

Релаксация импульса электронов зоны Γ_8 на системе ионов железа со смешанной валентностью и электронный перенос в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при низких температурах

© И.Г. Кулеев, И.И. Кулеев

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 20 июня 2002 г.)

Исследованы особенности рассеяния электронов зоны Γ_8 на пространственно коррелированной системе ионов железа в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$. При вычислении вероятности рассеяния электронов в системе ионов железа со смешанной валентностью учтены $s-p$ гибридизация и блоховские амплитуды волновых функций. Рассчитаны время релаксации и подвижность электронов зоны Γ_8 в кристаллах HgSe и $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при низких температурах. Проанализирована зависимость времени релаксации электронов от энергии. Показано, что пространственное упорядочение в системе во смешанной валентностью ионов железа приводит к качественному изменению этой зависимости для электронов зоны Γ_8 .

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 00-02-16299, 01-02-06238).

Интерес к исследованию явлений электронного переноса в кристаллах HgSe , легированных железом, обусловлен тем, что эти соединения обладают рядом необычных физических свойств [1–12]. Одной из наиболее впечатляющих „аномалий“ является существенное увеличение подвижности электронов в области гелиевых температур при возрастании концентрации железа от $N_{\text{Fe}} = N^* = 4.5 \cdot 10^{18}$ до $N_{\text{Fe}} = (1-2) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [1–4]. Было показано [1–12], что аномальный характер явлений электронного переноса в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при низких температурах обусловлен образованием состояния со смешанной валентностью ионов железа $\text{Fe}^{2+}-\text{Fe}^{3+}$ на уровне Ферми и пространственным упорядочением положительных зарядов на ионах железа вследствие их кулоновского отталкивания.

До сих пор при интерпретации кинетических эффектов в этих соединениях непараболичность зоны проводимости (Γ_8) учитывалась только через закон дисперсии носителей тока, а в качестве волновых функций использовались плоские волны. Такой подход соответствует зоне Γ_6 при $\epsilon_g \rightarrow \infty$. При этом не учитывались $s-p$ гибридизация, характерная для зоны Γ_8 , и блоховские амплитуды волновых функций. Хорошо известно [13–16], что рассеяние электронов проводимости зоны Γ_8 на заряженных центрах может быть существенно более слабым, чем электронов зоны Γ_6 . Поэтому представляет интерес выяснить, насколько изменяется эффект ослабления рассеяния блоховских электронов на пространственно коррелированной системе ионов Fe^{3+} , а также результаты, полученные ранее без учета $s-p$ гибридизации волновых функций [6,17,18]. С другой стороны, зависимость блоховских амплитуд от энергии электрона может привести к иной зависимости времени релаксации $\tau(\epsilon)$ от энергии электрона. Поскольку термоманнитные эффекты, такие как продольный и по-

перечный эффекты Нернста–Этинггаузена, пропорциональны производной времени релаксации по энергии $d\tau(\epsilon)/d\epsilon$, учет структуры волновых функций зоны Γ_8 может оказать влияние на термоманнитные эффекты и является актуальным для интерпретации необычных зависимостей термоманнитных эффектов от температуры и содержания примесей железа [9–11]. Всестороннее давление, приложенное к кристаллу HgSe , изменяет энергетический зазор ϵ_g между зоной проводимости Γ_8 и зоной Γ_6 . Это обстоятельство приводит к изменению величин блоховских амплитуд и должно учитываться при интерпретации экспериментальных данных по влиянию гидростатического давления на электропроводность кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при низких температурах. Обсуждению этих вопросов и посвящена настоящая работа.

В разд. 1 рассчитано время релаксации импульса электронов на системе со смешанной валентностью (CCB) ионов железа в кристаллах HgSe . В разд. 2 проанализирована зависимость подвижности электронов от концентрации примесей железа. В разд. 3 рассмотрена зависимость времени релаксации от энергии электронов зоны Γ_8 и проведено сравнение с результатами ранее проведенных расчетов без учета блоховских амплитуд в вероятности рассеяния электронов [9,10].

1. Время релаксации электронов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при рассеянии на системе ионов железа со смешанной валентностью

Согласно модели, предложенной в [6,17,18], систему ионов железа в $\text{HgSe}:\text{Fe}$ можно рассматривать как бинарный сплав замещения, состоящий из заряженных Fe^{3+} и нейтральных в решетке Fe^{2+} центров. Релаксация

импульса электронов при низких температурах обусловлена взаимодействием электронов с этими центрами. При этом взаимодействие электронов с нейтральными центрами считается контактным, а с заряженными — описывается экранированным кулоновским потенциалом с радиусом экранирования Томаса–Ферми. При вычислении времени релаксации электронов $\tau(\varepsilon)$ непараболичность зоны проводимости HgSe учитывается в двухзонной модели Кейна [15]

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\varepsilon_g}{2} \left\{ \left[1 + \frac{2\hbar^2 k^2}{m_n \varepsilon_g} \right]^{1/2} - 1 \right\}, \quad (1)$$

где m_n — эффективная масса электрона на дне зоны, $\varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_8) - \varepsilon(\Gamma_6)$. Для HgSe $\varepsilon_g = 0.22$ eV, $m_n \cong 0.02m_0$, m_0 — масса свободного электрона [1].

В отличие от [6,17,18] в данной работе при вычислении вероятности перехода электрона из состояния $|\mathbf{k}, \mathbf{j}\rangle$ в $|\mathbf{k}', \mathbf{j}'\rangle$ при рассеянии на ССВ ионов железа используются блоховские волновые функции для зоны проводимости Γ_8 ($j_{\pm} = \pm 3/2$), нормированные на объем кристалла [13–15]

$$\begin{aligned} \psi_{k_j} &= V^{-1/2} u_{k_j} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}), \\ u_{k_{j^+}} &= \left(iaS - d^- \frac{k_+}{k} R_- + d^+ \frac{k_-}{k} R_+ + c \frac{k_z}{k} z \right) \uparrow \\ &\quad - b \left(\frac{k_z}{k} R_+ - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} z \right) \downarrow, \\ u_{k_{j^-}} &= \left(iaS + d^+ \frac{k_+}{k} R_- - d^- \frac{k_-}{k} R_+ + c \frac{k_z}{k} z \right) \downarrow \\ &\quad + b \left(\frac{k_z}{k} R_- - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{k_z}{k} z \right) \uparrow, \end{aligned} \quad (2)$$

где $k_{\pm} = k_x \pm k_y$, $R_{\pm} = (x \pm iy)/2^{1/2}$, стрелки \uparrow и \downarrow — направление спина вверх и вниз, S и X, Y, Z — волновые функции s - и p -симметрии [15], $d^{\pm} = (b \pm c^* 2^{1/2})/2$, а коэффициенты a, b и c определяются выражениями

$$\begin{aligned} a^2 &= (\Delta + 3/2^* \varepsilon)(\Delta + \varepsilon)\varepsilon/D, \quad b^2 = \Delta^2(\varepsilon + \varepsilon_g)/3D, \\ c^2 &= 2(\Delta + 3/2^* \varepsilon)^2(\varepsilon + \varepsilon_g)/3D, \\ D &= (\Delta + 3/2^* \varepsilon)(\Delta + \varepsilon)\varepsilon \\ &\quad + (\Delta + \varepsilon)^2(\varepsilon + \varepsilon_g) + 1/2(\varepsilon + \varepsilon_g)\varepsilon, \end{aligned} \quad (3)$$

где Δ — величина спин-орбитального расщепления, для HgSe $\Delta = 0.45$ eV. Из условия нормировки блоховских амплитуд следует равенство

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1. \quad (4)$$

Выражение для обратного времени релаксации электронов зоны Γ_8 может быть представлено в виде [6,18]

$$\tau^{-1}(\varepsilon) = \frac{2\pi\hbar k}{m} \int_0^{\pi} (1 - \cos(\theta)) \sigma(\theta) \sin(\theta) d\theta, \quad (5)$$

здесь θ — угол между векторами падающего и рассеянного электронов,

$$\begin{aligned} \sigma(\theta) &= [m/(2\pi\hbar^2)]^2 \\ &\quad \times \sum_{\alpha, \beta = +; 0; j'} (N_{\alpha} N_{\beta})^{1/2} |V_{\alpha}(q) V_{\beta}(q)|^2 I_{\alpha\beta}(\theta) S_{\alpha\beta}(q), \end{aligned} \quad (6)$$

где $q = 2k \sin(\theta/2)$, N_+ и N_0 — концентрации заряженных и нейтральных в решетке ионов железа, $V_+(q) = -(4\pi e^2/\chi)(q^2 + r_s^{-2})^{-1}$ — фурье-образ экранированного кулоновского потенциала, χ — диэлектрическая постоянная, r_s — радиус экранирования, $V_0(q) = V_0$, взаимодействие электронов зоны Γ_8 с нейтральными центрами описывается двумя параметрами: V_0 и W_0 . Параметр V_0 определяет взаимодействие электрона для блоховских амплитуд, имеющих s -симметрию, тогда как W_0 — для блоховских амплитуд, имеющих p -симметрию [19]

$$V_0 = \langle S|V_0(r)|S\rangle, \quad W_0 = \langle X|V_0(r)|X\rangle. \quad (7)$$

Примеси железа в кристаллах HgSe:Fe замещают двухвалентную ртуть в узлах кристаллической решетки, поэтому взаимодействие электрона с нейтральными в решетке ионами Fe^{2+} определяется потенциалом $V_0(r) = V_{\text{Fe}^{2+}}(r) - V_{\text{Hg}^{2+}}(r)$, который локализован в пределах элементарной ячейки. Поскольку электроотрицательность у ионов Fe^{2+} меньше, чем у ионов Hg^{2+} [1], $V_0(r)$ и соответственно константа $V_0 < 0$. Функции $I_{\alpha\beta}(\theta)$ характеризуют отличие рассеяния блоховского электрона зоны Γ_8 от рассеяния свободного электрона

$$I_{\alpha\beta}(\theta) = \sum_{n=1}^3 z^{2(n-1)} \varphi_{\alpha\beta}^n, \quad z = \sin(\theta/2),$$

$$\varphi_{++}^{(1)} = 1, \quad \varphi_{++}^{(2)} = -4[(1 - a^2) - b^2(b/2 - c\sqrt{2})^2],$$

$$\varphi_{++}^{(3)} = 4[(1 - a^2)^2 - b^2(b/2 - c\sqrt{2})^2],$$

$$\varphi_{+0}^{(1)} = a^2 + w(1 - a^2),$$

$$\varphi_{+0}^{(2)} = -[2(1 + w)a^2(1 - a^2) + 2\varphi_{++}^{(3)}], \quad \varphi_{+0}^{(3)} = 4w\varphi_{++}^{(3)},$$

$$\varphi_{00}^{(1)} = a^4 + w[a^2(1 - a^2)],$$

$$\varphi_{00}^{(2)} = -4w[a^2(1 - a^2) + w\varphi_{++}^{(3)}],$$

$$\varphi_{00}^{(3)} = 4w^2[a^2(1 - a^2) + b^2(b/2 - c\sqrt{2})^2]. \quad (8)$$

Здесь $w = W_0/V_0$ — отношение констант связи, характеризующих взаимодействие электрона зоны Γ_8 с нейтральными центрами [19]. Согласно [20], для твердых растворов $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ $V_0 = 3.6 \cdot 10^{-22}$ eV · cm³, а $w = -0.29$. Оценки, сделанные в работе [21], для кристаллов HgSe:Fe дают $V_0 = 8.2 \cdot 10^{-22}$ eV · cm³, $w \approx -0.1 \pm 0.1$.

Структурные факторы $S_{\alpha\beta}(q)$ определяются взаимным расположением ионов [22]

$$S_{\alpha\beta}(q) = \frac{1}{(N_\alpha N_\beta)^{1/2}} \sum_{i,j} \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i^\alpha - \mathbf{R}_j^\beta)). \quad (9)$$

Они могут быть выражены через полные коорреляционные функции распределения $h_{\alpha\beta}(r) = g_{\alpha\beta}(r) - 1$ (где $g_{\alpha\beta}(r)$ — парциальные парные корреляционные функции системы ионов $\text{Fe}^{3+} - \text{Fe}^{2+}$ [22,23])

$$S_{\alpha\beta}(q) = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \sqrt{N_\alpha N_\beta} \int_0^\infty r^2 h_{\alpha\beta}(r) \frac{\sin(q \cdot r)}{q \cdot r} dr. \quad (10)$$

Для системы примесей железа $\text{Fe}^{3+} - \text{Fe}^{2+}$ имеем

$$S_{++}(q) = 1 + N_+ h_{++}(q), \quad S_{00}(q) = 1 + N_0 h_{00}(q),$$

$$S_{+0}(q) = S_{0+}(q) = \sqrt{N_+ N_0} h_{+0}(q). \quad (11)$$

Итак, для корректного анализа релаксации импульса электронов на ССВ ионов железа необходимо найти четыре парные корреляционные функции $g_{\alpha\beta}(r)$, характеризующие пространственное распределение ионов железа $\text{Fe}^{2+} - \text{Fe}^{3+}$ в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$. В работе [18] предложена приближенная схема расчета парциальных корреляционных функций распределения $g_{\alpha\beta}(r)$ и соответствующих им структурных факторов $S_{\alpha\beta}(q)$, основанная на решении системы интегральных уравнений Орнштейна–Цернике для ССВ ионов железа в модели проникающих твердых сфер [18]. Эта схема базируется на следующих физических соображениях. Из всех взаимодействий в ССВ ионов $\text{Fe}^{2+} - \text{Fe}^{3+}$ наиболее сильным является кулоновское отталкивание d -дырок $V_{++}(r)$, локализованных на различных узлах. Оно обеспечивает пространственное перераспределение d -дырок и нейтральных центров. Взаимодействия $V_{0+}(r)$ и $V_{00}(r)$ существенно слабее, и ими можно пренебречь. Поэтому воспользуемся решением уравнения Орнштейна–Цернике в приближении Перкуса–Йевики для подсистемы d -дырок в модели твердых сфер [6] и найдем $S_{++}(q)$. Затем, используя точные соотношения между парциальными корреляционными функциями распределения, справедливыми для бинарных сплавов замещения [22], найдем оставшиеся структурные факторы $S_{\alpha\beta}(q)$. В результате получим [18]

$$S_{++}(q) = (1 - N_+ c_{++}(q))^{-1},$$

$$S_{+0}(q) = S_{0+}(q) = \sqrt{N_+ N_0} (1 - S_{++}(q)),$$

$$S_{00}(q) = 1 + (N_+ / N_0) (S_{++}(q) - 1), \quad (12)$$

а Фурье-образ прямой корреляционной функции $c_{++}(q)$ имеет вид

$$c_{++}(q) = -\frac{4\pi d^3}{u^3} \left\{ \left[\alpha + 2\beta + 4\gamma - \frac{24\gamma}{u^2} \right] \sin u + \left[\frac{2}{u} (\beta + 6\gamma) - (\alpha + \beta + \gamma)u - \frac{24\gamma}{u^3} \right] \cos u + \frac{24\gamma}{u^3} - \frac{2\beta}{u} \right\},$$

$$u = q \cdot d, \quad \alpha = \frac{(1 + 2\eta)^2}{(1 - \eta)^4},$$

$$\beta = \frac{-6\eta(1 + 0.5\eta)^2}{(1 - \eta)^4}, \quad \gamma = \frac{1}{2} \eta \alpha, \quad (13)$$

где $\eta = \pi d^3 n / 6$ — коэффициент упаковки, характеризующий степень порядка в системе твердых сфер. Он равен отношению объема, занятого твердыми сферами, к полному объему системы. Очевидно, что кулоновское отталкивание d -дырок в системе примесей железа со смешанной валентностью приводит не только к пространственному упорядочению заряженных центров (ионов Fe^{3+}), но и к коррелированному расположению нейтральных центров относительно заряженных [17,18]. Поэтому перераспределение зарядов в системе ионов железа со смешанной валентностью $\text{Fe}^{3+} - \text{Fe}^{2+}$ приводит к интерференционному рассеянию, которое может оказать значительное влияние на кинетические характеристики кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$.

Выполнив необходимое интегрирование в выражении (5), для обратного времени релаксации электронов зоны Γ_8 при рассеянии на ССВ железа получим

$$\tau^{-1}(k) = \frac{4\varepsilon_B(\varepsilon)}{3\pi\hbar} \left\{ \frac{\Phi_{++}(k)}{y^3} + \Lambda \left[2 \left(\frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \frac{\Phi_{+0}(k)}{y} + \Lambda y \Phi_{00}(k) \frac{N_0}{N_+} \right] \right\} = \frac{4\varepsilon_B(\varepsilon)}{3\pi\hbar} \Phi(k) = \tau_{++}^{-1}(k) + \tau_{al}^{-1}(k),$$

$$\tau_{al}^{-1} = \tau_{+0}^{-1} + \tau_{00}^{-1}, \quad \varepsilon_B(\varepsilon) = \varepsilon_{Bn}(1 + 2\varepsilon/\varepsilon_g). \quad (14)$$

Здесь $y = k/k_F$, ε_{Bn} — боровская энергия электрона на дне зоны проводимости, параметр сплавного рассеяния $\Lambda = m_F \cdot a_B \cdot k_F^2 |V_0| / \pi \hbar^2$ определяется отношением констант взаимодействия электронов с нейтральными и заряженными центрами, $a_B = \chi \hbar^2 / m_F e^2$ — боровский радиус, ε_F — энергия Ферми, а функции $\Phi_{\alpha\beta}(k)$ имеют вид

$$\Phi_{\alpha\beta} = \sum_{n=1}^3 \varphi_{\alpha\beta}^{(n)} I_{\alpha\beta}^{(2n+1)}, \quad I_{\alpha\beta}^{(N)} = 2 \int_0^1 \frac{x^N S_{\alpha\beta}(2kx) dx}{(x^2 + b_k^{-1})^\nu},$$

$$b_k = (2kr_s)^2, \quad (15)$$

где $\nu = 2$ для I_{++} , $\nu = 1$ для I_{0+} и $\nu = 0$ для I_{00} . Таким образом, релаксация импульса электронов на коррелированной системе ионов $\text{Fe}^{2+} - \text{Fe}^{3+}$ обусловлена

в общем случае тремя вкладками: рассеянием на коррелированной системе ионов (КСИ) Fe^{3+} , рассеянием на нейтральных центрах и интерференционным вкладом (Φ_{0+}). Отметим, что для хаотической системы ионов (КСИ) $S_{++}(q) = S_{00}(q) = 1$, а $S_{0+}(q) = S_{+0}(q) = 0$. В этом случае интерференционный вклад выпадает и для рассеяния электронов на системе нейтральных и заряженных центров правило Маттиссена выполняется.

В кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при $N_{\text{Fe}} < N^* = 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ уровень Ферми находится ниже d -уровня железа, концентрация $N_0 = 0$, а распределение ионов Fe^{3+} по узлам кристаллической решетки является хаотическим. В этом случае $S_{++}(q) = 1$, $\tau_{+0}^{-1} = \tau_{00}^{-1} = 0$, а выражение для обратного времени релаксации τ_{++}^{-1} совпадает с результатами, полученными ранее для рассеяния на хаотической системе доноров [14,15]

$$\tau_{++}^{-1}(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon_B(\varepsilon)}{3\pi\hbar^3} \Phi_{\Gamma^8}, \quad \Phi_{\Gamma^8} = \sum_{n=1}^3 \varphi_{++}^{(n)} I_{++}^{(2n+1)}, \quad (16)$$

где $I_{++}^{(3)} = \ln(1+b_k) - (1+b_k^{-1})^{-1}$, $I_{++}^{(5)} = 1 + (1+b_k)^{-1} - 2b_k^{-1} \ln(1+b_k)$, $I_{++}^{(7)} = \frac{1}{2} \{1 - 4b_k^{-1} - 2b_k^{-1}(1+b_k^{-1})^{-1} + 6b_k^{-2} \ln(1+b_k)\}$.

Отметим, что из выражения (14) следует, что при рассеянии на хаотической системе нейтральных центров ($S_{00}(q) = 0$) выражение для $\tau_{00}^{-1}(\varepsilon)$ совпадает с результатом, полученным в работах [15,19]

$$\tau_{00}^{-1}(\varepsilon) = \frac{4\varepsilon_B(\varepsilon)}{3\pi\hbar} \Lambda \cdot \gamma \cdot \Phi_{00}(k) \cdot \frac{N_0}{N_+}, \quad \Phi_{00} = \sum_{n=1}^3 \varphi_{00}^{(n)} I_{00}^{(2n+1)},$$

$$I_{00}^{(3)} = 1/2, \quad I_{00}^{(5)} = 1/3, \quad I_{00}^{(7)} = 1/4. \quad (17)$$

Далее проанализируем концентрационную зависимость подвижности электронов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ и особенности интерференционного рассеяния электронов зоны Γ_8 на ССВ ионов железа.

2. Интерференция рассеяния электронов на системе ионов железа со смешанной валентностью и подвижность электронов проводимости в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$

Подвижность электронов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ как функция концентрации N_{Fe} анализировалась в работах [6,17,18]. Непараболичность зоны проводимости учитывалась только через закон дисперсии носителей тока. В отличие от этих работ, во-первых, при вычислении вероятности рассеяния электронов на ССВ ионов железа мы учитываем специфику волновых функций зоны Γ_8 . Во-вторых, проанализируем зависимость подвижности электронов в кристаллах HgSe $\mu_{++}(N_d) = e\tau_{++}/m_F$ при рассеянии на неупорядоченной системе доноров с концентрацией N_d . Из сравнения результатов расчета

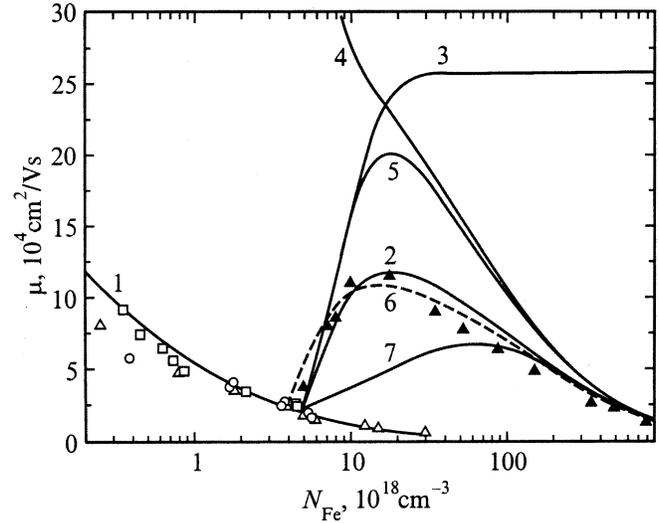


Рис. 1. Подвижность электронов в кристаллах HgSe (кривая 1 $\mu(N_d)$), в $\text{HgSe}:\text{Fe}$ (кривая 2 $\mu(N_{\text{Fe}})$). 3,4 — вклады в подвижность $\mu(N_{\text{Fe}})$, обусловленные рассеянием на КСИ Fe^{3+} и сплавным рассеянием соответственно; 5 — зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$ без учета интерференционного рассеяния электронов; 6 — зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$ при наличии собственных дефектов с $N_d = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; 7 — зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$, полученная с использованием „основного уравнения“ (26) [27]. Символы — экспериментальные данные: светлые треугольники и кружки — $\mu(N_d)$ для кристаллов HgSe [14,24,25]; темные треугольники — $\mu(N_{\text{Fe}})$ для кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$ [3,30].

с экспериментальными данными [14,24,25] определим параметры, характеризующие рассеяние электронов зоны Γ_8 на заряженных центрах: значения диэлектрической проницаемости χ , эффективной массы m_F^* и величину подвижности электронов μ^* при $N_d = N^* = 4.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Затем эти параметры будут использованы при расчете подвижности электронов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при рассеянии на ССВ ионов железа. Анализ подвижности электронов в кристаллах HgSe с использованием выражения (16) для $\tau_{++}(\varepsilon_F)$ показал, что рассчитанная зависимость $\mu(N_d)$ (кривая 1 на рис. 1) хорошо согласуется с данными [14,24,25] при значениях параметров: $\chi \approx 27$, $m_F^* \approx 0.07m_0$ ($m_n \approx 0.023m_0$), при этом $\mu^* \approx 2.23 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$. В кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ с ростом концентрации примесей железа уровень Ферми достигает d -уровня при $N_{\text{Fe}} \approx 4.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, а при дальнейшем увеличении N_{Fe} концентрация электронов n_e ($n_e = N_+$) выходит на насыщение при значении $n_e = N^* \approx 4.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [1] и остается практически постоянной в интервале $N_{\text{Fe}} \sim (5-500) \cdot 10^8 \text{ cm}^{-3}$ (рис. 3, б [1]). Поэтому далее будем использовать параметры m_F^* и μ^* , определенные при данной концентрации.

Рассмотрим зависимость подвижности электронов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ и проанализируем роль интерференционного рассеяния электронов зоны Γ_8 на ССВ ионов железа. Выразим $\mu(N_{\text{Fe}})$ для рассеяния электронов

на ССВ ионов железа через величину μ^*

$$\begin{aligned} \mu(N_{\text{Fe}}) &= \mu^* \Phi_{\Gamma_8}^*(k_F) / \Phi(k_F) = (\mu_{++}^{-1}(N_{\text{Fe}}) + \mu_{+0}^{-1}(N_{\text{Fe}}) \\ &+ \mu_{00}^{-1}(N_{\text{Fe}}))^{-1} = (\mu_{++}^{-1}(N_{\text{Fe}}) + \mu_{al}^{-1}(N_{\text{Fe}}))^{-1}, \quad (18) \\ \mu^*(0) &= \frac{3\pi\hbar e}{m_F^* \cdot 4\epsilon_B^* \cdot \Phi_{\Gamma_8}^*(k_F)}, \\ \Phi_{\Gamma_8}^* &\approx 1.37, \quad \epsilon_B^* \approx 1.38 \text{ meV}, \quad (19) \end{aligned}$$

где функция $\Phi_{\alpha\beta}$ и структурные факторы $S_{\alpha\beta}(q)$ определены выражениями (15) и (12) соответственно. Заметим, что в области малых концентраций нейтральных центров $N_0 < N_+$, где структурный фактор $S_{00}(q)$ отличается от единицы, рассеяние на этих центрах мало, и им можно пренебречь [18]. При больших концентрациях примесей железа ($N_0 \gg N_+$), когда рассеяние на нейтральных центрах становится существенным, $S_{00}(q) \approx 1$. Поэтому для упрощения расчетов положим $S_{00}(q) \approx 1$, тогда величина Φ_{00} будет определяться выражением (17). Структурный фактор $S_{++}(q, \eta)$ при статистическом описании КСИ Fe^{3+} в модели твердых сфер зависит от параметра упаковки η , определяющего степень упорядочения. Для расчета подвижности электронов и других кинетических характеристик кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$ необходимо установить связь параметра упаковки с концентрацией примесей железа. Для решения этой проблемы предложен ряд подходов [5,6,17,18,26–28]. Наиболее надежным и физически обоснованным является метод, предложенный в [6], с учетом уточнений, сделанных в работах [17,18]. Согласно этому методу, зависимость $\eta(N_{\text{Fe}})$ находится следующим образом. Сначала из экспериментально измеренных величин подвижности $\mu^{\text{exp}}(N_{\text{Fe}})$ при больших концентрациях примесей железа $N_{\text{Fe}} > 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ (когда сплавное рассеяние доминирует) определяется параметр сплавного рассеяния Λ . Затем выделяется вклад в подвижность $\mu_{++}^{\text{exp}}(N_{\text{Fe}}) = (1/\mu_{\text{exp}} - 1/\mu_{al})^{-1}$, обусловленный рассеянием на КСИ Fe^{3+}

$$\mu_{++}^{\text{exp}} = (\mu_{\text{exp}}^{-1} - \mu_{al}^{-1})^{-1}. \quad (20)$$

После этого с использованием выражения для структурного фактора $S_{++}(q, \eta)$ рассчитывается $\mu_{++}(\eta)$ как функция параметра η , и из равенства экспериментально измеренных и рассчитанных значений подвижности $\mu_{++}^{\text{exp}}(N_{\text{Fe}}) = \mu_{++}(\eta)$ определяется зависимость $\eta(N_{\text{Fe}})$. Оказалось, что эмпирически найденная зависимость $\eta(N_{\text{Fe}})$ с хорошей точностью может быть аппроксимирована выражением

$$\eta = \eta_{\infty} \left[1 - \exp(-(\eta/\eta_{\infty})(N_{\text{Fe}}/N_+)) \right]. \quad (21)$$

При больших концентрациях примесей железа функция $\eta(N_{\text{Fe}})$ стремится к насыщению: $\eta(N_{\text{Fe}} \rightarrow \infty) = \eta_{\infty}$. Расчет зависимости $\mu(N_{\text{Fe}})$ при $\eta_{\infty} \approx \eta_L = 0.45$ показал хорошее согласие с экспериментальными данными, что позволило сделать вывод о том, что систему ионов

Fe^{3+} в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при низких температурах и $N_{\text{Fe}} \gg N_+$ можно рассматривать как сильно коррелированную кулоновскую жидкость [6]. Обоснование эмпирического подхода [6] дано в [18,28,29]. В этих работах из уравнения баланса d -дырок и нейтральных центров в кластере ближнего порядка для ионов Fe^{3+} рассчитана зависимость радиуса корреляционной сферы и соответственно параметра упаковки от содержания примесей железа при $N_0 < N_+$

$$\begin{aligned} \eta(N_{\text{Fe}}) &= \frac{1}{8} \Delta N_1 \left(\frac{N_0}{N_{\text{Fe}}} \right) \approx 0.74 \left(\frac{N_0}{N_{\text{Fe}}} \right), \\ \Delta N_1 &= 5.92. \quad (22) \end{aligned}$$

Зависимость $\eta(N_{\text{Fe}})$ из эмпирического уравнения (21) при $N_0 < N_+$ хорошо согласуется с полученной из уравнения баланса d -дырок и нейтральных центров (22) (см. [18], рис. 3). В работе [18] показано, что зависимость (22) является асимптотически точной в пределе $N_0 \ll N_+$ ($N_0 \rightarrow 0$). С другой стороны, из эмпирического уравнения (21) при $N_0 \ll N_+$ следует, что $\eta(N_{\text{Fe}}) \approx 2\eta_{\infty} N_0 / N_{\text{Fe}}$, соответствует значению $\eta_{\infty} \approx 0.37$ в уравнении (21). Поэтому далее внесем это уточнение, и при расчете подвижности электронов $\mu(N_{\text{Fe}})$ и вкладов сплавного рассеяния и рассеяния на КСИ Fe^{3+} будем использовать это значение η_{∞} . Параметрами теории остаются величины V_0 и $w = W_0/V_0$, характеризующие рассеяние электронов зоны Γ_8 на нейтральных в решетке ионах железа. Значения этих параметров находятся из сопоставления рассчитанных зависимостей $\mu(N_{\text{Fe}})$ с экспериментальными данными [3,30].

Результаты такого анализа приведены на рис. 1. Как видно из рисунка, результаты расчета находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [3,30]. Нам удалось описать и зависимость подвижности $\mu(N_d)$ в кристаллах HgSe (кривая 1), и зависимость подвижности $\mu(N_{\text{Fe}})$ в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ (кривая 2) одним набором параметров. Прежде всего следует отметить, что для электронов зоны Γ_8 эффект ослабления рассеяния электронов на пространственно упорядоченной системе заряженных центров усиливается примерно в 1.5 раза: подвижность $\mu_{++}(N_{\text{Fe}})$ выходит на насыщение для $N_{\text{Fe}} \gg N^*$ при значении $\mu_S \approx 25.8 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, тогда как при той же концентрации заряженных центров N^* при хаотическом распределении значение $\mu^* \approx 2.2 \cdot 10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Поэтому отношение $\mu_S/\mu^* \approx 12$, что в 1.5 раза больше, чем без учета блоховских амплитуд при вычислении времени релаксации на КСИ Fe^{3+} [6,17,18]. Как видно из рисунка, при $N_{\text{Fe}} > 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, когда величина $\mu_{++}(N_{\text{Fe}})$ (кривая 3) выходит на насыщение, преобладающий вклад в подвижность вносит впаивное рассеяние (кривая 4). В связи с этим полная подвижность в этой области концентраций оказывается мало чувствительной к изменению η_{∞} в интервале значений $\eta_{\infty} \approx (0.37-0.45)$. Для параметров сплавного рассеяния получены следующие значения: $V_0 \approx 7.9 \cdot 10^{-22} \text{ eV} \cdot \text{cm}^3$, $w \approx 0.15$ ($\Lambda = 0.4$),

что хорошо согласуется с оценками, сделанными в работе [21] ($V_0 \approx 8.2 \cdot 10^{-22} \text{ eV} \cdot \text{cm}^3$, $w \approx -0.1 \pm 0.1$). Учет блоховских волновых функций приводит не только к ослаблению рассеяния электронов заряженными центрами, но и к значительному подавлению рассеяния на нейтральных центрах: для s -функций величина $\Phi_{00} \approx 0.5$ [17,18], тогда как для зоны Γ_8 получаем $\Phi_{00} \approx 0.11$. Это приводит к увеличению параметров сплавного рассеяния V_0 и Λ примерно в 2 раза по сравнению со значениями, использованными в работах [17,18] при описании зависимости $\mu(N_{\text{Fe}})$. В области максимума подвижности основной вклад в рассеяние электронов вносят рассеяние на КСИ Fe^{3+} и интерференционный вклад. Следует отметить, что расчет подвижности $\mu(N_{\text{Fe}})$ без учета интерференционного рассеяния (кривая 5) дает примерно в 2 раза большие значения подвижности электронов. Очевидно, что интерференция рассеяния электронов на нейтральных и заряженных центрах в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ играет важную роль и должна учитываться при анализе кинетических эффектов. Кривая 6 показывает, как изменится зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$ в кристалле $\text{HgSe}:\text{Fe}$ при наличии собственных дефектов (мелких доноров) с концентрацией $N_d = 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Расчет этой зависимости проведен аналогично тому, как это сделано в [8].

Рассмотрим теперь отклонение от правила Маттиссена для рассеяния электронов на ССВ ионах железа, обусловленное интерференцией процессов рассеяния электронов на нейтральных и заряженных центрах. В отсутствие пространственных корреляций $S_{0+}(q) = 0$ и правило Маттиссена выполняется. При этом рассеяние электронов на заряженных и нейтральных в решетке ионах железа вносит аддитивный вклад в релаксацию импульса электронов [31], тогда имеем

$$\mu_{MR}(N_{\text{Fe}}) = (\mu_{++}^{-1}(N_{\text{Fe}}) + \mu_{00}^{-1}(N_{\text{Fe}}))^{-1}. \quad (23)$$

Отклонение от правила Маттиссена для подвижности может быть представлено в виде

$$\Delta\mu/\mu = (\mu - \mu_{MR})/\mu. \quad (24)$$

На рис. 2 приведена зависимость отклонения от правила Маттиссена как функция содержания примесей железа. Как видно из рисунка, это отклонение обращается в нуль как при $N_0 \rightarrow 0$ ($N_{\text{Fe}} \rightarrow N^*$), так и при $N_0 \gg N_+$. Максимальная величина эффекта, достигающая 60%, имеет место при $N_{\text{Fe}} \sim (1-2) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, когда $N_0 \approx N_+$.

Таким образом, в рамках модели, развитой в работах [6,18,28], удается описать все характерные особенности зависимости $\mu(N_{\text{Fe}})$ в широкой области содержания примесей железа при учете реальной зонной структуры кристаллов $\text{HgSe}:\text{Fe}$: величину и положение максимума подвижности при $N_{\text{Fe}} \sim (1-2) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, а также резкое возрастание $\mu(N_{\text{Fe}})$ при $N_0 < N_+$, связанное с ослаблением рассеяния электронов на КСИ Fe^{3+} , и плавное уменьшение подвижности при $N_{\text{Fe}} > 2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, обусловленное сплавным рассеянием.

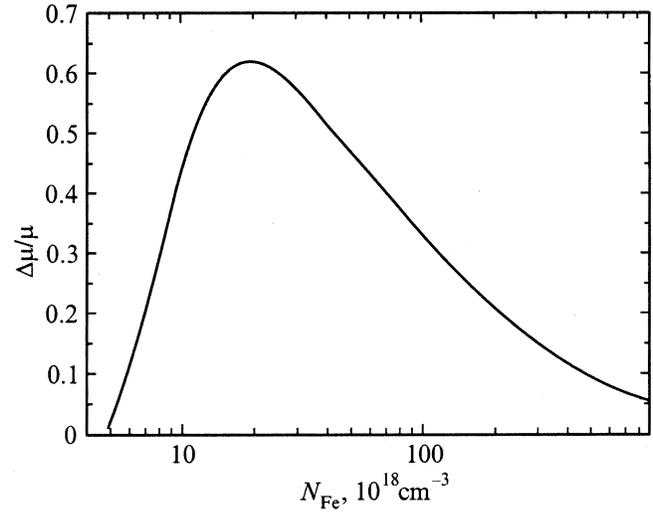


Рис. 2. Зависимость отклонения от правила Маттиссена от содержания примесей железа. Значения параметров те же, что и для подвижности электронов.

В работах [26,27] предложена иная схема рассмотрения пространственного упорядочения в ССВ ионов железа. К сожалению, в этих работах какие-либо уравнения для определения зависимости радиуса корреляционной сферы $r_c(N_{\text{Fe}})$ не выводятся и не решаются и решение самой задачи подменяется системой предположений. Поскольку в [26,27] выражается сомнение в корректности модели короткодействующих корреляций (МКК), развитой в [6,17,18,28] и использованной в настоящей работе, мы провели тщательный анализ этих предположений и вынуждены внести следующие разъяснения. Из предположения, что вероятность коррелированного расположения частиц $W(N_+, r_c, r_1)$ равна вероятности W_0 того, что в объеме Ω_c при случайном распределении частиц в ССВ ионов железа (т.е. при выключенном кулоновском отталкивании ионов Fe^{3+} (d -дырок)) не будет ни одной d -дырки, автор [26] получает „основное уравнение теории“

$$\eta(N_{\text{Fe}}) = \frac{N_+ \Omega_c}{8} \cong 0.74 \left[1 - (N_+/N_{\text{Fe}})^{\frac{1}{\Delta V_1}} \right]. \quad (25)$$

Это уравнение дает значительно более слабую, чем (21), зависимость параметра упаковки от содержания примесей железа (рис. 3, а) и не согласуется с асимптотически точным выражением (22) для $r_c(N_{\text{Fe}})$ при $N_0 < N_+$. Для обоснования уравнения (25) в [27] рассмотрен случай предельно малых концентраций нейтральных центров $N_0/N_+ \ll 1$ ($\Omega_c N_+ = 8\eta \ll 1$). Из предположения, что в этом пределе корреляционные сферы ионов Fe^{3+} не перекрываются, автор [27] получает соотношение, которое он считает асимптотически точным

$$N_+ = N_{\text{Fe}}(1 - N_+ \Omega_c) \quad \text{или} \quad \eta(N_{\text{Fe}}) = N_0/(8 \cdot N_+). \quad (26)$$

Выражение (26) согласуется с (25), а зависимость (26) оказывается существенно более слабой, чем получаемая

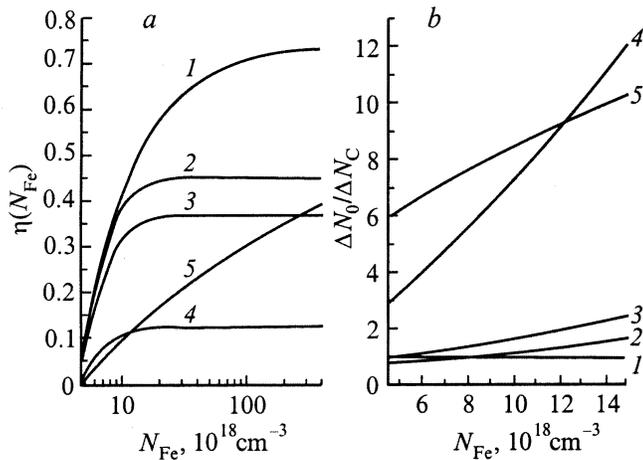


Рис. 3. Зависимость параметра упаковки $\eta(N_{\text{Fe}})$ (a) и отношения $\Delta N_0/\Delta N_c$ (b) от содержания примесей железа: 1 — для уравнения баланса частиц (23); 2 и 3 — для эмпирического уравнения (22) при $\eta_\infty \approx 0.45$ и $\eta_\infty \approx 0.37$ соответственно; 4 — для МКК-I [5]; 5 — для „основного уравнения теории“ [26,27].

из уравнений (21) и (22) (рис. 3, a). Однако корреляционные сферы ионов Fe^{3+} всегда перекрываются, в том числе и в пределе $N_0/N_+ \ll 1$. По определению в корреляционной сфере ($\Omega_c = 4\pi r_c^3/3$), проведенной вокруг каждого иона Fe^{3+} , могут находиться только нейтральные центры. При аппроксимации КСИ Fe^{3+} системой твердых сфер центры ионов Fe^{3+} не могут находиться на расстоянии, меньшем, чем $r_c = d$ (d — диаметр твердой сферы): $g_{++}(r) = 0$ при $r < r_c$. Вне корреляционного объема Ω_c ($r_c < r < 2r_c$) парная корреляционная функция $g_{++}(r) \neq 0$, и вероятность найти ионы Fe^{3+} в этом слое отлична от нуля при любых отличных от нуля значениях параметра η . Поэтому корреляционные сферы тех ионов Fe^{3+} , которые попадают в сферический слой $r_c < r < 2r_c$ автоматически, будут перекрываться. Для функции $g_{++}^{(1)}(r)$, которая используется в [26] (см. также рис. 8.6.1, б в [23]), можно легко определить среднее число ионов Fe^{3+} , которые попадают в этот слой: $\Delta N = 56\eta + 34\eta^2$. Очевидно, что при $\eta \sim 10^{-2}$ в более чем половине кластеров ближнего порядка в сферическом слое $r_c < r < 2r_c$ найдется ион Fe^{3+} , и корреляционные сферы ионов Fe^{3+} перекроются. Поэтому исходное предположение при выводе соотношения (26) некорректно.

Проверку адекватности различных подходов можно провести, применив их для расчета кинетических эффектов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$ (см. далее). Другой способ заключается в рассмотрении баланса d -дырок и нейтральных центров, участвующих в переходах между корреляционной сферой и сферическим слоем в предельном случае $N_0 \ll N_+$, когда радиус корреляционной сферы ограничивается числом свободных мест для перераспределения d -дырок (концентрацией ионов $\text{Fe}^{2+}-N_0$)

в сферическом слое $r_c < r < r_1$. В этом заключается одно из основных положений МКК [2,28,29]. Поэтому рассмотрим изменение с концентрацией примесей железа среднего числа d -дырок, переходящих в сферический слой ΔN_c , и числа свободных мест для их перераспределения (ионов Fe^{2+}) в сферическом слое ΔN_0 при включении кулоновского отталкивания d -дырок. В предельном случае $N_0 \ll N_+$ d -дырки займут все вакантные места в сферическом слое, т.е. $\Delta N_0 \approx \Delta N_c$. Поэтому при $N_0 < N_+$ должно выполняться неравенство

$$|\Delta N_0/\Delta N_c - 1| \ll 1, \quad (27)$$

где $\Delta \bar{N}_c = 8\eta$, $\Delta \bar{N}_0 = (\Delta N_1 - 8\eta)N_0/N_+$. Выражение (27) является критерием правильности различных феноменологических подходов к описанию пространственного упорядочения в ССВ ионов железа. Как видно из рис. 3, критерий (27) хорошо выполняется для зависимостей $\eta(N_{\text{Fe}})$, следующих из уравнений (21) и (22). Для уравнения баланса d -дырок и нейтральных центров (22) отношение $\Delta N_0/\Delta N_c = 1$ во всей области концентраций примесей железа. Для нас оказалось удивительным, что для эмпирического уравнения (21) как при $\eta_\infty \approx 0.45$ (кривая 2), так и $\eta_\infty \approx 0.37$ (кривая 3) критерий (27) хорошо выполняется во всей области $N_0 < N_+$. В противоположность этому при $N_0 < N_+$ строгое неравенство (27) не выполняется и для МКК-I [5] (кривая 4), и тем более для „основного уравнения теории“ [26,27] (кривая 5). Чрезмерно медленный рост параметра упаковки для выражения (25), связанный с предположением $W(N_+, r_c, r_1) = W_0$, приводит к тому, что в предельном случае $N_0 \ll N_+$ отношение $\Delta N_0/\Delta N_c \sim 6$ оказывается существенно больше единицы (кривая 5 на рис. 3, b). Очевидно, что уравнение (25) в пределе $N_0/N_+ \ll 1$ имеет неверную асимптотику: в сферическом слое $r_c < r < r_1$ остается большое число свободных мест для перераспределения d -дырок, но автор [26,27], постулировав равенство $W(N_+, r_c, r_1) = W_0$, фактически „запретил“ большей части d -дырок такие переходы.

Итак, эмпирическая формула (21) во всей области $N_0 < N_+$ удовлетворяет критерию (27) и может быть использована для расчета кинетических эффектов в кристаллах $\text{HgSe}:\text{Fe}$. Неудивительно, что рассчитанная с ее помощью зависимость подвижности $\mu(N_{\text{Fe}})$ описывает все характерные особенности экспериментальных данных (кривая 2 на рис. 1) в широкой области содержания примесей железа. В противоположность этому расчет зависимости $\mu(N_{\text{Fe}})$ при использовании уравнения (25) для $\eta(N_{\text{Fe}})$ (кривая 5 на рис. 3, a) и тех же значениях параметров, что и для кривой 2, приводит к чрезмерно медленному росту $\mu_{++}(N_{\text{Fe}})$ в зависимости от содержания примесей железа (кривая 7 на рис. 1). Это обуславливает существенное расхождение результатов расчета с экспериментальными данными на участке роста подвижности и в области максимума $\mu(N_{\text{max}})$: величина μ_{max} оказывается меньше экспериментально измеренной примерно в 2.5 раза, а положение максимума подвижности ($N_{\text{max}} \approx (1-2) \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) оказывается

значительно смещенным в область больших концентраций железа ($N_{\max} \approx 6 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$). Ни при каких значениях подгоночных параметров в этом подходе не удастся описать зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$ как на участке роста подвижности, так и в области ее максимума. Следует отметить, что в [27] при расчете подвижности специфика зоны проводимости не учитывалась, интерференционным рассеянием электронов пренебрегалось (что завышает максимальные значения подвижности в 2 раза), а параметр μ^* использовался в качестве подгоночного параметра теории.

Расчет влияния собственных дефектов (мелких доноров) на подвижность электронов в кристаллах HgSe:Fe [27] базируется на уравнении (25) и выборе парной корреляционной функции ионов железа и собственных дефектов в виде ступенчатой функции $g_{FD}(r) = \vartheta(r - r_c)$. Последнее (выбор корреляционной функции в виде ступенчатой функции) предполагает использование приближения малой плотности ($\eta \ll 1$) или слабых пространственных корреляций ионов железа Fe^{3+} и собственных дефектов. Для оправдания этого приближения вместо анализа системы уравнений для парных корреляционных функций ССВ ионов железа и собственных дефектов автор [27] вводит представления о некоей „дырчатой системе“. При анализе температурной зависимости подвижности электронов [32] также используются уравнение (25) и приближение слабых пространственных корреляций для расчета структурного фактора.

Нарушение закона сохранения числа частиц, нефизическое поведение термодинамических функций в модели слабых корреляций, отмеченные в [18], показывают, что использование этой модели для расчета кинетических эффектов вряд ли можно признать обоснованным. Другим обстоятельством, затрудняющим использование этого приближения для расчета кинетических эффектов, являются отрицательные величины структурных факторов и соответственно отрицательные вероятности рассеяния электронов при увеличении плотности системы. Для ступенчатой функции $g^{(0)}(r) = \vartheta(r - r_c)$ структурный фактор $S^{(0)}(q)$ в области малых волновых векторов становится отрицательным уже при $\eta > 0.125$. В следующих порядках по степеням плотности $S^{(1)}(q)$ и $S^{(2)}(q)$ становятся отрицательными при $\eta > 0.235$ и 0.18 соответственно. Таким образом, приближение малых плотностей или слабых пространственных корреляций может дать физически разумные результаты только для слабо коррелированного газа, т.е. при значениях $\eta < 0.125$, что соответствует значениям $N_{\text{Fe}} < 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Чтобы рассчитать зависимость $\mu(N_{\text{Fe}})$ во всей области концентраций N_{Fe} , необходимо пользоваться парными функциями распределения для случая большой плотности частиц, когда корреляции между ними сильные. В данной работе мы воспользуемся структурными факторами (12), вычисленными в приближении Перкуса–Йевики, которое свободно от указанных выше недостатков. Мы провели

анализ основных предположений и их физических следствий, лежащих в основе работ [26,27,32], который позволяет оценить достоверность результатов этих работ.

Предложенная нами модель короткодействующих корреляций, базирующаяся на решении системы уравнений Орнштейна–Цернике для парциальных корреляционных функций распределения, может быть использована как в области слабых, так и в области сильных кулоновских корреляций d -дырок в ССВ ионов железа. Она позволяет адекватно описать все особенности экспериментально измеренной зависимости подвижности электронов от содержания примесей железа в кристаллах HgSe:Fe при низких температурах. При этом показано, что интерференционное рассеяние, приводящее к отклонению от правила Маттиссена, играет важную роль в релаксации импульса электронов и несомненно должно учитываться при анализе кинетических эффектов.

3. Зависимости времени релаксации от энергии электронов зоны Γ_8

Рассмотрим зависимость времени релаксации от энергии для электронов зоны Γ_8 и сравним результаты с проведенными ранее расчетами без учета блоховских амплитуд в вероятности рассеяния электронов [9,10]. Эта проблема имеет важное значение для анализа термомагнитных эффектов [33]. Дело в том, что такие эффекты, как продольный и поперечный эффекты Нернста–Этингсгаузена, пропорциональны производной времени релаксации по энергии. При изменении степени пространственного упорядочения в ССВ ионов железа подвижность электронов изменяется только по величине, тогда как эффекты Нернста–Этингсгаузена, пропорциональные производной времени релаксации по энергии, могут менять свой знак. Экспериментальные исследования [9,10] подтвердили этот важный теоретический вывод.

На рис. 4, *a* приведены зависимости безразмерного параметра $D(\tau)$ от содержания примесей железа

$$D(\tau) = \varepsilon_F \frac{d}{d\varepsilon} [\ln(\tau(\varepsilon))]_{\varepsilon=\varepsilon_F} = \frac{\varepsilon_F}{\tau(\varepsilon_F)} \left(\frac{d\tau(\varepsilon_F)}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_F} = D_{++} + D_{+0} + D_{00}. \quad (28)$$

При расчете величины $D(\tau)$ использовались те же значения параметров, что и при анализе зависимости $\mu(N_{\text{Fe}})$. Как видно из рис. 4, зависимость $\tau(\varepsilon)$ качественно меняется: для рассеяния на ХСИ и на ССВ ионов железа в области слабых пространственных корреляций $\tau(\varepsilon)$ является возрастающей функцией энергии ($D(\tau) > 0$). При переходе в область сильных корреляций ($N_{\text{Fe}} > 10^{19} \text{ см}^{-3}$) $\tau(\varepsilon)$ становится убывающей функцией энергии ($D(\tau) < 0$). Из сравнения кривых 1 и 2 (рис. 4, *a*) видно, что учет блоховских амплитуд (кривая 1) приводит к смещению $D(\tau)$ в сторону меньших концентраций примесей железа. Предположение $S_{+0} = 1$

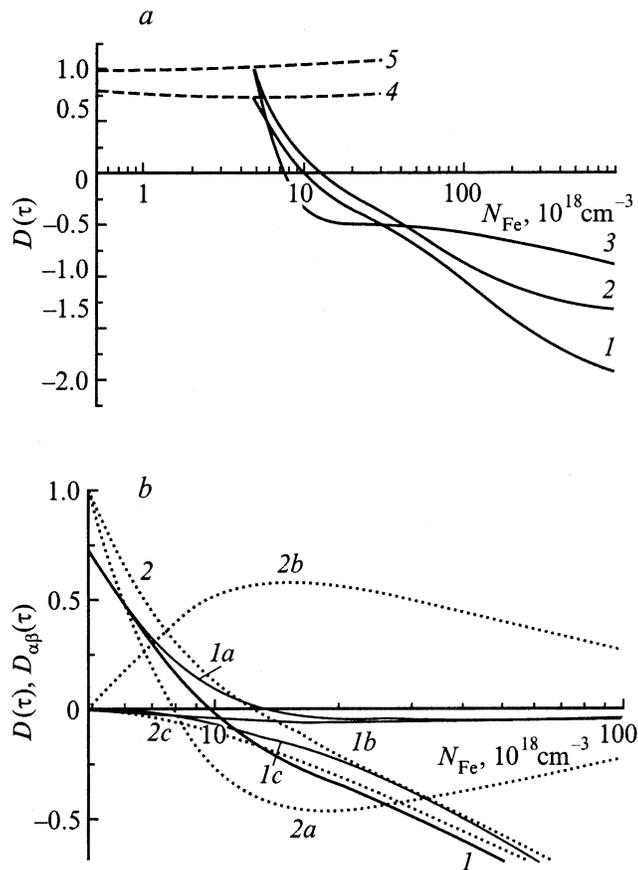


Рис. 4. Зависимости безразмерного параметра $D(\tau)$ (a, b) и парциальных вкладов $D_{\alpha\beta}(\tau)$ (b) от содержания примесей железа. a — 1 для зоны Γ_8 ; 2 и 3 — рассчитаны для зоны Γ_6 без учета блоховских амплитуд в вероятности рассеяния электронов; 4 и 5 — для рассеяния электронов зоны Γ_8 на хаотической системе заряженных центров и рассеяния Брукса–Херринга соответственно. b — кривые 1, 1a, 1b, 1c для электронов зоны Γ_8 ; 2, 2a, 2b, 2c для электронов зоны Γ_6 ; 1a, 2a — вклад $D_{++}(\tau)$; 1b, 2b — вклад $D_{+0}(\tau)$; 1c, 2c — вклад $D_{00}(\tau)$.

(кривая 3), использованное при анализе поперечного эффекта Нернста–Этинггаузена в работах [9,10], приводит к более резкому изменению зависимости $D(\tau)$ в области относительно небольших концентраций примесей железа. Это приближение является явно недостаточным для количественного описания термомагнитных эффектов. Для рассеяния на хаотической системе заряженных центров как для рассеяния по Бруксу–Херрингу (кривая 5), так и для зоны Γ_8 (кривая 4) величина $D(\tau)$ положительна во всем интервале концентраций N_d . Таким образом, в отличие от рассеяния на ХСИ рост степени пространственного упорядочения ССВ ионов железа приводит не только к ослаблению рассеяния электронов и аномальному увеличению подвижности, но и к качественному изменению зависимости времени релаксации от энергии. Смена знака величины $D(\tau)$ приведет к

изменению знаков эффектов Нернста–Этинггаузена с ростом содержания примесей железа.

На рис. 4, b приведены зависимости парциальных вкладов в $D_{\alpha\beta}(\tau)$, связанных с рассеянием на коррелированной системе ионов Fe^{3+} ($D_{++}(\tau)$), на нейтральных центрах ($D_{00}(\tau)$) и с интерференцией рассеяния на заряженных и нейтральных центрах ($D_{+0}(\tau)$) от содержания примесей железа: для электронов зоны Γ_8 (кривые 1, 1a, 1b, 1c) и электронов зоны Γ_6 без учета $s-p$ -гибридизации волновых функций (кривые 2, 2a, 2b, 2c). Как видно из рисунка, наиболее существенно учет блоховских амплитуд в вероятности рассеяния электронов сказывается на интерференционном вкладе $D_{+0}(\tau)$: для электронов зоны Γ_6 он достаточно велик и положителен (кривая 2b), тогда как для электронов зоны Γ_8 интерференционное рассеяние вносит малый вклад в величину $D(\tau)$ во всей области концентрации железа (кривая 1b). При относительно малом содержании примесей железа $N_0 < N^*$ величина $D(\tau)$ почти полностью определяется вкладом $D_{++}(\tau)$, а при больших концентрациях $N_{Fe} \gg N^*$ доминирующий вклад $D(\tau)$ вносит рассеяние на нейтральных центрах $D_{00}(\tau)$. Хотя интерференционное рассеяние вносит малый вклад в зависимость времени релаксации от энергии ($D(\tau)$) для электронов зоны Γ_8 , однако его роль, как показано выше, является существенной для подвижности электронов.

Итак, в данной работе проанализирована роль непараболичности зонной структуры кристаллов HgSe и HgSe:Fe в релаксации импульса электронов. Определены параметры, характеризующие рассеяние электронов на ССВ ионов железа. Одним набором параметров удалось описать как зависимость подвижности от концентрации собственных дефектов в кристаллах HgSe , так и зависимость $\mu(N_{Fe})$ в кристаллах HgSe:Fe . Хорошее количественное согласие результатов расчета подвижности с экспериментальными данными для кристаллов HgSe [14,24,25] и $\mu(N_{Fe})$ для кристаллов HgSe:Fe [3,30] свидетельствует о том, что мы корректно учли как пространственное упорядочение в ССВ ионов железа, так и основные механизмы релаксации электронного импульса. Анализ зависимости времени релаксации от энергии электронов показал, что для количественного описания термомагнитных эффектов необходимо учитывать не только непараболичность закона дисперсии носителей тока в кристаллах HgSe и HgSe:Fe , но и при расчете вероятности рассеяния электронов необходимо принять во внимание $s-p$ -гибридизацию и блоховские амплитуды в волновых функциях электронов.

Анализ термомагнитных эффектов в кристаллах HgSe:Fe с учетом непараболичности зонной структуры, а также влияния гидростатического давления на электропроводность при низких температурах представляет самостоятельный интерес и будет опубликован отдельно.

Авторы выражают благодарность А.П. Танкееву за обсуждение работы и полезные замечания.

Список литературы

- [1] И.М. Цидильковский. УФН **162**, 2, 63 (1992).
- [2] I.M. Tsidilkovskii, I.G. Kuleyev. *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 625 (1996).
- [3] F. Pool, J. Kossut, U. Debska, R. Reifenberger. *Phys. Rev. B* **35**, 5, 3900 (1987).
- [4] R. Reifenberger, J. Kossut. *J. Vac. Technol.* **5**, 5, 2995 (1987).
- [5] Z. Wilamowski, K. Swiatek, T. Dietl, J. Kossut. *Solid State Commun.* **74**, 8, 833 (1990); *Z. Wilamowski. Acta Phys. Pol.* **A77**, *A1*, 133 (1990).
- [6] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ **102**, 5 (11), 1652 (1992).
- [7] И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, И.Ю. Арапова, Г.И. Кулеев. ЖЭТФ **114**, 1 (7), 199 (1998).
- [8] I.G. Kuleyev, N.K. Lerinman, L.D. Sabirzyanova, G.L. Shtra-penin, S.Yu. Paranchich. *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 840 (1997).
- [9] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидиль-ковский. ЖЭТФ **103**, 4, 1447 (1993).
- [10] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидиль-ковский. ФТП **28**, 6, 937 (1994).
- [11] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидиль-ковский. ЖЭТФ **106**, 4 (10), 1205 (1994).
- [12] И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, Г.Л. Штрапенин, И.Ю. Арапо-ва. ФТТ **39**, 10, 1767 (1997).
- [13] W. Szymanska, P. Boguslawki, W. Zawadzki. *Phys. Stat. Sol.* (b) **65**, 641 (1974).
- [14] T. Dietl, W. Szymanska. *J. Phys. Chem. Sol.* **39**, 10, 1041 (1978).
- [15] В.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупро-водниках. Наука, М. (1985). 318 с.
- [16] В.Ф. Гантмахер, И.В. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. Наука, М. (1984). 350 с.
- [17] И.Г. Кулеев, И.Ю. Арапова. ФММ **88**, 3, 43 (1999).
- [18] И.Г. Кулеев, И.Ю. Арапова. ФТТ **43**, 3, 403 (2001).
- [19] J. Kossut. *Phys. Stat. Sol.* (b) **86**, 2, 593 (1978).
- [20] R.J. Iwanowski, T. Dietl, W. Szymanska. *J. Phys. Chem. Sol.* **39**, 10, 1059 (1978).
- [21] C. Skrierbiszewski, Z. Wilamowski, J. Kossut. *Semicond. Sci. Technol.* **8**, S22 (1993).
- [22] Дж. Займан. Модели беспорядка. Мир, М. (1982). 591 с.
- [23] Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика. Т. 1. Мир, М. (1978). 405 с.
- [24] S.L. Lehoczky, J.G. Broerman, D.A. Nelson, C.R. Whitsett. *Phys. Rev. B* **9**, 4, 1598 (1974).
- [25] C.R. Whitsett. *Phys. Rev.* **138**, 3A, A829 (1965).
- [26] В.М. Михеев. ФТТ **41**, 11, 1994 (1999).
- [27] В.М. Михеев. ФТТ **43**, 3, 414 (2001).
- [28] И.Г. Кулеев. ФТТ **39**, 2, 250 (1997).
- [29] И.Г. Кулеев. ФТТ **40**, 3, 425 (1998).
- [30] Н.Г. Глузман, Л.Д. Сабирзянова, И.М. Цидильковский, Л.Д. Паранчич, С.Ю. Паранчич. ФТП **20**, 11, 1994 (1986).
- [31] И.М. Цидильковский, И.Г. Кулеев, Г.Л. Штрапенин. ДАН **347**, 4, 472 (1996).
- [32] В.М. Михеев. ФТТ **43**, 10, 1785 (2001).
- [33] И.М. Цидильковский. Термомагнитные явления в полу-проводниках. Наука, М. (1960). 296 с.