

# Подвижность электронов при рассеянии на многокомпонентной коррелированной системе примесных центров

© В.М. Михеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,  
620219 Екатеринбург, Россия  
E-mail: mikheev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 8 февраля 2000 г.  
В окончательной редакции 23 мая 2000 г.)

Рассмотрена система, состоящая из двух типов примесных центров, распределенных в пространстве случайным образом. Причем примеси первого типа ионизованы частично, а примеси второго типа ионизованы полностью. Изучаются пространственные корреляции в системе примесных ионов первого типа в условиях, когда радиус корреляции примесного иона ограничен сверху вследствие дефицита нейтральных примесей. Рассмотрено влияние случайным образом расположенных в пространстве мелких доноров (примеси второго типа) на корреляции в системе примесных ионов. Получены уравнения, описывающие влияние мелких доноров на корреляции в системе примесных ионов. Вычислена электронная подвижность при нулевой температуре на примере HgSe:Fe (коррелированная система примесных центров состоит из атомов железа и мелких доноров, концентрация которых выше концентрации Мотта).

Основной вклад в подвижность электронов в полупроводниках при низких температурах вносит примесное рассеяние. В обычных условиях, когда многократное рассеяние пренебрежимо мало, когерентная составляющая рассеяния связана с корреляциями в пространственном расположении примесных центров. Интерференционные эффекты в рассеянии, приводящие к увеличению подвижности электронов, в последние годы широко изучались в соединениях HgSe:Fe, в которых существенны корреляции в расположении ионов железа Fe<sup>3+</sup> [1,2]. В работе автора [3] предложена теория, описывающая пространственные корреляции примесных ионов в твердых телах. При этом был рассмотрен частный случай, когда коррелированные рассеиватели являются частицами одного сорта. В качестве приложения нашей теории мы рассмотрели подвижность электронов в HgSe:Fe при рассеянии на коррелированной системе ионов железа [3]. Однако в реальности примесные системы представляют собой многокомпонентные системы, состоящие из примесных центров разных сортов. В частности, в случае HgSe:Fe вклад в подвижность вносит рассеяние на ионах железа Fe<sup>3+</sup>, на атомах железа, нейтральных относительно решетки, Fe<sup>2+</sup> и на так называемых собственных донорах, концентрация которых зависит от степени очистки образца и является неконтролируемой величиной. Поэтому актуальной является задача о вычислении подвижности при рассеянии электронов на многокомпонентной системе коррелированных примесных центров. В предлагаемой работе мы распространили нашу теорию [3] на этот случай и рассмотрели в качестве примера электронную подвижность в соединениях HgSe:Fe при низких температурах.

## 1. Связь между корреляционными функциями и подвижность при рассеянии электронов на многокомпонентных примесных системах

В основу нашей теории положено выражение для времени релаксации импульса электрона при упругом рассеянии на системе примесных центров, вычисленное в борновском приближении при  $T = 0$  [4,5],

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{2}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3 n_e} \int_0^{2k_F} q^3 dq \sum_{\alpha, \beta} V_\alpha(q) V_\beta^*(q) \\ &\times \left\langle \sum_{i=1}^{n_\alpha} \sum_{j=1}^{n_\beta} \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i^\alpha - \mathbf{r}_j^\beta)) \right\rangle \left\langle \sum_{i=1}^{n_\alpha} \sum_{j=1}^{n_\beta} \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_i^\alpha - \mathbf{r}_j^\beta)) \right\rangle \\ &= \begin{cases} n_\alpha \delta_{\alpha\beta} & (\mathbf{r}_i^\alpha = \mathbf{r}_j^\beta), \\ n_\alpha n_\beta g_{\alpha\beta}(q) & (\mathbf{r}_i^\alpha \neq \mathbf{r}_j^\beta). \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

В случае однородного и изотропного распределения примесных центров в пространстве имеем

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}(q) &= \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) [\tilde{g}_{\alpha\beta}(r) - 1], \\ g_{\alpha\beta}(q) &= g_{\alpha\beta}(q). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $\tilde{g}_{\alpha\beta}(r)$  — парная корреляционная функция, связывающая взаимное расположение примесных центров

сорта  $\alpha$  и  $\beta$ ,  $V_\alpha(q)$  — матричный элемент рассеивающего потенциала,  $n_\alpha$  — парциальная концентрация примесных центров,  $n_e$  — концентрация электронов,  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми. Для простоты мы положили объем рассматриваемой системы равным  $V = 1$ .

Границы применимости нашей простой теории определяются двумя условиями. Условие применимости кинетического уравнения Больцмана в случае вырожденного электронного газа выражается неравенством  $\hbar/\tau\varepsilon_F \ll 1$ . Условие применимости борновского приближения выражается неравенством  $|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2} k_F a$ . Здесь  $k_F$  — волновое число электрона на поверхности Ферми,  $a$  — эффективный радиус действия потенциала.

Формулы (1), (2) позволяют довести вычисление подвижности  $\mu = e\tau/m$  до численных значений лишь в двух частных случаях: либо когда все рассеивающие центры распределены в пространстве случайным образом, либо в случае рассеяния на коррелированном распределении рассеивателей одного сорта. В случае многокомпонентных коррелированных систем рассеивателей вычисление подвижности  $\mu$  по формулам (1), (2) можно довести до конца лишь при дополнительных модельных допущениях, отражающих специфику задачи. В качестве такой конкретной системы мы рассмотрим коррелированные примесные центры в  $\text{HgSe}:\text{Fe}$ , а также исследуем поведение электронной подвижности при  $T = 0$ .

В  $\text{HgSe}:\text{Fe}$  вклад в примесное рассеяние вносят атомы железа, концентрация которых  $n_F$  задается при приготовлении образцов, и собственные доноры, концентрация которых  $n_D$  является неконтролируемой величиной и характеризует чистоту образца. Поставщиками электронов в зону проводимости являются атомы железа, энергетический уровень которых лежит в зоне проводимости, и собственные доноры, концентрация которых больше моттовской, соответствующей переходу металл–диэлектрик. При концентрации электронов, меньшей некоторого критического значения  $n_c$ , все атомы железа ионизованы и концентрация примесных ионов  $n^+ = n_e = n_F^+ + n_D$ , где  $n_F^+$  — концентрация ионов железа  $\text{Fe}^{3+}$ . При выполнении условия  $n_e = n_c$  уровень Ферми привязывается к резонансному уровню железа [1,2], поэтому при выполнении условия  $n_F + n_D > n_c$  концентрация ионов железа фиксируется, а часть атомов железа остается в состоянии  $\text{Fe}^{2+}$ , нейтральном относительно решетки. При этом концентрации примесных центров связаны между собой соотношениями

$$\begin{aligned} n_r &= n_F + n_D, \\ n_F &= n_F^+ + n_F^0, \\ n^+ &= n_F^+ + n_D. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $n_r$  — полная концентрация всех примесных центров, а  $n_F^0$  — концентрация нейтральных относительно решетки атомов железа  $\text{Fe}^{2+}$ . Мы считаем, что все примесные центры расположены в пространстве случайным образом. Однако ионы железа под действием сил кулоновского отталкивания перераспределяются

в пространстве, стремясь расположиться на возможно больших расстояниях друг от друга, что и приводит к корреляциям в системе примесных центров [2]. Введем парциальные корреляционные функции  $\tilde{g}_{++}^{FF}(r)$ ,  $\tilde{g}_{++}^{DD}(r)$ ,  $\tilde{g}_{00}^{FF}(r)$ , которые описывают корреляции в пространственном расположении ионов железа относительно друг друга, ионов мелких доноров и нейтральных атомов железа соответственно. Пусть смешанная корреляционная функция  $\tilde{g}_{0+}^{FF}(r)$  описывает корреляции в расположении ионов железа относительно нейтральных атомов железа,  $\tilde{g}_{++}^{FD}(r)$  отвечает за корреляции в расположении ионов железа относительно ионов мелких доноров, а  $\tilde{g}_{0+}^{FD}(r)$  — за корреляции в расположении нейтральных атомов железа относительно ионов мелких доноров.

Тогда в принятой нами модели [2] время релаксации  $\tau$ , согласно (1) и (2), выражается через Фурье-образы шести парциальных корреляционных функций

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{2}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3 n_e} \int_0^{2k_F} q^3 dq \left\{ |V_0(q)|^2 \left( n_F^0 + n_F^{02} g_{00}^{FF}(q) \right) \right. \\ &+ |V_+(q)|^2 \left[ n^+ + n_F^{+2} g_{++}^{FF}(q) + n_D^2 g_{++}^{DD}(q) \right. \\ &+ \left. \left. 2n_F^+ n_D g_{++}^{FD}(q) \right] + \left[ V_0(q)V_+^*(q) + V_0^*(q)V_+(q) \right] \right. \\ &\left. \times \left[ n_F^0 n_F^+ g_{0+}^{FF}(q) + n_F^0 n_D g_{0+}^{FD}(q) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $V_0(q)$  — матричный элемент потенциала рассеяния на нейтральном атоме железа,  $V_+(q)$  — матричный элемент рассеяния на примесном ионе (мы положили, что все примесные ионы независимо от их природы имеют один и тот же потенциал рассеяния),  $g_{++}^{FF}(q)$ ,  $g_{++}^{DD}(q)$ ,  $g_{00}^{FF}(q)$ ,  $g_{++}^{FF}(q)$ ,  $g_{++}^{FD}(q)$ ,  $g_{0+}^{FD}(q)$  — Фурье-образы парциальных корреляционных функций.

Специфика многокомпонентных систем заключается в том, что в этих системах парциальные корреляционные функции не являются независимыми, а связаны друг с другом универсальными уравнениями. Эти универсальные уравнения позволяют при выборе подходящей модели сократить число парциальных корреляционных функций, подлежащих вычислению. Одно из таких универсальных уравнений мы получим, выразив полную корреляционную функцию, описывающую корреляции в системе примесных центров,  $\tilde{g}_{rr}(r)$  через парциальные корреляционные функции

$$\begin{aligned} n_r^2 \tilde{g}_{rr}(r) &= n_F^{+2} \tilde{g}_{++}^{FF}(r) + n_F^{02} \tilde{g}_{00}^{FF}(r) + n_D^2 \tilde{g}_{++}^{DD}(r) \\ &+ 2n_F^+ n_F^0 \tilde{g}_{0+}^{FF}(r) + 2n_F^+ n_D \tilde{g}_{++}^{FD}(r) + 2n_F^0 n_D \tilde{g}_{0+}^{FD}(r). \end{aligned} \quad (5)$$

Второе универсальное уравнение мы получим, выразив полную корреляционную функцию подсистемы, состоящей из атомов железа,  $\tilde{g}_{FF}(r)$ , через парциальные корреляционные функции

$$n_F^2 \tilde{g}_{FF}(r) = n_F^{+2} \tilde{g}_{++}^{FF}(r) + n_F^{02} \tilde{g}_{00}^{FF}(r) + 2n_F^0 n_F^+ \tilde{g}_{0+}^{FF}(r). \quad (6)$$

Поскольку все примесные центры расположены в пространстве случайным образом, отсюда следует равенство

$$\tilde{g}_{rr}(r) = \tilde{g}_{FF}(r) = \tilde{g}_{++}^{DD}(r) = 1. \quad (7)$$

Напомним, что корреляции в системе рассеивателей связаны исключительно с упорядочением ионов железа  $\text{Fe}^{3+}$ . Кулоновское отталкивание перераспределяет ионы железа таким образом, что вокруг любого иона железа можно провести сферу радиусом  $r_c$ , внутри которой не содержится ионов железа. Это означает, что корреляционная функция  $\tilde{g}_{++}^{FF}(r)$  отлична от единицы. С другой стороны, объем сферы радиусом  $r_c$ , окружающей ион железа, заполнен нейтральными атомами железа, и, следовательно, корреляционная функция  $\tilde{g}_{0+}^{FF}(r)$  также отлична от единицы. Аналогично корреляции в расположении ионов железа относительно иона собственного донора ( $\tilde{g}_{++}^{FD}(r) \neq 1$ ) приводят к корреляции в расположении нейтральных атомов железа относительно иона мелкого донора ( $\tilde{g}_{0+}^{FD}(r) \neq 1$ ). При этом существенно, что перераспределение ионов железа в пространстве не должно приводить к корреляциям в расположении нейтральных атомов железа относительно друг друга. Действительно, поскольку сами атомы железа расположены в пространстве случайным образом, плотность атомов железа, а следовательно, и ионов железа флуктуирует в пространстве. В тех областях пространства, где плотность ионов железа имеет аномально большие значения, аномально велика и энергия кулоновского отталкивания. С ростом концентрации атомов железа ионы железа перераспределяются таким образом, чтобы понизить энергию кулоновского отталкивания. При этом очевидно, что самым эффективным способом понизить энергию системы будет распределение нейтральных атомов железа в тех местах, где плотность ионов имеет аномально большие значения. Поскольку сами флуктуации плотности распределены в пространстве случайным образом, и расположение нейтральных атомов железа относительно друг друга окажется близким к случайному. Поэтому в рамках нашей модели мы считаем распределение нейтральных атомов железа близким к случайному и полагаем

$$\tilde{g}_{00}^{FF}(r) = 1. \quad (8)$$

Заметим, что вопрос о связи между парциальными корреляционными функциями в  $\text{HgSe}:\text{Fe}$  в идеализированном случае чистого образца ( $n_D = 0$ ) рассматривался в [6]. Авторы работы [6] ссылаются на статью [7], из которой они выписали некие эвристические уравнения, связывающие парциальные корреляционные функции в системе, состоящей из частиц двух сортов ( $A$  и  $B$ ). Эти уравнения (формулы (1) и (2) в [7]) были получены в предположении, что корреляционные функции, описывающие взаимное расположение частиц сорта  $A$  относительно друг друга и частиц сорта  $B$  относительно друг друга, мало отличаются ("when  $g_A(r)$  and  $g_B(r)$  are the same"). В случае  $\text{HgSe}:\text{Fe}$  взаимодействие между нейтральными атомами железа мало по сравнению с

энергией кулоновского отталкивания между ионами железа. Поэтому корреляционные функции  $\tilde{g}_{++}^{FF}(r)$  и  $\tilde{g}_{00}^{FF}(r)$  не имеют между собой никакого сходства, и эвристические уравнения работы [7] в нашем случае неприменимы. В нашей теории для установления связей между парциальными корреляционными функциями мы использовали универсальные уравнения (5) и (6), которые следуют из определения полной корреляционной функции для системы, состоящей из частиц нескольких сортов.

Применив Фурье-преобразование к уравнениям (5), (6) и учитывая соотношения (7), (8), выразим парциальные корреляционные функции, описывающие корреляции в расположении нейтральных атомов, через парциальные корреляционные функции, описывающие корреляции в системе примесных ионов,

$$\begin{aligned} g_{0+}^{FD}(q) &= -\frac{n_F^+}{n_F^0} g_{++}^{FD}(q), \\ g_{0+}^{FF}(q) &= -\frac{1}{2} \frac{n_F^+}{n_F^0} g_{++}^{FF}(q). \end{aligned} \quad (9)$$

Подставляя выражения (7)–(9) в формулу (4), получим окончательное выражение для времени релаксации импульса электрона  $\tau$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} &= \frac{2}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3 n_e} \int_0^{2k_F} q^3 dq \left\{ |V_0(q)|^2 n_F^0 + |V_+(q)|^2 (n_F^+ + n_D) \right. \\ &+ \frac{1}{2} \left[ V_+(q) (V_+^*(q) - V_0^*(q)) + V_+^*(q) (V_+(q) - V_0(q)) \right] \\ &\left. \times \left[ n_F^{+2} g_{++}^{FF}(q) + 2n_F^+ n_D g_{++}^{FD}(q) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Согласно (10), интерференционная добавка к рассеянию, выраженная через парциальные корреляционные функции, тем больше, чем больше разность потенциалов рассеяния, и стремится к нулю в пределе  $V_+(q) \rightarrow V_0(q)$ . Это свойство формулы (10) является следствием наших модельных допущений, согласно которым примесные центры распределены в пространстве случайным образом (7), а корреляции связаны исключительно с расположением ионов железа в пространстве. Поэтому интерференционные добавки в рассеянии возникают лишь благодаря различию в потенциалах рассеяния на нейтральном центре и ионе.

Поскольку потенциал рассеяния электрона на нейтральном атоме железа мал по сравнению с потенциалом рассеяния на ионе железа, мы, учитывая неравенство  $V_0(q) \ll V_+(q)$ , положили  $V_0(q) = 0$  в слагаемом формулы (10), содержащем корреляционные функции. В этом приближении вклад в интерференцию, связанный с корреляциями в расположении нейтральных атомов железа относительно ионов, равен нулю, а формулы для

расчета электронной подвижности  $\mu$  принимают вид

$$\begin{aligned}\mu &= \mu_0 \mu_+ / [\mu_0 + \mu_+], \\ \mu_0 &= \frac{e}{m} / \{ |V_0(q)|^2 / |V_+(q)|^2 \} n_F^0, \\ \mu_+ &= \frac{e}{m} / \left[ \{1\} n^+ + \{g_{++}^{FF}(q)\} n_F^{+2} + 2n_F^+ n_D \{g_{++}^{FD}(q)\} \right],\end{aligned}\quad (11)$$

где

$$\{f(q)\} = \frac{2}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3 n_e} \int_0^{2k_F} q^3 dq |V_+(q)|^2 f(q).$$

Здесь  $\mu_0$  — подвижность электронов, связанная с рассеянием на нейтральных атомах железа, а  $\mu_+$  — подвижность, связанная с рассеянием на примесных ионах.

## 2. Вычисление корреляционных функций

В идеализированном случае чистых образцов ( $n_D = 0$ ) корреляционная функция  $g_{++}^{FF}(q)$  была вычислена в работах [2,3,8] для соединений HgSe:Fe в модели "жестких" сфер. Диаметр жесткой сферы  $r_c$  (в нашем случае эта величина играет роль радиуса корреляционной сферы) отождествляется с минимальным расстоянием между ионами железа. Чем больше отношение  $C = n_F/n_F^+$ , тем больше расстояние, на которое могут раздвинуться ионы железа, и, следовательно, тем больше величина  $r_c$ . В каждой из работ [2,3,8] использовалось свое основное уравнение теории, связывающее диаметр жесткой сферы  $r_c$  с концентрациями атомов железа  $n_F$  и ионов железа  $n_F^+$ , и в этом главное различие между этими работами. В [9,10] произведен учет влияния собственных доноров на корреляционные эффекты в соединениях HgSe:Fe. При этом попросту модифицировалось основное уравнение теории, записанное для случая  $n_D = 0$ . Поэтому, прежде чем мы перейдем к построению более реалистической модели, включающей в себя собственные доноры, необходимо исследовать основное уравнение теории для случая  $n_D = 0$ .

Для начала рассмотрим предельный случай  $C \rightarrow 1$ . В этом случае  $V_c n_F^+ \ll 1$  ( $V_c = 4\pi r_c^3/3$  — объем корреляционной сферы), и корреляционные сферы не перекрываются. По определению, в объеме корреляционной сферы содержатся только нейтральные атомы железа. Поэтому объем, занимаемый ионами железа, составляет величину  $1 - V_c n_F^+$ . Концентрация ионов железа равна концентрации атомов железа, умноженной на объем, приходящийся на ионы железа. Следовательно, в предельном случае  $C \rightarrow 1$  (напомним, что  $C = n_F/n_F^+$ ) имеем

$$n_F^+ = n_F (1 - V_c n_F^+). \quad (12)$$

В пределе  $n_F/n_F^+ \rightarrow 1$  основное уравнение теории должно переходить в уравнение (12) (при этом

$(d\eta/dC) \rightarrow 1/8$ , где  $\eta = V_c n_F^+/8$  — коэффициент упаковки). Сравним асимптотику основного уравнения теории, положенного в основу работ [2,3,8], с уравнением (12).

В работе [2] основное уравнение теории постулировалось в виде

$$V_c n_F^+ = 1 - \exp(-V_c n_F).$$

В пределе  $C \rightarrow 1$  это уравнение принимает вид

$$n_F^+ = n_F \left( 1 - \frac{1}{2} V_c n_F \right),$$

а  $(d\eta/dC) \rightarrow 1/4$ . Таким образом, уравнение из [2] имеет неверную асимптотику, завышая скорость роста коэффициента упаковки в 2 раза.

В [8] основное уравнение теории постулировалось в виде

$$\frac{\eta}{\eta_L} = 1 - \exp\left(-\frac{\eta}{\eta_L} \frac{n_F}{n_F^+}\right),$$

где подгоночный параметр  $\eta_L = 0.45$ . В пределе  $C \rightarrow 1$  это уравнение принимает вид

$$n_F^+ = n_F \left( 1 - \frac{1}{16\eta_L} V_c n_F \right),$$

а  $(d\eta/dC) \rightarrow 2\eta_L$ . Таким образом, уравнение [8] также имеет неверную асимптотику. Причем это уравнение завышает скорость роста коэффициента упаковки на порядок. Итак, в основу расчетов работ [2,8] положены уравнения, имеющие неверную асимптотику в пределе  $C = n_F/n_F^+ \rightarrow 1$ . Поэтому мы считаем, что оценки, проведенные в этих работах, не могут претендовать на количественное описание.

В работе автора [3] основное уравнение теории было получено методами статистической физики и имеет вид

$$n^+ = n \left( 1 - \frac{V_c}{V_m} \right)^{n_m}, \quad (13)$$

где  $n^+$  — концентрация примесных ионов,  $n$  — концентрация примесных центров,  $V_m$  — максимальное значение, которое может принимать корреляционный объем  $V_c$ , а  $n_m = n^+ V_m$  — число примесных ионов из этого объема, перераспределившихся в сферический слой  $r_c < r < r_m$ . При перераспределении ионов железа величина  $V_m = V_1 = 4\pi r_1^3/3$ , где  $r_1$  — радиус первой координационной сферы для ГЦК-структуры, а  $n_m = a = 5.92$  [3]. Уравнение (13) имеет правильную асимптотику и в пределе  $n_F/n_F^+ \rightarrow 1$  переходит в уравнение (12). Поэтому при учете влияния мелких доноров на корреляции в расположении ионов железа именно уравнение (13) положено нами в основу нашей теории.

При расчете подвижности  $\mu$  по формулам (11) необходимо вычислить в модели жестких сфер две корреляционные функции  $g_{++}^{FF}(q)$  и  $g_{++}^{FD}(q)$ . При этом необходимо учитывать, что наличие случайным образом расположенных в пространстве ионов мелких доноров

ослабляет корреляции в расположении ионов железа. При достаточно больших концентрациях мелких доноров, когда энергия взаимодействия ионов железа намного меньше энергии взаимодействия ионов железа с мелкими донорами, корреляционная функция  $g_{++}^{FF}(q)$  равна нулю ( $g_{++}^{FF}(r) = 1$ ), и корреляции в системе примесных ионов описываются лишь функцией  $g_{++}^{FD}(q)$ , отвечающей за корреляции в расположении ионов железа относительно мелких доноров. Ограничимся рассмотрением случая не очень больших концентраций мелких доноров. В этом случае можно построить простую модель, которая позволяет довести расчеты до числа. Пусть выполнено условие  $n_F + n_D > n_c$ . Тогда с ростом концентрации железа ионы железа начнут упорядочиваться, стремясь расположиться как можно дальше друг от друга. Очевидно, что при этом каждый мелкий донор можно окружить корреляционной сферой некоего радиуса  $\tilde{r}_c$ , такого что в корреляционном объеме  $\tilde{V}_c = 4\pi\tilde{r}_c^3/3$ , окружающем каждый мелкий донор, содержатся лишь нейтральные атомы железа. Ионам железа энергетически невыгодно располагаться внутри этих корреляционных объемов вследствие кулоновского отталкивания между ионами железа и мелкими донорами. Поэтому ионы железа перераспределяются только по тем атомам железа, которые расположены вне корреляционных объемов радиуса  $\tilde{r}_c$ . Исключим из рассмотрения эти атомы железа, вырезав из системы примесных центров корреляционные объемы  $\tilde{V}_c$  вместе с мелкими донорами, которые являются центрами этих объемов, и вычислим корреляционную функцию, описывающую взаимное расположение ионов железа в такой "дырчатой" системе. Поскольку мелкие доноры расположены в пространстве случайным образом, и расположение атомов железа в такой "дырчатой" системе также случайно. Поэтому мы считаем, что корреляционные функции в такой "дырчатой" системе следует вычислять так же, как и в системе, состоящей из случайным образом расположенных атомов железа в идеальном образце ( $n_D = 0$ ). При этом в качестве основного уравнения теории следует использовать уравнение (13), в котором концентрацию атомов железа  $n_F$  необходимо заменить на эффективную концентрацию  $\tilde{n}_F = n_F(1 - \tilde{V}_c n_D)$ . Таким образом, уравнение для определения параметра  $V_c$  принимает вид

$$n_F^+ = n_F(1 - \tilde{V}_c n_D) \left(1 - \frac{V_c}{V_1}\right)^a. \quad (14)$$

Основное уравнение теории (14) позволяет вычислить корреляционную функцию  $g_{++}^{FF}(q)$  при условии, что нам известен корреляционный объем  $\tilde{V}_c$ .

Очевидно, что при перераспределении ионов железа относительно фиксированных в пространстве ионов мелких доноров максимально возможное значение корреляционного объема  $\tilde{V}_c$  равно объему, приходящемуся на один примесный ион —  $V_m = 1/n^+$ , а число перераспределяемых ионов из этого объема  $n_m$ , естественно, равно единице. Подставляя в уравнение (13)  $V_m = 1/n^+$

и  $n_m = 1$ , получим второе уравнение нашей системы уравнений для определения корреляционного объема  $\tilde{V}_c$

$$n_F^+ = n_F(1 - \tilde{V}_c n^+). \quad (15)$$

В предельном случае  $n_F/n_F^+ \rightarrow 1$ , когда корреляционные сферы не перекрываются, объем занимаемый ионами железа, равен  $1 - V_c n_F^+ - \tilde{V}_c n_D$ . Поэтому в таком предельном случае связь между корреляционными объемами и концентрациями примесных ионов выражается уравнением

$$n_F^+ = n_F(1 - V_c n_F^+ - \tilde{V}_c n_D). \quad (16)$$

Уравнение (14) в пределе  $n_F/n_F^+ \rightarrow 1$  переходит в (16), а уравнение (15) совпадает с (16) при очевидном предельном переходе  $V_c \rightarrow \tilde{V}_c$  при  $n_F/n_F^+ \rightarrow 1$ . Таким образом, уравнения (14) и (15) имеют правильную асимптотику. Если выражение для корреляционного объема  $\tilde{V}_c$  из уравнения (15) подставить в (14), то вместо системы из двух взаимосвязанных уравнений (14) и (15) можно записать эквивалентную систему, состоящую из двух независимых уравнений,

$$\tilde{V}_c n_c = 1 - \frac{n_F^+}{n_F}, \quad (17a)$$

$$\eta = \frac{1}{8}a \left[1 - \left[\frac{n_c}{n_F(1 + n_D/n_F)}\right]^{1/a}\right]. \quad (17b)$$

Условие  $n_F + n_D > n_c$  определяет нижнюю границу значений  $n_F$ , при которых справедлива система уравнений (17). Верхнюю границу можно определить из следующих соображений. Радиус корреляции  $r_c$  не может быть больше радиуса экранирования, поскольку на большем расстоянии кулоновское взаимодействие между ионами пренебрежимо мало и перераспределения ионов не происходит. Радиус экранирования вычислим по формуле Томаса–Ферми  $r_{TF} = 6\pi n_c e^2 / \kappa \epsilon_F$  и оценим максимальное значение коэффициента упаковки величиной  $\eta_m = \pi r_{TF}^3 n_F^+ / 6$ . Система уравнений (17) справедлива лишь в области концентраций атомов железа  $n_F$ , при которых  $r_c < r_{TF}$ , поскольку лишь в этой области значение коэффициента упаковки ограничивается сверху дефицитом атомов железа. Поэтому в области больших концентраций атомов железа мы вынуждены ограничиться оценкой и положить  $\eta = \eta_m$ . При проведении численных оценок используем следующие параметры:  $n_c = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\epsilon_F = 210 \text{ meV}$ ,  $m = 0.07m_0$ ,  $\kappa = 20$  [1]. При этих параметрах радиус экранирования Томаса–Ферми имеет значение  $r_{TF} = 6.8 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ , а коэффициент упаковки ограничен сверху значением  $\eta_m = 0.475(n_c - n_D)/n_c$ .

Система уравнений (17) позволяет вычислить корреляционные функции в модели жестких сфер. Корреляционная функция  $\tilde{g}_{++}^{FD}(r)$ , описывающая расположение

мелких доноров относительно иона железа, вычислялась по формуле

$$\tilde{g}_{++}^{FD}(r) = \begin{cases} 0 & r < \tilde{r}_c, \\ 1 & r \geq \tilde{r}_c. \end{cases} \quad (18)$$

Корреляционная функция  $\tilde{g}_{++}^{FF}(r)$ , описывающая расположение ионов железа относительно друг друга, вычислялась методом Перкуса–Йевики [5].

Здесь уместно напомнить, что в нашей теории подвижность вычисляется из кинетического уравнения Больцмана в борновском приближении при учете экранирования кулоновского потенциала примесных ионов в рамках линейной теории Томаса–Ферми. Выполнение этих условий требует малости следующих параметров, которые в случае HgTe:Fe по порядку величины составляют:  $\hbar/\tau\varepsilon_F \approx 3 \cdot 10^{-3}$  (условие применимости уравнения Больцмана),  $(k_F a_B)^{-1} \approx 0.1$  (условие применимости борновского приближения в случае кулоновского потенциала рассеяния),  $e^2/\kappa\tilde{r}\varepsilon_F \approx 5 \cdot 10^{-2}$  (условие применимости теории Томаса–Ферми). Здесь  $\tilde{r}$  — среднее расстояние между электронами,  $a_B$  — радиус борновской орбиты, а  $\tau$  — время релаксации импульса электрона, при оценке которого мы использовали значение подвижности  $\mu = 4 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ . Приведенные нами оценки показывают, что в случае HgSe:Fe высокая концентрация электронов проводимости ( $n_e \approx 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) обеспечивает малость основных параметров теории, развитой нами для вычисления подвижности в вырожденном электронном газе.

### 3. Подвижность электронов при $T = 0$

Обсуждение результатов вычислений начнем со случая подвижности  $\mu^+$ , обусловленной рассеянием на примесных ионах, которая вычисляется по формулам (11), (17) и (18). При анализе результатов вычислений удобно выделить из формулы (11) для  $\mu^+$  относительный вклад в электросопротивление от интерференции, связанной с корреляцией в расположении ионов железа относительно мелких доноров,  $\Delta\rho_{FD}/\rho_0$ , и вклад от интерференции, связанный с корреляцией в расположении ионов железа относительно друг друга,  $\Delta\rho_{FF}/\rho_0$ ,

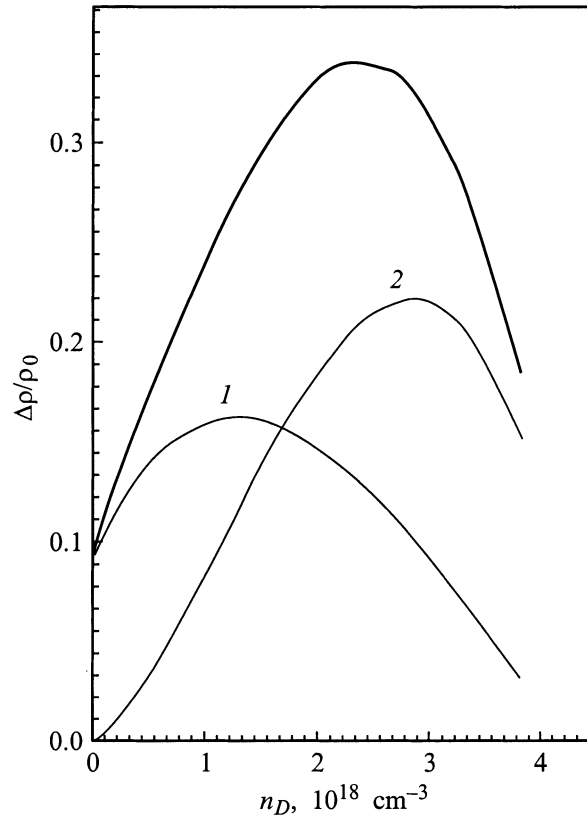
$$\frac{\Delta\rho_{FD}}{\rho_0} = \frac{2n_F^+ n_D}{n_c} \frac{\{g_{++}^{FD}(q)\}}{\{1\}},$$

$$\frac{\Delta\rho_{FF}}{\rho_0} = \frac{n_F^{+2}}{n_c} \frac{\{g_{++}^{FF}(q)\}}{\{1\}}, \quad (19)$$

где

$$\{f(q)\} = \frac{2}{3} \frac{m}{(2\pi\hbar)^3 n_e} \int_0^{2k_F} q^3 dq |V_+(q)|^2 f(q).$$

Здесь  $\rho_0$  — сопротивление, вычисленное на случайном распределении примесных ионов. Полный вклад в сопротивление от интерференционных эффектов обозна-



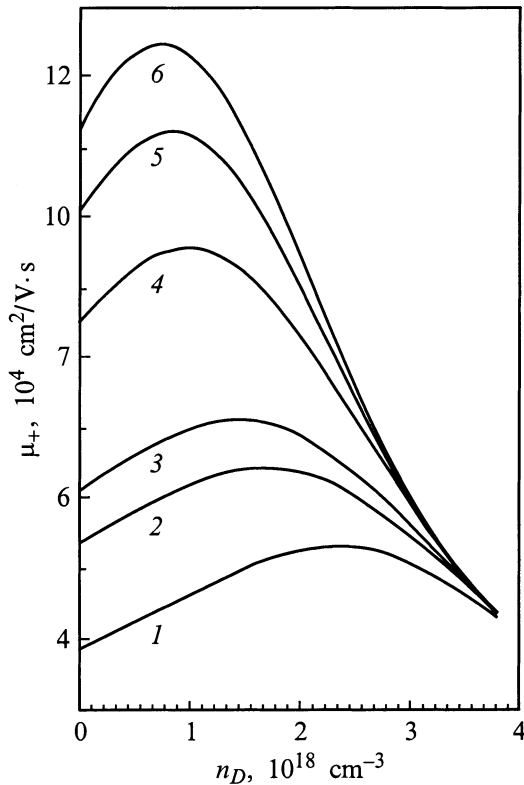
**Рис. 1.** Зависимость электросопротивления от концентрации мелких доноров  $n_D$ . Жирная кривая — вклад в сопротивление от интерференции при рассеянии на примесных ионах  $-\Delta\rho/\rho_0$ , 1 — вклад в сопротивление от интерференции при рассеянии на ионах железа  $-\Delta\rho_{FF}/\rho_0$ , 2 — вклад в сопротивление от интерференции при рассеянии на ионах железа и мелких донорах  $-\Delta\rho_{FD}/\rho_0$ . Концентрация атомов железа  $n_F = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

чим через  $\Delta\rho = \Delta\rho_{FD} + \Delta\rho_{FF}$ . Рассеяние электрона на примесном ионе будем описывать как рассеяние на экранированном кулоновском центре и положим  $V_+(q) = (4\pi e^2)/\kappa(q^2 + r_{TF}^{-2})$ . В этом приближении формула для  $\mu^+$  (11) в пределе  $g_{++}^{FF}(q) \rightarrow 0$  и  $g_{++}^{FD}(q) \rightarrow 0$  переходит в хорошо известную формулу Брукса–Херринга для подвижности.

Результаты вычислений электросопротивления как функции от  $n_D$  в частном случае  $n_F = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  представлены на рис. 1. Кривая 1 изображает вклад в сопротивление  $-\Delta\rho_{FF}/\rho_0$  от интерференции при рассеянии на ионах железа. Этот вклад в электросопротивление (19) представляет собой произведение интеграла, содержащего корреляционную функцию, на концентрационный множитель  $n_F^{+2}/n_c$ , монотонно убывающий с ростом  $n_D$ . Согласно (17b), коэффициент упаковки  $\eta = \pi r_c^3 (n_c - n_D)/6$  может только увеличить свое значение с ростом концентрации мелких доноров, и, следовательно, диаметр жесткой сферы  $r_c$  увеличивается с ростом  $n_D$ . Поэтому при значениях  $r_c < r_{TF}$  интеграл

$\{g_{++}^{FF}(q)\}$  является монотонно возрастающей функцией от  $n_D$ , а величина  $-\Delta\rho_{FF}/\rho_0$ , представляющая собой произведение монотонно убывающей функции на монотонно возрастающую функцию, достигает максимума при некотором значении концентрации мелких доноров. Кривая 2 изображает вклад в сопротивление  $-\Delta\rho_{FD}/\rho_0$  от интерференции, связанной с корреляцией в расположении ионов железа относительно мелкого донора. Согласно (17а), диаметр жесткой сферы  $\tilde{r}_c$  монотонно возрастает с ростом  $n_D$ . Вследствие этого интеграл  $\{g_{++}^{FD}(q)\}$  монотонно возрастает с ростом  $n_D$ , в то время как концентрационный множитель  $n_F^+ n_D$  достигает максимума при  $n_D = n_c/2$ . Поэтому сопротивление  $-\Delta\rho_{FD}/\rho_0$  достигает максимума при концентрации мелких доноров, близкой к величине  $n_c/2$ . Полный вклад от интерференции в электросопротивление состоит из двух слагаемых и приводит к максимуму электросопротивления  $-\Delta\rho$  (жирная кривая на рис. 1). Поскольку вклад в электросопротивление от интерференции представлен отрицательной величиной, подвижность электронов при рассеянии на примесных ионах  $\mu^+$  как функция концентрации мелких доноров имеет максимум.

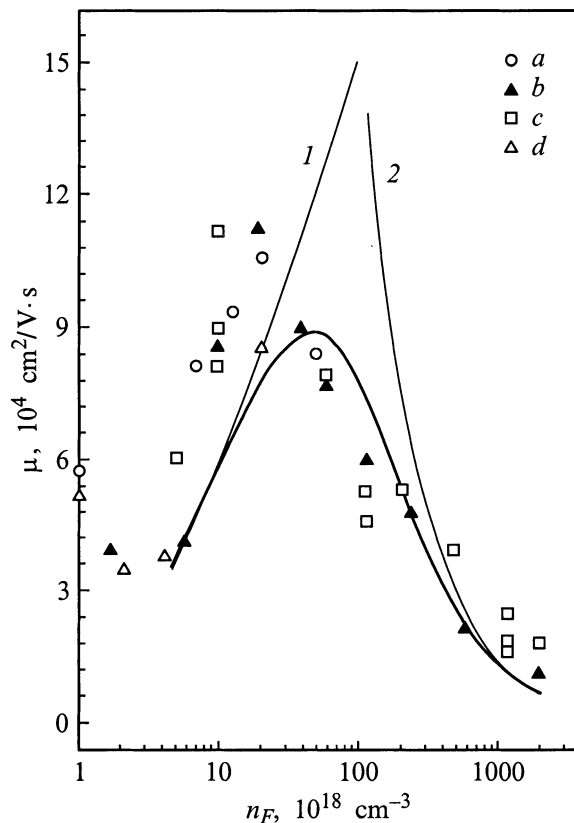
На рис. 2 представлены зависимости подвижности электронов  $\mu^+$  от концентрации мелких доноров. При расчетах мы положили  $\mu_{+0} = 3.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  ( $\mu_{+0} = e/mn^+\{1\}$  — подвижность электронов при рассе-



**Рис. 2.** Зависимость подвижности  $\mu_+$ , связанной с рассеянием на примесных ионах, от концентрации мелких доноров  $n_D$ . Кривые 1–6 соответствуют концентрации атомов железа  $n_F$  ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ): 1 — 5, 2 — 8, 3 — 10, 4 — 20, 5 — 30, 6 — 40.

янии на случайным образом расположенных примесных ионах). Из рис. 2 видно, что относительное значение подвижности в максимуме  $\Delta\mu_+/\mu_{+0}$  уменьшается с ростом концентрации железа. Так, при  $n_F = 5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  (кривая 1)  $\Delta\mu_+/\mu_{+0} = 0.4$ , а при  $n_F = 4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  (кривая 6)  $\Delta\mu_+/\mu_{+0} = 0.1$ . Это обстоятельство следует непосредственно из формул (17), согласно которым чем больше концентрация атомов железа, тем ближе величина диаметра жесткой сферы к своему предельному значению и, следовательно, тем меньше величина, на которую может увеличиться диаметр жесткой сферы с ростом концентрации мелких доноров. При возрастании концентрации атомов железа  $n_F$  положение максимума на кривой  $\mu_+(n_D)$  сдвигается в область малых значений  $n_D$ . Согласно нашим расчетам, концентрация мелких доноров, при которой достигается максимум подвижности,  $n_{Dm}$ , расположена в интервале значений  $n_{Dm} \leq 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

Впервые влияние мелких доноров на электронную подвижность в HgSe:Fe исследовалось в [9]. В расчетной схеме, использованной в этой работе, имеются две непоследовательности. Во-первых, в основу расчетов положено основное уравнение теории для определения диаметра жесткой сферы, постулированное в [2]. Это уравнение имеет неверную асимптотику в пределе  $n_F^+ \rightarrow n_F$  и поэтому не подходит для описания корреляции в расположении ионов железа. Во-вторых, авторы [9] положили  $g_{++}^{FF}(q) = g_{++}^{FD}(q)$ . На самом деле корреляции в расположении ионов железа относительно друг друга и корреляции в расположении ионов железа относительно фиксированного в пространстве иона мелкого донора описываются различными корреляционными функциями. Естественно, что полученные нами результаты отличаются от результатов [9] в количественном отношении, хотя работа [9] правильно трактует суть и правильно описывает основные особенности этого явления. Для экспериментального изучения зависимости электронной подвижности от концентрации мелких доноров авторы [9] использовали образцы HgSe:Fe, легированные Ga ( $n_F = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n_{\text{Ga}} = 0, 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). Случайным образом расположенные атомы Ga ионизованы, поскольку находятся на металлической стороне перехода Мотта, и представляют собой мелкие доноры, концентрация которых может быть определена экспериментально. Концентрация собственных мелких доноров в изучаемых образцах считалась пренебрежимо малой по сравнению с концентрацией атомов Ga. Однако рассмотрение этих образцов не позволило выявить немонотонность в зависимости  $\mu_+(n_D)$ . Причина отрицательного результата легко усматривается из рис. 2, где наша расчетная кривая 4 соответствует  $n_F = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Действительно, согласно нашим расчетам, подвижность при  $n_D = 0$  имеет большее значение, чем подвижность при  $n_D = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Для того чтобы обнаружить немонотонность, необходимо иметь набор достаточно чистых образцов с концентрациями Ga, лежащими в интервале  $0 < n_{\text{Ga}} < 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Причем желательно



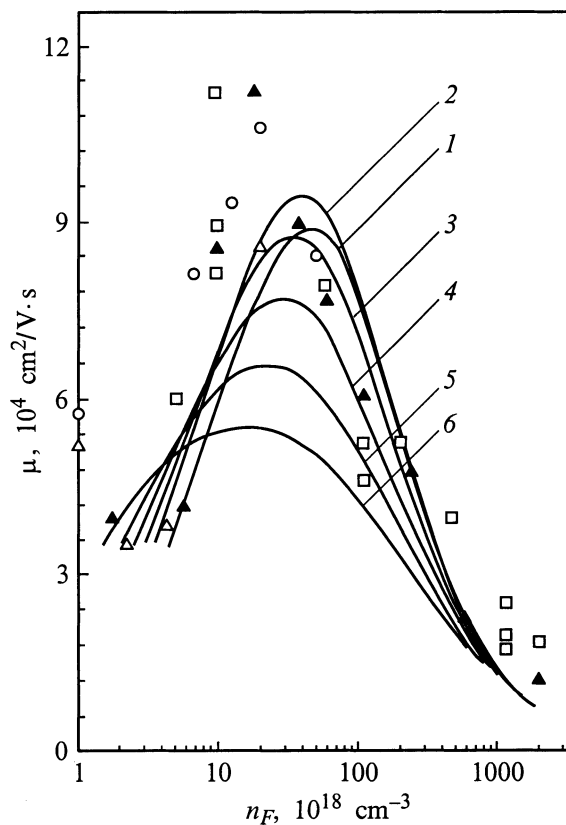
**Рис. 3.** Зависимость подвижности  $\mu$  от концентрации атомов железа  $n_F$ . 1 — подвижность  $\mu_+$ , связанная с рассеянием на примесных ионах, 2 — подвижность  $\mu_0$ , связанная с рассеянием на нейтральных атомах железа. Жирная кривая — полная подвижность  $\mu$ , связанная с рассеянием на примесных центрах. Экспериментальные точки: *a* — данные [12], *b* — [11], *c* — [13], *d* — [14].

выбирать образцы с небольшими концентрациями железа  $n_F \geq 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Вслед за авторами работы [9] влияние Ga на подвижность электронов в HgSe:Fe рассмотрели авторы работы [10], причем в основу расчетов [10] было положено уравнение для определения диаметра жесткой сферы, постулированное авторами в [8]. В нашей работе показано, что это уравнение имеет неверную асимптотику в пределе  $n_F^+/n_F \rightarrow 1$ , завышая скорость роста коэффициента упаковки с увеличением концентрации атомов железа на порядок. Поэтому не будем сравнивать оценки, проведенные в [10], с результатами наших расчетов.

Теперь рассмотрим вклад в подвижность от рассеяния электронов на нейтральных атомах железа. Как следует из формул (11), полная подвижность электронов  $\mu$  выражается через подвижность, обусловленную рассеянием на примесных ионах,  $\mu_+$ , и подвижность, обусловленную рассеянием на нейтральных примесях,  $\mu_0$ , формулой  $\mu^{-1} = \mu_+^{-1} + \mu_0^{-1}$ , причем  $\mu_0 = A/(n_F - n_F^+)$ , где  $A$  — постоянная, значение которой не зависит от концентрации нейтральных атомов железа. Постоянную  $A$  мы определили по экспериментальным дан-

ным [11], согласно которым  $\mu = 2.2 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  при концентрации атомов железа  $n_F = 5.8 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . При этом значении  $n_F$  и концентрации мелких доноров  $n_D = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  расчетное значение подвижности составляет  $\mu_+ = 1.9 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ , а постоянная  $A = 1.46 \cdot 10^{25} \text{ cm}^{-1} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ .

На рис. 3 представлены результаты расчетов подвижности для идеально чистого образца ( $n_D = 0$ ). Подвижность  $\mu_+$  (кривая 1) возрастает с ростом концентрации железа вследствие частичного упорядочения в расположении ионов железа, а подвижность  $\mu_0$  (кривая 2) уменьшается с ростом концентрации железа, поскольку при этом увеличивается концентрация случайным образом расположенных в пространстве нейтральных атомов железа. В результате полная подвижность  $\mu$  как функция  $n_F$  имеет максимум. Максимальное значение подвижности, равное  $9 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ , достигается при концентрации атомов железа  $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . В максимуме имеем  $\mu_+ = 1.2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ , а  $\mu_0 = 3.2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ . Экспериментальные точки, изображенные на рис. 3, взяты из работ [11–14]. В экспериментах максимальное значение электронной подвижности  $\mu = 1.1 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  наблюдается при концентрациях железа  $n_F = 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Напомним, что расчеты для рис. 3 производились для идеально чистого образца ( $n_D = 0$ ). В реальных образ-



**Рис. 4.** Зависимость подвижности  $\mu$  от концентрации атомов железа  $n_F$ . Кривые 1–6 соответствуют концентрации мелких доноров  $n_D$  ( $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ): 1 — 0, 2 — 1, 3 — 1.5, 4 — 2, 5 — 2.5, 6 — 3. Экспериментальные точки те же, что и на рис. 3.



цах HgSe:Fe концентрация случайным образом расположенных в пространстве мелких доноров может доходить до значения  $n_D = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Поскольку в интервале изменения  $0 < n_D < 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  наличие мелких доноров способствует увеличению степени порядка в системе примесных ионов, мы произвели расчеты подвижности  $\mu(n_F)$  при различных значениях  $n_D$ . На рис. 4 кривые 1–6 соответствуют значениям  $n_D (10^{18} \text{ cm}^{-3}) = 0, 1, 1.5, 2, 2.5, 3$ . Согласно нашим расчетам, максимальное значение подвижности  $\mu = 9.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  достигается при  $n_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  (кривая 2). При концентрациях  $n_D > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  подвижность электронов уменьшается с ростом концентрации собственных доноров.

Таким образом, в предлагаемой работе мы распространили основное уравнение теории [3], полученное для идеально чистого образца ( $n_D = 0$ ), на реальный случай достаточно грязных систем, содержащих мелкие примесные доноры. Применение развитой нами теории к частному случаю HgSe:Fe позволило вычислить основной вклад (более 80%) в увеличение подвижности. Столь хорошее согласие с экспериментом указывает, с нашей точки зрения, на то, что развитая нами теория может быть полезна при интерпретации экспериментов, связанных с изучением межпримесных корреляций в полупроводниках.

## Список литературы

- [1] Isaak M. Tsidilkovskii. Electron Spectrum of Gapless Semiconductors. Springer Series in Solid State Sciences. V. **116** (1997).
- [2] Z. Wilamowski, K. Swatek, T. Dietl, J. Kossut. Solid State Commun. **74**, 8, 833 (1990); Z. Wilamowski. Acta Phys. Pol. **A77**, 1, 133 (1990).
- [3] В.М. Михеев. ФТТ **41**, 11, 1994 (1999).
- [4] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1982).
- [5] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. Мир, М. (1978). 405 с.
- [6] И.Г. Кулеев, И.Ю. Арапова. ФММ **88**, 3, 43 (1999).
- [7] P. Laty, J.C. Joud, J.C. Mathieu, P. Desre. Phil. Mag. **B38**, 1, 1 (1978).
- [8] И.Г. Кулеев, И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ **102**, 11, 1652 (1992).
- [9] C. Skierbiszewski, Z. Wilamowski, T. Suski, J. Kossut. Semicond. Sci. Technol. **8**, 3, S40 (1993).
- [10] И.М. Цидильковский, И.Г. Кулеев, Н.К. Леринман, А.Т. Лончаков, Л.Д. Сабирзянова, С.Ю. Паранчич. ФТП **30**, 12, 2113 (1996).
- [11] W. Dobrowolski, K. Dybko, S. Skierbiszewski, T. Suski, E. Litvin-Staszewska, S. Motkowska, J. Kossut, A. Mycielski. Proc. of 19th Int. Conf. on Physics of Semiconductors. Warsaw (1988). V. 2. P. 1247.
- [12] F.Pool, J. Kossut, U. Debska, R. Reifenberger. Phys. Rev. **B35**, 8, 3900 (1987).
- [13] Н.Г. Глузман, Л.Д. Сабирзянова, И.М. Цидильковский, Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич. ФТП **20**, 1, 94 (1986).
- [14] C. Skierbiszewski, T. Suski, W. Dobrowolski, K. Dybko, A. Mycielski. Semicond. Sci. Technol. **4**, 4, 293 (1989).