

основной зоны от наличия «дополнительного» катиона в соединении глубина залегания этой зоны принималась равной 14 эВ во всех исследуемых бромидах. На основе этого получены значения ширины основной энергетической щели  $E_g$  кристаллов (см. таблицу).

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Родный П. А., Терехин М. А., Петров С. В. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 10. С. 3171—3173.
- [2] Rodnyi P. A., Terckhin M. A., Mel'chakov E. N. // J. of Luminescence. 1991. V. 47. N 1. P. 281—284.
- [3] Валбис Я. А., Рачко З. А., Янсонс Я. Л., Антоняк О. Т., Волошиновский А. С. // Сб. «Радиационно-стимулированные процессы в широкщелевых кристаллах». Рига, 1987. С. 82—80.
- [4] Антоняк О. Т., Волошиновский А. С., Пашук И. П. и др. // Опт. и спектр. 1991. Т. 70. № 5. С. 1035—1037.
- [5] Kikas A., Elango M. // Solid State Comm. 1990. V. 70. N 41. P. 1113—1116.
- [6] Денисов И. П., Кривченко В. А., Маловичко А. В., Яковлев В. Ю. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 7. С. 22—25.
- [7] Родный П. А. // Опт. и спектр. 1989. Т. 67. № 5. С. 1068—1074.
- [8] Александров Ю. М., Куусман И. Л., Либлик П. Х. и др. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 4. С. 1026—1029.
- [9] Andbaund C., Pelle F., Pilla O., Blanzat B. // Phis. Stat. Solidi (b). 1988. V. 149/2. P. 757—763.
- [10] Kubota S., Ruan(Gen) J., Itoh M., Hashimoto S., Sakuragi S. // Nucl. Instr. and Methods. 1990. V. A282. N 3. P. 253—260.

Львовский государственный  
университет им. И. Франко  
Санкт-Петербургский государственный  
технический университет

Поступило в Редакцию  
10 сентября 1991 г.

© Физика твердого тела, том 34, № 2, 1992  
Solid State Physics, vol. 34, N 2, 1992

## РАСЧЕТ ПОВЕРХНОСТНОГО ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В РЕАЛЬНЫХ МОДЕЛЯХ РАССЕЯНИЯ

*В. И. Белиничер, В. А. Бригинец*

Теория поверхностного фотогальванического эффекта (ПФГЭ), развитая в работах [1–3], строилась на основе хорошо известного  $\tau$ -приближения для интегралов столкновений электрона в объеме и на поверхности кристалла. Поскольку такая теория носит приближенный характер, то остается неясным вопрос об ее точности. С целью прояснения этого вопроса мы провели численное моделирование ПФГЭ методом Монте-Карло. Рассеяние импульса электрона в выбранной нами модели происходило на экранированных заряженных примесях, локализованных в объеме и на поверхности кристалла. Такая модель рассеяния позволяет описывать как изотропное рассеяние в случае, когда модуль волнового вектора  $\mathbf{k}$  много меньше обратного радиуса экранирования  $z_0^{-1}$ , так и резко анизотропное рассеяние при  $k > z_0^{-1}$ .

В случае полупроводника с изотропным параболическим законом дисперсии ПФГЭ может быть описан обычным кинетическим уравнением для функции распределения электронов  $f(z, \mathbf{k})$

$$\frac{\partial f(z, \mathbf{k})}{\partial t} + \frac{k_z}{m} \frac{\partial f(z, \mathbf{k})}{\partial z} = St_{\mathbf{k}}(f) + W_{\mathbf{k}} \exp(-\alpha z), \quad (1)$$

Здесь  $m$  — масса электрона;  $z, k_{\perp}$  — координата и волновой вектор вдоль нормали к поверхности;  $\kappa$  — коэффициент поглощения света;  $W_{\mathbf{k}}$  — плотность фоторожденных электронов.

В случае упругого рассеяния интеграл столкновений  $St_{\mathbf{k}}(f)$  имеет вид [4]

$$St_{\mathbf{k}}(f) = \int W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(f_{\mathbf{k}'} - f_{\mathbf{k}}) d\mathbf{k}',$$

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \propto \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (2)$$

Здесь  $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  — вероятность рассеяния,  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  — закон дисперсии электронов.

Уравнение (1) необходимо дополнить граничным условием на поверхности [1, 5]

$$f_{\mathbf{k}}(s) = f_{\mathbf{k}^*}(s) + (m/k_{\perp}) St_{\mathbf{k}}^{0\text{в}}(f), \quad k_{\perp} > 0,$$

$$St_{\mathbf{k}}^{0\text{в}}(f) = \int W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{0\text{в}}(f_{\mathbf{k}^*} - f_{\mathbf{k}^*}) d\mathbf{k}',$$

$$W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{0\text{в}} \propto \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (3)$$

Здесь  $\mathbf{k}^*$  отличается от  $\mathbf{k}$  сменой знака  $k_{\perp}$ ;  $f_{\mathbf{k}}(s)$  — функция распределения на поверхности.

Для возникновения ПФГЭ плотность фоторожденных электронов должна содержать анизотропный вклад  $W_{\mathbf{k}} \propto |\mathbf{k}\mathbf{e}|^2$ , где  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации света. Мы ограничились  $W_{\mathbf{k}}$  простейшего вида

$$W_{\mathbf{k}} = (3|\mathbf{k}\mathbf{e}|^2/4\pi k^3 m) (\kappa I/\hbar\omega) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - E_0), \quad (4)$$

где  $I, \omega$  — интенсивность и частота света,  $E_0$  — кинетическая энергия фоторожденных электронов.

В случае использования  $\tau$ -приближения для рассеяния в объеме и приближения коэффициента диффузности для рассеяния на поверхности имеем

$$St_{\mathbf{k}}(f) = -\Gamma_{\mathbf{k}}^2(f_{\mathbf{k}} - \bar{f}_{\mathbf{k}}),$$

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^2 \equiv \tau_p^{-1},$$

$$f_{\mathbf{k}}(s) = (f - \gamma) f_{\mathbf{k}^*}(s) + \gamma (m/k_{\perp}) \overline{[(k_{\perp}/m) \theta(k_{\perp}) f_{\mathbf{k}^*}(s)]}. \quad (5)$$

Здесь  $\Gamma_{\mathbf{k}}^2$  — частота потери импульса электрона при объемном рассеянии,  $\gamma$  — коэффициент диффузности, черта обозначает усреднение по углам.

Частота потери импульса стандартным образом выражается через вероятность рассеяния  $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  и для рассеяния на заряженных примесях имеет вид

$$\Gamma_{\mathbf{k}}^2 = \int (1 - \mathbf{k}\mathbf{k}'/k^2) W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d\mathbf{k}' = (2\pi N/mk^3 a_0^2) \psi(z). \quad (6)$$

Здесь  $N$  — концентрация примесей,  $a_0$  — боровский радиус электрона в кристалле,

$$\psi(z) = \ln(z) + 1/z - 1, \quad z = 1 + 4k^2 r_0^2.$$

Коэффициент диффузности  $\gamma$  определяет меру потери продольной относительно поверхности компоненты импульса  $k_{\parallel}$  при рассеянии электрона от поверхности

$$\int (k_{\parallel} - k'_{\parallel}) W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{0\text{в}} d\mathbf{k}' = \gamma k_{\parallel}. \quad (7)$$

В частности, а) при зеркальном рассеянии  $\gamma=0$  и  $k_{\parallel}$  сохраняется при отражении электрона, б) при полностью диффузном рассеянии  $\gamma=1$  и

$$\int W_{kk'}^{no} dk' = 1, \quad \int k'_n W_{kk'}^{no} dk' = 0. \quad (8)$$

Определение (7) справедливо для изотропного в плоскости поверхности рассеяния, и из него следует, что

$$\gamma = \int (1 - k_n k'_n / k^2) W_{kk'} dk'. \quad (9)$$

Если длину измерять в единицах  $\lambda^{-1}$ , а ток в относительных единицах, то решение определяется безразмерными параметрами  $\lambda \Lambda_p$  ( $\Lambda_p = k/m\Gamma_p$  — длина свободного пробега по импульсу) и  $\gamma$ , а также характером рассеяния в объеме и на поверхности. Численное моделирование в таких единицах делает результаты расчетов универсальными.

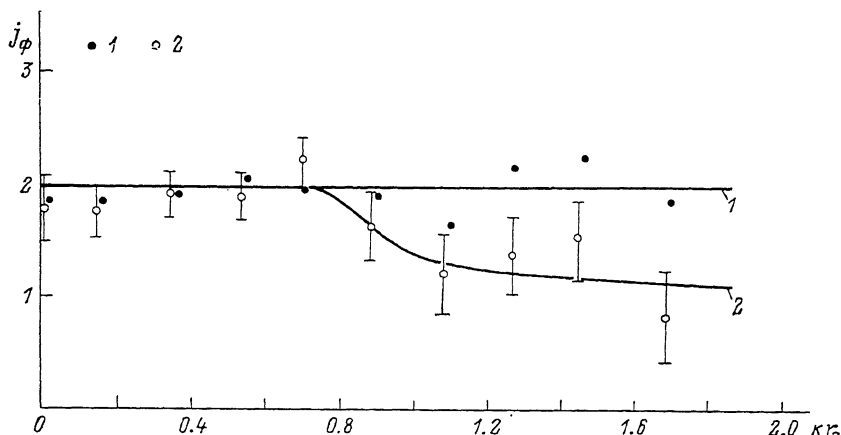


Рис. 1. Зависимость фототока в приближении коэффициента диффузности для поверхностного рассеяния от  $kr_s$  при моделировании с  $2 \cdot 10^5$  частиц.

1 — приближение для рассеяния в объеме, 2 — прямое моделирование рассеяния на заряженных примесях в объеме.

Мы осуществляли прямое моделирование процесса по методу Монте-Карло анизотропной фотогенерации электронов, распределенных по нормали к поверхности по закону  $\exp(-z)$ . Вектор поляризации света выбирался под углом  $45^\circ$  к поверхности, а параметр  $\lambda \Lambda_p = 1$ , коэффициент диффузности  $\gamma = 0.3$ . Как следует из аналитических формул [2, 3], именно в этом случае зависимость ПФГЭ от характера рассеяния наиболее существенная. Вероятность рассеяния на экранированных заряженных примесях в объеме полупроводника легко моделируется. Для этого достаточно разыграть косинус угла рассеяния в системе отсчета, связанной с начальным импульсом электропа. Мы не ставили перед собой задачу точно смоделировать рассеяние на заряженных примесях, локализованных на поверхности. Мы хотели рассмотреть рассеяние, которое является изотропным в полусфере для  $kr_s \ll 1$  и резко анизотропным, локализованным вблизи направления зеркального отражения для  $kr_s \gg 1$ . Поэтому мы использовали следующую простую модель поверхностного рассеяния. Вероятность рассеяния  $W_{kk'}^{no}$  выбиралась с точностью для нормировки в том же виде, что и для рассеяния в объеме, при этом в случае рассеяния в нефизическую область за поверхность кристалла менялся знак  $k_n$ . В этом случае коэффициент диффузности равен

$$\gamma = (1/8)(kr_s)^{-4} z \psi(z) W_{нов}. \quad (10)$$

Здесь  $W_{\text{нов}}$  — полная вероятность рассеяния на заряженных примесях на поверхности. В результате численного моделирования находилась величина среднего смещения электрона вдоль поверхности после акта фоторождения. Фототок пропорционален этой величине.

На рис. 1, 2 представлена зависимость фототока в относительных единицах от произведения волнового вектора на радиус экранирования  $kz_0$ , рассчитанного для четырех различных моделей рассеяния, которым соответствуют одни и те же значения  $\tau_p$  и  $\gamma$ .

Диапазон изменения волнового вектора электрона  $k$  выбран так, чтобы включить оба предельных случая  $4k^2z_0^2 \gg 1$  и  $4k^2z_0^2 \ll 1$ . Поскольку параметры  $x \cdot \lambda_p = 1$  и  $\gamma = 0.3$ , то концентрация заряженных примесей в объеме и на поверхности была функцией импульса  $k$ . Такой выбор позволяет наиболее четко выде-

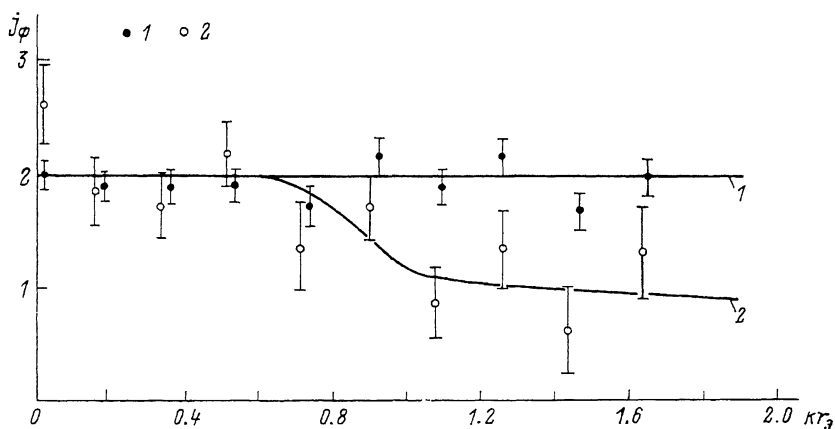


Рис. 2. Зависимость фототока при учете рассеяния на заряженных примесях, локализованных на поверхности от  $kz_0$ .

1 —  $\tau$ -приближение для рассеяния в объеме при моделировании с  $2 \cdot 10^6$  частиц, 2 — прямое моделирование рассеяния на заряженных примесях в объеме при моделировании с  $3 \cdot 10^6$  частиц.

лить зависимость фототока от характера рассеяния. Ошибка расчета определялась по величине поверхностного тока, рассчитанного в направлении, перпендикулярном поляризации света  $e$ .

Из результатов расчетов (рис. 1, 2) следует, что при  $4k^2z_0^2 \ll 1$  все четыре модели рассеяния приводят к одному значению фототока, а при  $4k^2z_0^2 \gg 1$  значения фототока при рассеянии на заряженных примесях в объеме могут отличаться от результатов  $\tau$ -приближения на 50%. Следовательно, попытка определения коэффициента диффузности из экспериментальных данных [5, 6] на основе простой теории [2, 3], если рассеяние происходит на заряженных примесях при  $4k^2z_0^2 \gg 1$ , дает заниженное значение коэффициента диффузности  $\gamma$ .

В заключение отметим, что, несмотря на то что максимальное значение  $4k^2z_0^2$  в наших расчетах было  $\approx 10$ , эти результаты справедливы и при  $4k^2z_0^2 \gg 10$ . Действительно, когда рассеяние происходит вперед, справедливо дифференциальное приближение для интеграла столкновений. Единственным параметром рассеяния в этом случае является время потери импульса. Характер же рассеяния не зависит от того, насколько резко вперед устроено рассеяние.

Мы благодарны А. С. Терехову за интерес к работе, М. В. Энтину за полезные обсуждения.

- [1] Магарилл Л. И., Энтин М. В. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 5. С. 1281—1286.  
 [2] Альперович В. Л., Белиничер В. И., Новиков В. Н., Терехов А. С. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 31. № 10. С. 581—584.  
 [3] Альперович В. Л., Белиничер В. И., Новиков В. Н., Терехов А. С. // ЖЭТФ. 1980. Т. 80. № 6. С. 2298—2312.  
 [4] Зесгер К. Физика полупроводников. М., 1977. С. 616.  
 [5] Альперович В. Л., Белиничер В. И., Гусев Г. М., Новиков В. Н., Терехов А. С. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 34, № 8. С. 437—440.  
 [6] Альперович В. Л., Мишаев А. О., Терехов А. С. // Письма в ЖЭТФ. 1989. Т. 49. № 11. С. 610—614.

Институт физики полупроводников СО РАН  
Новосибирск

Поступило в Редакцию  
10 сентября 1991 г.

УДК 537.312.6

© Физика твердого тела, том 34, № 2, 1992  
Solid State Physics, vol. 34, N 2, 1992

## ПЕРЕХОД МЕТАЛЛ—ПОЛУПРОВОДНИК В $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$ ( $x \leq 0.12$ )

*В. В. Соколов*

Переход металл—полупроводник (ПМП) наблюдается в образцах  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$  ( $x \leq 0.10$ ), содержащих при низкой температуре моноклинную фазу  $\text{CrS}$  [1, 2]. В настоящее время отсутствует достоверная информация о том, что кто-либо получал и исследовал  $\text{CrS}$  в чистом виде. Обычно  $\text{CrS}$  сосуществует с фазой  $\text{Cr}_7\text{S}_8$  [3], являющейся металлом при всех температурах [1]. Поэтому ПМП, наблюдаемые в  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$ , связывают с  $\text{CrS}$ . По мнению авторов работ [1, 4], данные ПМП обусловлены искажением решетки  $\text{CrS}$ .

В соединениях переходных металлов ПМП обычно являются несобственными и сопровождаются структурными либо магнитными фазовыми переходами. Переход в  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$  среди других ПМП выделяется аномально большой областью перехода ( $\Delta T = 300$  К) [1], сложным характером изменения электросопротивления в области перехода [5]. Эти особенности легко можно было бы объяснить, предположив наличие у  $\text{CrS}$  помимо структурного перехода с  $T = 870$  К [6] перехода с  $T = 620$  К. Однако в настоящее время нет сведений, указывающих на наличие в  $\text{CrS}$  фазового превращения при 620 К.

Синтез сульфидов хрома  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$  ( $x \leq 0.12$ ) был проведен в вакуумированных кварцевых ампулах в течение 48 ч при 960 °С. После охлаждения полученные сульфиды растирались в порошок и из него прессовались таблетки. Таблетки отжигались в вакуумированных ампулах при 960 °С в течение 2 ч с последующим охлаждением до комнатной температуры со скоростью 40 град/ч. Рентгенографическое изучение образцов было выполнено на установке ДРОН-2.0 при комнатной температуре. Рентгенограммы образца  $\text{Cr}_{0.88}\text{S}$  содержали рефлексы, соответствующие фазе  $\text{Cr}_7\text{S}_8$ , и несколько рефлексов низкой интенсивности, соответствующих 3С-сверхструктуре [6]. Для образцов  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$  с  $x \leq 0.10$  на рентгенограммах помимо рефлексов фазы  $\text{Cr}_7\text{S}_8$  наблюдались также рефлексы моноклинной фазы  $\text{CrS}$ . При этом с уменьшением  $x$  интенсивность последних возрастала на фоне рефлексов фазы  $\text{Cr}_7\text{S}_8$ .

Изучение температурной зависимости удельного электросопротивления  $\rho(T)$  было проведено в диапазоне температур 300—1100 К. Типичные зависимости  $\rho(T)$ , наблюдаемые для образцов  $\text{Cr}_{1-x}\text{S}$ , представлены на рис. 1. Из этого рисунка хорошо видно, что образец состава  $\text{Cr}_{0.88}\text{S}$ , содержащий только