температурних, молярних, польових, кутових залежностях транспортних коефіцієнтів, причому, головним чином внаслідок значного посилення непараболічності закону дисперсії, і в деякій мірі – за рахунок зміни ефективних мас носіїв. Основними механізмами розсіяння в об'ємних халькогенідах свинцю є ґраткові розсіяння: на оптичних (домінуюче) та акустичних фонах і на сплавному потенціалі для твердих розчинів. Величина сплавного потенціалу для $PbSnTe$ становить 0,7 еВ.

2. Положення максимумів на польових та температурних залежностях коефіцієнта поздовжнього ефекта Холла визначається величиною $\mu H/c$. Домінуючий механізм розсіяння, в основному, визначає хід температурної залежності коефіцієнта ПЕХ. Вплив коефіцієнта анізотропії на поведінку кутових, температурних і польових залежностей коефіцієнта ПЕХ не суттєвий.

3. Завдяки малій відмінності характеристик ґраток сусідніх шарів тришарової структури $PbTe-PbSnTe-PbTe$, електрон ефективно взаємодіє лише з модами оптичних фононів, частоти яких близькі до частот поздовжніх коливань ґраток. При досить великій відстані між межами (кілька тисяч ангстрем для даної ШС) електрони взаємодіють лише з обмеженими LO-модами, котрі набувають властивостей LO-мод однорідного середовища.

4. Домінуючий вплив на провідність, коли товщина квантової ями перевищує 100 \AA , справляє взаємодія з обмеженими LO-модами, тоді як при товщинах, менших 100 \AA , домінують межові моди. Електрон-фононна взаємодія при міжпідзонних переходах майже на порядок слабша, а при міждолинних – ще значно слабша, ніж при внутріпідзонних. При заселенні електронами верхніх підзон сумарна провідність долини зменшується внаслідок значно меншої концентрації носіїв у вищих підзонах порівняно з нижчими. Електрони вищої підзони ефективно впливають на величину інтегральної рухливості долини, якщо енергетична відстань від їх підзони до першої підзони менше енергетичного еквівалента температури.

5. Провідність долини залежить від кута між осями долини та ШС, а також збільшується при піднятті підзон із збереженням концентрації носіїв в підзонах внаслідок зміни ступеня непараболічності та зміни ефективних мас носіїв при піднятті підзон і нахилі долин.

Вказані результати становлять положення, котрі виносяться на захист.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи доповідались на таких конференціях: Наукова міжнародна конференція, присвячена 25-ій річниці ВМЕІ (м. Габрово, Болгарія, 1989); Республіканська конференція "Фізика і хімія поверхні та границь розділу вузькощільних напівпровідників: (м. Львів, 1990); XII Всесоюзна конференція по фізиці напівпровідників (м. Київ, 1990); VIII Всесоюзний симпозиум "Напівпровідники з вузькою забороненою зоною і напівметали" (м. Львів, 1991); Міжнародна школа-конференція молодих вчених "Фізика напівпровідників і її практичні застосування" (м. Алушта, 1992);

Об'єм та структура дисертації. Дисертація складається із вступу, трьох розділів, списку цитованої літератури, що налічує 124 назви, та трьох додатків.

КОРОТКИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтована актуальність виконаної роботи, сформульована мета і викладені основні результати, котрі виносяться на захист, а також подано короткий зміст дисертації по розділах.

В першому розділі подані літературні дані про енергетичну структуру і механізми розсіяння в об'ємних халькогенідах свинцю та в шарових квантоворозмірних структурах на їх основі. Зокрема, детально розглянуті існуючі моделі енергетичної структури, котрі застосовуються для халькогенідів свинцю. Серед всіх моделей виділяються дві: двозонна кейнівська і шестизонна

дiммокiвська. Вiдомi, експериментально отриманi рiзними авторами, сукупостi величин $(m_1^+, m_1^-, m_1^+, m_1^-)$, котрi визначають вплив чотирьох далеких зон, можна вiднести до двох груп. Причому, вiдповiднi значення цiei сукупостi близькi мiж собою в кожнiй з груп i рiзко вiдрiзняються в рiзних групах. Хоч така неоднозначнiсть, на перший погляд, i не дозволяє застосовувати модель Дiммока вiцiлому, однак бiльш детальний аналіз, виконаний в данiй роботi, показав, що закон дисперсiї Дiммока задовiльняється значеннями вказаної сукупостi тiльки однiei групи. Одна з таких сукупостей i була використана для розрахункiв. Поряд з "традицiйними" механiзмами розсiяння на акустичних i оптичних фононах, кулонiвському потенцiалi iонiзованих дошiшок, особливу увагу придiлено розсiянню на сплавному потенцiалi i резонансному розсiянню. Подана коротка характеристика типiв розсiяння в квантоворозмiрних структурах, котрi радикально вiдрiзняються вiд розсiяння в однорiдних матерiалах. Детальний огляд лiтератури по розсiянню на оптичних фононах ШС зроблено в першому параграфi роздiлу 3.

Другий роздiл присвячений дослiдженню кiнетичних процесiв в однорiдних об'ємних халькогенiдах свинцю. Розглядається невироджений електронний газ ($T > 70$ K, $n < 10^{17} \text{ см}^{-3}$), а прикладенi електричне поле - нагрiвче, магiтне - неквантує. Дослiджується вплив чотирьох далеких зон (двох С- i двох V-зон), рiзних механiзмiв розсiяння на рухливiсть, магiтоспiр, поперечний та поздовжнiй ефекти Холла. Внаслiдок складностi виразу закону дисперсiї Дiммока i неможливостi його безпосереднього використання в розрахунках, методом послiдовних наближень з точнiстю до членiв другого порядку отримано прийнятне наближення $p(\epsilon)$ -залежностi

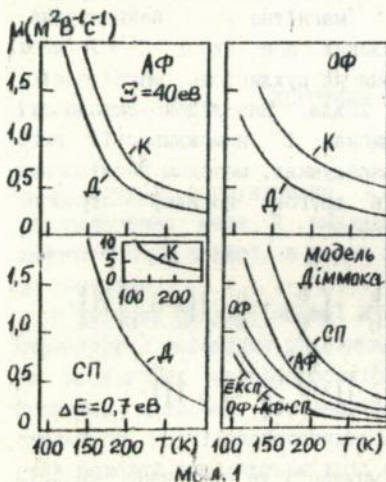
$$p^2 = \frac{\epsilon}{b^0} \left\{ \left[1 + \frac{b^-}{b^0} + \left(\frac{b^-}{b^0} \right)^2 \right] + \frac{\epsilon}{\epsilon_g} \left[1 + \frac{b^-}{b^0} + \left(\frac{b^-}{b^0} + \frac{b^+}{b^0} \right) \left(1 + 3 \frac{b^-}{b^0} \right) \right] + \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_g} \right)^2 \left[2 \frac{b^- b^+}{(b^0)^2} + \left(\frac{b^-}{b^0} + \frac{b^+}{b^0} \right) \left(1 + 3 \frac{b^-}{b^0} + \frac{b^+}{b^0} \right) \right] \right\},$$

де p , ϵ - квазіімпульс (надалі "імпульс") та кiнетична енергiя

електрона, ε_g - ширина забороненої зони. Величини b^α ($\alpha=0, +, -$) визначаються співвідношеннями

$$b^\alpha = \frac{1}{2m_i^\alpha} \left(1 - \frac{m_i^\alpha - m_i^\alpha}{m_i^\alpha} \cos^2 \theta \right),$$

де θ - кут між p_i і p . Відношення b^-/b^0 і b^+/b^0 характеризують вклади далеких С-зон (-) та V-зон (+) порівняно з вкладом основних С- та V-зон (0). Кейнівський закон дисперсії є граничним випадком даного наближення, коли $b^\pm/b^0=0$. Розрахунки показують, що отримане наближення достатньо добре, а величини b^\pm/b^0 для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $100 K < T < 300 K$ лежать в межах: $-0,33 < b^+/b^0 < -0,18$, $0,22 < b^-/b^0 < 0,4$. Таким чином, при $\varepsilon/\varepsilon_g=0$ (параболічний закон) збільшення ефективних мас для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ складає 26-56% і зумовлене впливом лише далеких С-зон (оскільки параболічний закон описує тільки С-зони). Однак, основний вклад далеких зон - це значне посилення непараболічності закону дисперсії. Причому, саме далекі С-зони посилюють непараболічність, тоді як далекі V-зони її послаблюють.



Оскільки у випадку малої концентрації носіїв міждолинне розсіяння мізерно слабе, то задача з багатьма долинами зводиться до задачі з однією долиною з наступним сумуванням по долинах.

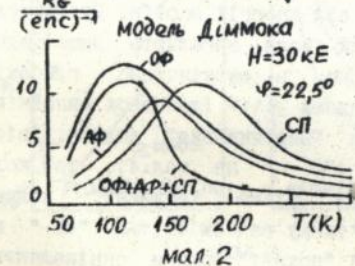
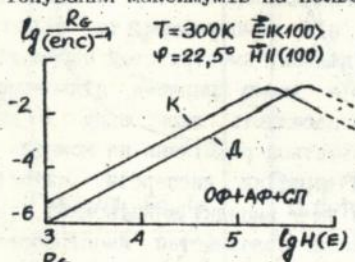
Враховувалось розсіяння на оптичних і акустичних фонових (ОФ, АФ), кулонівському потенціалі іонізованих домішок (КП), спільному потенціалі АЕ (СП), а також оцінювалось резонансне розсіяння (РР). Виявилось, що при даних умовах суттєві лише ґраткові типи

розсіяння: на ОФ (домінуюче), на АФ і на СП (мал.1 для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$, де "Д" позначає результати, отримані згідно з моделлю Діммока, "К" - моделлю Кейна).

Слід відмітити, що вплив чотирьох далеких зон враховувався через закон дисперсії Діммока і лише для розсіяння на АФ - також використанню виразу для часу релаксації, отриманого на неплоских хвильових функціях. Остання обставина викликана надзвичайною громіздкістю і складністю коректніших розрахунків для розсіяння на ОФ, хоч припускається, що для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ наближення плоских хвиль досить прийнятне.

Враховання як пружних типів розсіяння (на АФ, КП, СП та РР), так і непружного (на ОФ) вимагає використання варіаційного методу обчислення кількісних коефіцієнтів, котрий дозволяє досліджувати як кожний механізм розсіяння окремо, так і сумарне розсіяння, а також особливості зонної структури. Відзначимо, що в розрахунках враховані $\epsilon_g(T, x)$ $m_{1,1}^0(x)$ - залежності, а також деформаційного потенціалу Ξ від x .

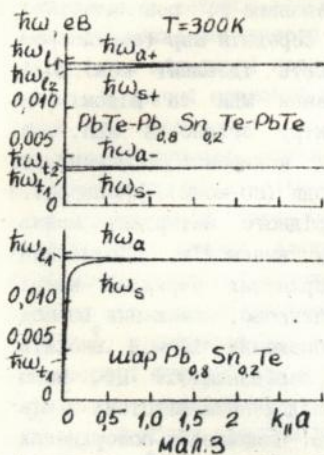
Щоб уникнути повторення, результати розділу 2 подані у висновках І-3. Зупинимося детальніше на поясненні причини існування максимумів на польовій і температурній залежностях



коефіцієнта ПЕХ (R_g) в інтервалі помірних неквадруючих магнітних полів ($\mu H/\sigma \sim 1$) (мал.2). ПЕХ полягає у виникненні е.р.с. в напрямку вектора \mathbf{H} магнітного поля, коли \mathbf{H} , залишаючись перпендикулярним вектору \mathbf{E} електричного поля, не співпадає з будь-якою з високосиметричних осей кристалу (утворює кут φ з $\langle 011 \rangle$ (див. мал.2)). ПЕХ визначається величиною проекції вектора середньої швидкості електрона на \mathbf{H} , котра вишикає за рахунок відхилення траєкторії від прямолінійної в магнітному полі та існування анізотропії

ефективних мас. В області слабких магнітних полів ($\mu H \ll 1$ чи $\omega_0 \tau \ll 1$, де ω_0 — циклотронна частота, τ — час вільного пробігу): чим сильніше поле, тим більше відхилення і більше R_{ξ} , причому $R_{\xi} \sim H^2$. В області сильних полів ($\mu H \gg 1$, $\omega_0 \tau \gg 1$) внаслідок закручування траєкторії проєкція вектора середньої швидкості електрона на H зменшується із збільшенням поля, що і зумовлює спадання $R_{\xi}(H)$ як H^{-2} . В інтервалі помірних полів $R_{\xi}(H)$ має максимум. Максимуми на температурних залежностях $R_{\xi}(T)$ виникають завдяки залежності від температури величини $\mu(T)H/c$. Подані результати для R_{ξ} справедливі для всіх механізмів розсіяння, але вказані максимуми $R_{\xi}(T)$, $R_{\xi}(H)$ для різних типів розсіяння знаходяться в різних інтервалах T і H . Однак, внаслідок співвідношення $\mu \sim \Delta_i$ для сумарної рухливості, відповідні сумарні залежності R_{ξ} найближчі до аналогічних залежностей для типу розсіяння з найменшою рухливістю. Для $PbSnTe$ таким є розсіяння на ОФ.

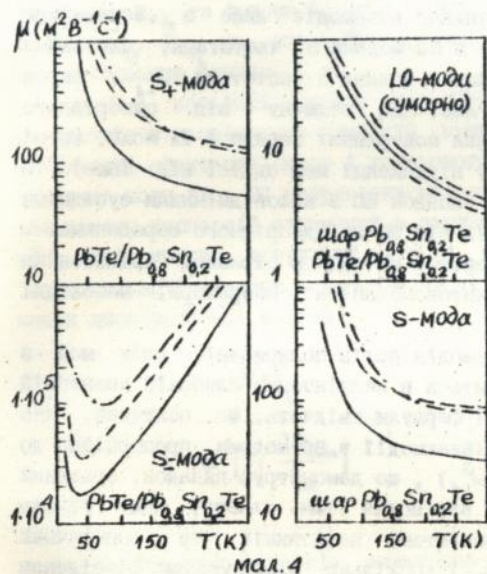
Третій розділ присвячений вивченню кінетичних процесів в шаровій структурі $PbTe-PbSnTe-PbTe$ і окремому шарі $PbSnTe$, зумовлених розсіянням на оптичних коливаннях ґратки. В даній роботі подані розрахунки просторових дисперсій енергій фононів межових мод (мал.3), залежностей від температури та товщини квантової ями положень мінімумів підзон, ймовірностей переходів в першій і другій підзонах, між двома першими підзонами, рухливостей електронів, коли вони заселяють лише одну і дві найнижчі підзони. При цьому враховується розсіяння на кожній з мод окремо. Крім того, наведені графіки дисперсій енергій електронів для двох перших підзон як у випадку кейнівської, так і параболічної залежностей, а також залежностей ймовірностей внутрі- і міжпідзонних переходів від енергії носіїв. Рухливості розраховані для електронів, коли вони заселяють лише одну (мал.4) та дві найнижчі підзони, в нескінченно глибокій квантовій ямі структур з осями вздовж $\langle 111 \rangle$ (для двох випадків: коли заселена лише одна найнижча "вертикальна" долина, вісь якої співпадає з віссю ШС $\langle 111 \rangle$ ("—" на мал.4), та коли "вертикальна" долина піднята до рівня "похилих" долин, наприклад за рахунок зовнішнього тиску вздовж $\langle 111 \rangle$ ("—" на мал.4)), і вздовж $\langle 001 \rangle$ (коли всі "похилі" долини еквівалентні



(на мал.4 подані "-.-"). Останній випадок розглянутий для порівняння. Моді оптичних коливань ШС розглядаються згідно з моделлю діелектричного континууму (МДК). Таким чином, відмінності між рухливостями для вказаної ШС і окремого шару зумовлюється лише відмінностями їх фононних спектрів. Такий послідовний перехід від шару до ШС сприяє формуванню чіткіших уявлень про фізичні основи кінематики в гетероструктурах. Прийняті наближення можна розглядати як проміжний етап в дослідженні

наступних, ближчих до реальності, моделей, котрий також допомагає в створенні таких моделей. Слід відмітити, що навіть

така спрощена модель дозволяє встановити низку важливих особливостей транспортних процесів в ШС взагалі і в ШС на основі калькогенідів свинцю зокрема.



В першому параграфі розділу поданий огляд дотичної літератури по дослідженню мод оптичних фононів в ШС. Показано, що для вивчення вказаних структур прийнятне використання МДК, котра далі застосовується до триварової структури

PbTe-PbSnTe- PbTe, де крайні шари (середовище 2) розглядаються як напівпростори для спрощення задачі, середній шар (середовище 1) має товщину a , а сусідні шари мають ідеальні межі. Далі детально аналізуються основні положення МЛК та відомі з літератури результати по фононному спектру згідно з МЛК, а саме, існування двох типів оптичних коливань: обмежені в кожному шарі LO- і TO-моди та межові моди (SO-моди). Показано, що граничний перехід від ШС до однорідного матеріалу можна отримати, аналізуючи електрон-фононну взаємодію. Коливання ґраток формують на межах хвилі поверхневих зарядів, котрі створять поля поляризації SO-мод і, частково, обмежених LO-мод (основний вклад в створення полів обмежених LO-мод вносять об'ємні заряди, як в однорідному середовищі). Ці поля локалізуються біля меж і слабнуть із збільшенням відстані a між межами, особливо сильно для SO-мод. Величина поверхневих зарядів a -ої моди σ_a пропорційна різниці $(\omega_a^2 - \omega_{t_4}^2)$. Тому електрон слабше взаємодіє з SO-модами з частотами, близькими до ω_{t_4} . Таким чином, коли відмінності ґраток сусідніх шарів незначні, електрон ефективно взаємодіє лише з обмеженими LO-модами з частотою ω_{14} та з SO-модами з частотами, близькими до ω_{14} , тобто практично лише з модами з частотами ω_{14} , як в однорідному середовищі. Але, на відміну від однорідного середовища, в ШС залишаються поверхневі заряди і їх поля, котрі зникають лише при значному віддаленні меж однієї від іншої. В цьому і полягає граничний випадок ШС з маловідмінними сусідніми шарами та граничний перехід від ШС до однорідного середовища.

В § 3.2 згідно з стандартною методикою отримані гамільтоніан вільної поляризації і квантовомеханічні оператори, необхідні надалі.

В § 3.3 розглянута взаємодія полів поляризації всіх мод з електроном, котрий знаходиться в нескінченно глибокій квантовій ямі (шар PbSnTe). Наведені формули свідчать, що величина, яка характеризує ефективність взаємодії з SO-модами, пропорційна до $(\omega_{14}/\omega_a)^{1/2} (\omega_a^2 - \omega_{t_4}^2) / (\omega_{14}^2 - \omega_{t_4}^2)$, що демонструє випадок, згаданий в § 3.1. Крім того, ця взаємодія тим слабша, чим, більша відносна різниця між частотами поздовжніх та поперечних коливань ґраток (ω_{14} та ω_{t_4}). Оскільки міждолинним розсіянням

електронів за рахунок взаємодії з оптичними фононами в $\text{PbTe}/\text{PbSnTe}$ ШС можна знехтувати (що також стверджується в давній роботі), то кінетичні процеси розглядаються в кожній долині окремо. Матричні елементи переходу електрона з одного стану в інший при розсіянні на всіх модах отримані на простій операторній функції, котра залежить від координати z (вздовж осі структури) як $\sin(1^*z/a)$, де натуральне число l позначає підзону, в якій знаходиться електрон. Вибрана операторна функція точно описує електрон лише у "вертикальній" долині нескінченно глибокої квантової ями, що досить прийнятно для ШС з віссю $\langle 111 \rangle$ з однією "вертикальною" долиною, коли a близьке до 200 \AA , а температура - біля 100 K . Використання такої операторної функції для різних випадків зумовлене можливістю отримати аналітичні вирази, котрі характеризують електрон-фононну взаємодію і електронний транспорт, і суттєво полегшують аналіз, що неможливо зробити при більш коректних функціях. Використання умов циклічності Борна-Кармана в площині шарів приводить до закону збереження 2D -хвильових векторів електрона k_{e,l_1} та фонуна k_f при розсіянні з l -ої підзони в l' -ту: $k_{e,l_1'} = k_{e,l_1} \pm k_f$ (знак "+" відповідає поглинанню, "-" випромінюванню фонуна).

В § 3.4 наведені вирази для законів дисперсії енергії електронів в нескінченно глибокій квантовій ямі, отримані в наближенні ефективної маси і хвильового пакета. Розглянуті два випадки: коли вісь ШС направлена вздовж $\langle 001 \rangle$ та $\langle 111 \rangle$. Вираз для закону дисперсії отриманий в загальному випадку для долини, вісь якої утворює довільний кут з віссю ШС. Зокрема, для "вертикальної" долини, ізотропної в x -площині транспорту, закон дисперсії має вигляд

$$\frac{\hbar^2 k_{e,l_1}^2}{2m_l^0 \left(1 + \frac{2E_{l,\text{min}}}{\epsilon_g}\right)} = E_{l_1} \left(1 + \frac{E_{l_1}}{2E_{l,\text{min}} + \epsilon_g}\right)$$

де E_{l_1} - кінетична енергія електрона l -ої підзони, $E_{l,\text{min}}$

положення мінімуму 1-ої підзони, котре зростає при зменшенні α . Повна енергія електрона 1-ої підзони є сума: $\epsilon_1 = \epsilon_{11} + E_{1min}$. Таким чином, розмірне квантування, поряд з ϵ_g , змінює і значення ефективних мас носіїв, і ступінь непараболічності закону дисперсії. У вищих підзонах непараболічність слабша, ніж у нижчих. Крім того, в "похилих" долинах існує анізотропія мас, причому тим більша, чим більший нахил долини, тобто кут між осями долини і ШС. Також розглянута проблема зміщення країв С- та V-зон внаслідок деформацій, що виникають при вирощуванні ШС з різними осями, оскільки ці зміщення впливають на характеристики ШС, зокрема на реальну висоту потенціального бар'єра та ϵ_g . Через невизначеність експериментально встановлених значень цих зміщень з метою порівняння результатів подальші розрахунки виконані для ШС з різними осями, як згадувалось раніше.

В § 3.5 отримані вирази для ймовірностей розсіяння на кожній моді. Показано, що емісія фонона є анізотропним процесом, причому, чим ближчі енергії випромінюючого електрона і випроміненого фонона, тим ближче розсіяння до лобового. При певних умовах, зокрема при переходах між досить далекими підзонами, поглинання фонона також стає анізотропним процесом.

В § 3.6 подаються співвідношення для коефіцієнта нормування максвеллівської функції розподілу невироджених електронів 1-ої підзони однієї долини. При цьому використаний максвеллівський розподіл електронів по станах з повною енергією при термодинамічній рівновазі та той факт, що електрон може знаходитись в одній з підзон. Вираз для коефіцієнта нормування функції розподілу 1-ої підзони отриманий в загальному випадку, коли заселені всі підзони.

В § 3.7 наведені співвідношення для інтеграла зіткнень при розсіянні на всіх модах. Підкреслюється, що зміна функції розподілу електронів 1-ої підзони визначається всіма можливими переходами електронів всередині 1-ої підзони, а також між 1-ою підзоною і будь-якою іншою.

В § 3.8 отримані вирази для елементів тензора провідності підзони і долини в цілому в загальному випадку заселення всіх підзон для всіх можливих переходів електронів. Внаслідок

непружності розсіяння на багатьох модах, розрахунки виконані за допомогою варіаційного методу, котрий дозволяє сумувати відповідні величини і по модах, і по підзонах.

В § 3.9 подані співвідношення для сумарної провідності по всіх долинах. Внаслідок симетрії задачі сумарна провідність є скаляром. Для ШС з віссю $\langle III \rangle$, коли заселена одна "вертикальна" долина (β): $\sigma = \sigma_x^\beta = \sigma_y^\beta$. Для ШС з віссю $\langle III \rangle$, коли заселені три еквівалентні "похилі" долини (n) і одна "вертикальна": $\sigma = \sigma_x^\beta + 1,5(\sigma_x^n + \sigma_y^n)$. Для ШС з віссю $\langle 001 \rangle$, коли всі чотири "похилі" долини еквівалентні: $\sigma = 2(\sigma_x^n + \sigma_y^n)$. Виходячи з отриманих виразів для провідностей, розраховуються рухливості електронів ШС.

З метою уникнення повторювань результати і висновки розділу 3 подані висновками 4-7. Зупинимось на поясненні причини зростання, починаючи з деякої температури, $\mu_{g-}(T)$ на мал.4. Стрімке зростання $\mu_{g-}(T)$ викликане зменшенням величини $(\omega_{g-}^2 - \omega_{t_4}^2)$ з температурою. Однак, аналіз показує, що немонотонність $\mu_{g-}(T)$, тобто зростання в деякому температурному інтервалі, зумовлюється не тільки температурними залежностями характеристик матеріалів, а саме ω_{t_4} і ω_{t_2} . Виявляється, що в загальному випадку може існувати немонотонність $\mu_\alpha(T)$, зумовлена розсіянням на α -ій моді коливань ґратки, при певних значеннях $\hbar\omega_\alpha$, ϵ_g , α , ефективних мас, коли всі характеристики ґратки не залежать від температури (розраховану при таких умовах рухливість позначатимемо $\tilde{\mu}_\alpha$). При цих умовах від T залежать лише дві величини. Одна з них - це функція розподілу фононів, тобто число рівноважних фононів. Ця величина збільшується з ростом T і, таким чином, сприяє спаданню $\mu_\alpha(T)$. Причому саме завдяки домінуванню цього впливу і спостерігається, звичайно, спадання $\mu_\alpha(T)$ для розсіяння на оптичних коливаннях ґратки. Інша величина - це функція розподілу електронів, згідно з якою з ростом T збільшується кількість електронів з більшою кінетичною енергією, що сприяє зростанню $\mu_\alpha(T)$. Таким чином, зростання $\tilde{\mu}_\alpha(T)$ в якомусь інтервалі T викликано домінуванням при цих T і певних умовах останнього фактора. Чим менше $\hbar\omega_\alpha$, слабша непараболічність (більші ϵ_g , α) і менші ефективні маси, тим різкіший мінімум на

$\tilde{\mu}_\alpha(T)$ і при меншій T . Для s -моди $PbTe/PbSe$ немонотонність $\tilde{\mu}_\alpha(T)$ проявляється до 300 К при товщинах квантової ями в кілька сот \AA , причому мають місце локальний мінімум, а за ним локальний максимум $\tilde{\mu}_\alpha(T)$. Для мод з $\hbar\omega_a > 10$ меВ немонотонність $\tilde{\mu}_\alpha(T)$ практично не має місця. Зазначимо, однак, що ці особливості подавляються сильним зростанням $\tilde{\mu}_\alpha(T)$ через зменшення $(\omega_a^2 - \omega_{t_4}^2)$ із збільшенням T . Крім того, підкреслимо, що ті значення параметрів, завдяки яким проявляється немонотонність розрахованої $\mu_\alpha(T)$, зокрема мале значення ω_a через близькість його до ω_{t_4} , не дають змоги спостерігати цю немонотонність експериментально.

В додатках 1 і 2 подані співвідношення варіаційного методу, котрі безпосередньо застосовуються для розрахунків кінетичних коефіцієнтів (без магнітного поля - додаток 1, з магнітним полем - додаток 2) як у випадку 3D-, так і у випадку 2D-транспорту.

В додатку 3 виведені вирази для тензорів сумарних по всіх долинах 2D-провідностей для випадків гетероструктур з осями $\langle 111 \rangle$ та $\langle 001 \rangle$.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ВИСНОВКИ

1. Вклад чотирьох далеких зон в закон дисперсії - це значне посилення непараболічності, а також - збільшення ефективних мас. При цьому дві далекі S -зони посилюють непараболічність, тоді як дві далекі V -зони її послаблюють. Збільшення ефективних мас (до приблизно 60%) відбувається за рахунок лише далеких S -зон. Вплив чотирьох далеких зон, головним чином через посилення непараболічності закону дисперсії, зумовлює кількісні зміни на розрахованих температурних, молярних, польових, кутових залежностях транспортних коефіцієнтів невироджених електронів в калькогенідів свинцю, причому значні - для рухливості і поздовжнього ефекта Холла (особливо останнього), і не значні - для магнітоспору та поперечного ефекта Холла.

2. Основними механізмами розсіяння в однорідних об'ємних калькогенідах свинцю є ґраткові розсіяння: на оптичних та акустичних фонах і на специфічному сплавному потенціалі для

твердих розчинів. Розсіяння на оптичних коливаннях ґратки є домінуючим в інтервалі 70-300 К для невироджених напівпровідників. Величина сплавного потенціалу ΔE , оцінена із співставлення розрахунків рухливості в рамках моделі Діммока з експериментальними даними, становить 0,7 еВ для $PbSnTe$. Відповідна величина ΔE згідно з моделлю Кейна більша 2 еВ, що зумовлено сильною залежністю густини станів по енергіях від ступеня непараболічності закону дисперсії. Крім того, саме значення 0,7 еВ, а не 2 еВ, ближче до експериментально встановленої величини розриву країв зон в надґратці $PbTe/SnTe$ - біля 0,4 еВ. А ці величини зумовлені однією причиною (різницею відповідних рівнів атомів Pb і Sn) і мають бути близькими. Це також свідчить про необхідність використання шестизонної моделі для коректних розрахунків кінетичних коефіцієнтів. Оцінити вплив резонансного розсіяння, досліджуючи лише інтегральні кінетичні коефіцієнти для невироджених носіїв, неможливо, оскільки температурні залежності, наприклад рухливості, спричиненої PP , аналогічні до таких же залежностей, зумовлених розсіянням на акустичних фонах, а, отже, величиною деформаційного потенціалу можна "врахувати" PP . Однак, встановлено, що PP слабо залежить від глибини залягання резонансного рівня, але сильно - від ширини рівня, що пояснюється невиродженістю носіїв.

3. Кількість пелюсток на кутових залежностях коефіцієнта поздовжнього ефекта Холла R_H визначаються симетрією кристала та розташуванням векторів E і H в кристалі, а положення максимумів на польових та температурних залежностях R_H - величиною магнітного поля, а точніше $\mu H/c$. Зокрема, для халькогенідів свинцю, коли $E \parallel \langle 100 \rangle$, $H \parallel \langle 100 \rangle$, кутова залежність R_H описується функцією $\sin 4\phi$. Польова та температурна залежності R_H в інтервалі помірних полів ($\mu H/c \sim I$) мають максимуми. Причому, $R_H(H) \sim H^2$ в області слабких полів ($\mu H/c < I$) і $R_H(H) \sim H^{-2}$ в інтервалі сильних полів ($\mu H/c > I$). $R_H(T)$ для сумарного розсіяння в основному визначається тією $R_H(T)$, котра зумовлена домінуючим розсіянням (на оптичних фонах). Вплив коефіцієнта анізотропії на хід $R_H(H)$, $R_H(T)$ не суттєвий.

4. Сусідні шари тришарової структури $PbTe-PbSnTe-PbTe$ мало

відрізняються між собою, причому для даної ШС властиво: 1) $(\omega_{14} > \omega_{12}) > (\omega_{t2} > \omega_{t4})$, 2) близькість ω_{14} до ω_{12} та ω_{t4} до ω_{t2} , 3) велика відносна різниця між $\omega_{14,2}$ та $\omega_{t4,2}$, 4) мале значення $\omega_{t4,2}$. Тому частоти ν_{+}, ν_{+} -мод лежать в межах від ω_{12} до ω_{14} і близькі до ω_{14} , а частоти ν_{-}, ν_{-} -мод лежать в межах від ω_{t4} до ω_{t2} і близькі до ω_{t4} . Згідно в МДК електрони такої структури ефективно взаємодіють лише в тихи модах (обмежені LO-моди, ν_{+}, ν_{+} -моди), частоти яких близькі до частот поздовжніх коливань ґраток і ця взаємодія є шляхом інтенсивної втрати енергії носіїв. Розсіяння на модах (ν_{-}, ν_{-}) з частотами, близькими до частот поперечних коливань ґраток, дуже слабе. Електрон-фононна взаємодія тим слабша, чим більша відносна різниця частот поздовжніх та поперечних коливань ґраток. Поля поляризації SO-мод і, частково, обмежених LO-мод, утворюються поверхневими хвилями зарядів на межах, є локалізованими біля меж і послаблюються із збільшенням відстані між межами. Коли ця відстань для даної ШС складає кілька тисяч ангстрем, SO-моди не проявляються, а обмежені LO-моди набувають ознак об'ємних мод однорідного середовища. Властивості 1)-4) віділяють PbTe/PbSnTe ШС серед інших, зокрема A_3B_5 ШС, в яких слід враховувати всі чотири SO-моди.

5. Електрон ефективніше взаємодіє з оптичними фононами з більшими довжинами хвиль (причому ця залежність значно сильніша для SO-мод), а також з такими обмеженими LO-модами, що характеризуються кількома першими значеннями натурального числа m . При внутріпідзонних переходах електрон взаємодіє лише з тими LO-модами (з непарними m) і SO-модами (ν_{+}, ν_{-}, ν), котрі утворюють на межах симетричні хвилі поверхневих зарядів. Електрон-фононна взаємодія при міжпідзонних переходах майже на порядок слабша, а при міждолинних - ще значно слабша, ніж при внутріпідзонних. Провідність долини визначається практично внутріпідзонним розсіянням, домінуючий вплив на провідність, коли товщина квантової ями більша 100 Å, справляє взаємодія з обмеженими LO-модами, причому μ_{s+}, μ_s майже на порядок більші, ніж μ_{l0} , тоді як при товщинах, менших 100 Å, домінують SO-моди. Поля поляризації ν_{-}, ν_{-} -мод в окремому шарі PbSnTe у вакуумі в кілька разів сильніші, ніж ν_{+}, ν_{+} -мод (приблизно з тими ж

частотами) в ШС, тобто в шарі $PbSnTe$, оточеному діелектриком $PbTe$. Відповідні рухливості в окремому шарі дещо менші, ніж в ШС.

6. Відхилення від параболічності закону дисперсії енергії електронів та величин ефективних мас носіїв сильно впливають на провідність носіїв, причому посилення ступеня непараболічності чи збільшення мас зменшують провідність. Підняття підзони послаблює непараболічність, але збільшує ефективні маси так, що в сумарному ефекті на провідність домінує вплив зміни непараболічності. Тобто, при піднятті підзони, коли концентрація носіїв в підзонах зберігається (наприклад, при зменшенні товщини ями чи додаткових тисках на ШС), провідність зростає. При нахилі долини відносно осі ШС піднімаються підзони і збільшуються ефективні маси і, таким чином, має місце своєрідна "геометрична анізотропія провідності" долини, тобто залежність провідності від кута між осями долини і ШС. Крім того, ці ефекти дуже залежать від типу фононів, з якими взаємодіють носії, оскільки крутизна закону дисперсії визначає k_1 фонона. Внаслідок того, що взаємодія з SO -фононами значно чутливіша до змін k_1 , ніж з LO -модами, вплив величин мас і особливо непараболічності на $\mu_{\text{вo}}$ значно ефективніший, ніж на μ_{10} .

7. При заселенні електронами вищих підзон сумарна рухливість долини суттєво зменшується, зокрема μ_{10} , розрахована для двох підзон "вертикальної" долини ШС з віссю $\langle 111 \rangle$, приблизно на 30% менші, ніж μ_{10} для однієї підзони, а $\mu_{\text{вo}}$ відрізняються ще більше. Причина зменшення рухливості полягає в наступному. Провідність долини визначається практично внутріпідзонними переходами. У вищих підзонах порівняно з нижчими діють два протилежні фактори. З одного боку, вищий рівень підзон сприяє збільшенню рухливості, з іншого - менша концентрація електронів сприяє зменшенню рухливості. В сумарному ефекті домінує останній фактор. Крім того, електрони вищої підзони ефективно впливають на величину інтегральної рухливості долини, якщо енергетична відстань їх підзони від першої підзони менша енергетичного еквівалента температури.

1. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А., Тетеркин В.В. Влияние особенностей зонной структуры на процессы переноса в халькогенидах свинца// Тезисы докладов на научной конференции, посвященной 25-летию ВМЭИ. Направление: Машиностроительные технологии.- Габрово, Болгария, 1989.- С.1-5.
2. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А. Гальваномагнитные эффекты в халькогенидах свинца в приближении шестизонной модели Диммока// Тези доповідей республіканської конференції "Фізика і хімія поверхні та границь розділу вузькощілинних напівпровідників".- Львів, 1990.- С.205-206.
3. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А. Кинетические процессы в халькогенидах свинца в приближении шестизонной модели// Тезисы докладов XII Всесоюзной конференции по физике полупроводников.- Киев, 1990.- С.123-124.
4. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А., Тетеркин В.А. Влияние особенностей зонной структуры на процессы переноса в $Pb_{1-x}Sn_xTe$. I. Подвижность// УФЖ.- 1991.- т.36, № 3.- С.440-446.
5. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А. Влияние особенностей зонной структуры на процессы переноса в $Pb_{1-x}Sn_xTe$. 2. Поперечный и продольный эффекты Холла, магнитосопротивление// УФЖ.- т.36, № 4.- С.595-598.
6. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А. Продольный эффект Холла в $Pb_{1-x}Sn_xTe$ в приближении шестизонной модели// Материалы VIII Всесоюзного симпозиума "Полупроводники с узкой запрещенной зоной и полуметаллы".- Львов, 1991.- Ч.1.- С.189-191.
7. Бондаренко В.В., Шендеровский В.А. Интеграл столкновений для взаимодействия электронов с оптическими колебаниями решетки в двумерных структурах. Применение к квантовой яме на основе материалов A_4B_6 // Тезисы докладов III Всесоюзной конференции "Материаловедение халькогенидных полупроводников".- Черновцы, 1991.- Ч.П.- С.11.
8. Бондаренко В.В., Шендеровський В.А. Рухливість електронів, зумовлена розсіянням на оптичних фонах в гетероструктурі $PbTe/PbSnTe$ і тонкій плівці $PbSnTe$ // УФЖ.- 1992.- т.37, №9.- С.1387-1390.

ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ И МЕХАНИЗМОВ
РАССЕЯНИЯ НА КИНЕТИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ОБЪЕМНЫХ И
СЛОЕВЫХ СТРУКТУРАХ ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Основные направления теоретического исследования:

1) Определение роли четырех дальних зон и различных механизмов рассеяния в процессах переноса носителей. Изучение "нетрадиционных" механизмов рассеяния - на сплавном потенциале и на резонансных уровнях. 2) Изучение особенностей продольного эффекта Холла. 3) Исследование взаимодействия носителей с оптическими фононами и транспорта носителей в слоевых структурах (СС).

Научная новизна состоит в том, что впервые установлено:

1. Четыре дальние зоны вызывают количественные изменения на рассчитанных температурных, молярных, полевых, угловых зависимостях транспортных коэффициентов, причем главным образом вследствие значительного усиления непараболичности закона дисперсии и в некоторой степени - за счет изменения эффективных масс носителей. Основными механизмами рассеяния в объемных халькогенидах свинца являются решеточные рассеяния: на оптических (доминирующее) и акустических фононах и на сплавном потенциале в твердых растворах. Величина сплавного потенциала для $PbSnTe$ составляет 0,7 эВ.

2. Положение максимумов на полевых и температурных зависимостях коэффициента продольного эффекта Холла (ПЭХ) определяется величиной $\mu n/e$. Доминирующий механизм рассеяния определяет, в основном, ход температурных зависимостей коэффициента ПЭХ. Влияние коэффициента анизотропии на поведение угловых, температурных и полевых зависимостей коэффициента ПЭХ не существенно.

3. Благодаря небольшим отличиям характеристик решеток соседних слоев трехслойной структуры $PbTe-PbSnTe-PbTe$, электрон эффективно взаимодействует только с модами оптических фононов, частоты которых близки к частотам продольных колебаний решеток. При достаточно большом расстоянии между границами (несколько тысяч ангстрем для данной СС) электроны взаимодействуют только с ограниченными LO-модами, которые приобретают свойства LO-мод

однородной среды.

4. Доминирующее влияние на проводимость, когда толщина квантовой ямы PbSnTe в CS превышает 100 \AA , оказывает взаимодействие с ограниченными LO -модами, тогда как при толщинах, меньших 100 \AA , доминируют интерфейсные моды. Электрон-фононное взаимодействие при межподзонных переходах почти на порядок слабее, а при междолинных - еще значительно слабее, чем при внутривидовых. При заселении электронами верхних подзон суммарная проводимость долины убывает вследствие значительно меньшей концентрации носителей в верхних подзонах по сравнению с нижними. Электроны верхней подзоны эффективно влияют на величину интегральной подвижности долины, если энергетическое расстояние от их подзоны до первой подзоны меньше энергетического эквивалента температуры.

5. Проводимость долины зависит от угла между осями долины и CS , а также увеличивается с поднятием подзон при сохранении концентрации носителей в подзонах вследствие изменения степени непараболичности и изменения эффективных масс носителей при поднятии подзон и наклоне долин.

Эти положения выносятся на защиту.

БОНДАРЕНКО ВІКТОР ВОЛОДИМИРОВИЧ
ВІПЛИВ ОСОБЛИВОСТЕЙ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ ТА МЕХАНІЗМІВ
РОЗСІЯННЯ НА КІНЕТИЧНІ ПРОЦЕСИ В ОБ'ЄМНИХ ТА
ШАРОВИХ СТРУКТУРАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ СВИНЦЮ

Підписано до друку 12.04.93. Формат паперу 60x84/16.

Папір офсетний 72 гр/м². Офсетний друк. Ум.-друк.

аркушів 1,25. Об.-вид. аркушів 0,85. Наклад 100. Зам.46.

Безкоштовно.

Інститут фізики АН України, ВНТІ
252028, Київ-28, ДСП, проспект Науки, 46.

464918

AB 27.257

БЕЗКОШТОВНО