

## Рухливість електронів в сульфіді кадмію

О.П. Малик<sup>1,\*</sup>, В.М. Родич<sup>2</sup>, Г.А. Ільчук<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Національний університет «Львівська політехніка»,  
кафедра напівпровідникової електроніки, пл. Св. Юра, 1, 79013 Львів, Україна  
<sup>2</sup> Національний університет «Львівська політехніка»,  
кафедра фізики, вул. Ст. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

(Одержано 09.06.2015; опубліковано online 20.10.2015)

Розглянуто процеси розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі обумовленому взаємодією з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, центрами статичної деформації, іонізованими та нейтральними домішками в кристалах CdS з концентрацією домішок  $\sim 5.6 \times 10^{16} + 8.7 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Розраховано температурну залежність рухливості та Холл-фактора електронів в інтервалі 10÷400 К.

**Ключові слова:** Явища переносу, Розсіяння носіїв заряду, Сульфід кадмію.

PACS number: 72.20.Dp

### 1. ВСТУП

Сульфід кадмію знаходить широке застосування при виготовленні тонкоплівкових перетворювачів сонячної енергії [1, 2]. Подальший прогрес у оптимізації приладів на основі CdS вимагає більш ретельного моделювання його фізичних параметрів. Одним з важливих параметрів цього матеріалу є рухливість носіїв заряду. Експериментальні дані з дослідження температурної залежності рухливості електронів в CdS представлені в роботі [3]. Як правило, теоретичний аналіз цих залежностей проводиться в наближенні часу релаксації або варіаційним методом. Спільною особливістю всіх цих методів є використання для опису явищ переносу в цьому матеріалі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. В цих моделях припускалося, що носій взаємодіє з усім кристалом (електрон-фононна взаємодія) або носій взаємодіє з потенціалом зарядженої домішки, радіус дії якого  $\sim 20\text{-}100a_0$  ( $a_0$  – стала ґратки). Однак, таке припущення містить наступні протиріччя: а) воно суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу; б) воно суперечить атомістичному принципу, згідно з яким носій взаємодіє (віддає енергію) тільки з одним атомом, а не з багатьма атомами одночасно. Крім того, для дефектів з потенціалом взаємодії  $U \approx 1/r^n$  ( $n = 1,2$ ) на відстанях  $\sim 10 a_0$  потенціал стає величиною другого порядку малості, тоді як зазначені вище моделі розглядаються в першому (борнівському) порядку теорії збурень. З іншого боку, в роботах [4-7] були запропоновані близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду в сполуках АІІВІ та

АІІВV з структурою цинкової обманки та вюртциту, в яких вищевказані недоліки були відсутні. При цьому припускалося, що носій взаємодіє з потенціалом дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки. Поряд з тим, в роботі [7] при розгляді розсіяння електронів в напівпровіднику з структурою вюртциту приймалося до уваги складна структура оптичних коливань кристалічної ґратки. Метою теперішньої роботи є застосування цього підходу для опису процесів розсіяння електронів на різних типах дефектів кристалічної ґратки в CdS.

### 2. ТЕОРІЯ

Структура вюртциту кристалічної ґратки CdS містить чотири атоми в елементарній комірці, що призводить до існування 12 коливальних мод. Згідно теорії груп ці коливання атомів елементарної комірки можна представити у вигляді суми незвідних зображень [8]:  $\Gamma = 2 A_1 + 2 B_1 + 2 E_1 + 2 E_2$ . Одна  $A_1$  мода та одна пара  $E_1$  моди представляють акустичні вітки коливань. Відповідно, сума  $\Gamma_{opt} = A_1 + 2 B_1 + E_1 + 2 E_2$  представляє оптичні коливальні моди. Оптичні коливання класифікуються по зміщенню атомів вздовж осі  $c_0$  та напрямку перпендикулярному до осі  $c_0$ . В результаті отримаємо: моди  $A_1$  та  $E_1$  представляють полярні оптичні коливання, а моди  $B_1^{(1)}, B_1^{(2)}, E_2^{(1)}, E_2^{(2)}$  – неполярні оптичні коливання.

Ймовірність переходу електрона з стану  $\mathbf{k}$  в стан  $\mathbf{k}'$ , викликаного взаємодією з полярним оптичним фононом коливальної моди  $A_1$  має вигляд [7]:

$$W_{A_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2 \pi^7 \gamma_{FO}^{10} e^4}{675 \varepsilon_0^2 a_0^4 c_0^2 G} \frac{M_{Cd} + M_S}{M_{Cd} M_S} \left( 3a_0^2 + c_0^2 \right) \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[ N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{1}{\omega_{TO}} \frac{a_0^2}{c_0^2} \left[ N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] \right\}, \quad (1)$$

\* omalyk@ukr.net

де  $\varepsilon_0$  – діелектрична стала вакууму;  $\gamma_{PO}$  – підгоночний параметр, який визначає радіус дії близькодйючого потенціалу  $R = \gamma_{PO} \frac{1}{2} \sqrt{3 a_0^2 + c_0^2}$  ( $0 < \gamma_{PO} \leq 1$ ,  $a_0; c_0$  – сталі елементарної комірки структури вюртцит);  $G$  – число елементарних комірок в об'ємі кристалу;  $M_{Cd}, M_S$  – маса атомів;  $N_q$  – число фононів з

відповідною частотою поздовжніх ( $\omega(\mathbf{q}) = \omega_{LO}$ ) та поперечних ( $\omega(\mathbf{q}) = \omega_{TO}$ ) коливань при  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ .

Для полярної оптичної моди  $E_1$  одиничний вектор поляризації (в напрямку коливань атому Cd) приймає два значення:  $\xi_1 = (1, 0, 0)$  та  $\xi_1 = (0, 1, 0)$ . Для першого випадку ймовірність переходу має вигляд [7]:

$$W_{E_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{8 \pi^7 \gamma_{PO}^{10} e^4}{675 \varepsilon_0^2 a_0^4 c_0^2 G} \frac{M_{Cd} + M_S}{M_{Cd} M_S} (3a_0^2 + c_0^2) \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})] + \frac{1}{\omega_{TO}} \frac{c_0^2}{a_0^2} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}, \quad (2)$$

а для другого випадку

$$W_{E_2}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{4}{3} \frac{2 \pi^7 \gamma_{PO}^{10} e^4}{675 \varepsilon_0^2 a_0^4 c_0^2 G} \frac{M_{Cd} + M_S}{M_{Cd} M_S} (3a_0^2 + c_0^2) \frac{1}{\omega_{TO}} \left( 1 + \frac{c_0^2}{a_0^2} \right) \times [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})]. \quad (3)$$

Тоді ймовірність переходу для полярної оптичної моди  $E_1$  визначається з виразу:

$$W_{E_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{E_{11}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{E_{12}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'), \quad (4)$$

а повна ймовірність переходу при полярних оптичних (ПО) коливаннях має вигляд:

$$W_{ПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{A_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{E_{11}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{E_{12}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (5)$$

$$W_{B_1^{(1)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{128 \pi^3 A^2 d_0^2 e^4 a_0^4 c_0^2}{6 M G \omega_{LO} (3a_0^2 + c_0^2)^4} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})], \quad (6)$$

де  $d_0$  – константа оптичного потенціалу деформації;  $A = 1.137$ ;  $M = 2 M_{Cd} + 2 M_S$  – маса елементарної комірки.

Для неполярної оптичної моди коливань  $B_1^{(2)}$  домінуючими є поздовжні коливання в підгратці S. Для цієї моди ймовірність переходу носія заряду  $W_{B_1^{(2)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  має вигляд, аналогічний співвідношенню (6) з відповідним значенням  $\omega_{LO}$  та  $A = -6.299$ .

Для неполярної оптичної моди коливань  $E_2^{(1)}$  виконуються наступні умови:

$$q = q_z; \quad q_x = q_y = 0 \quad \begin{cases} \xi_x = 1; \quad \xi_y = \xi_z = 0 - \text{ТО мода;} \\ \xi_y = 1; \quad \xi_x = \xi_z = 0 - \text{ТО мода.} \end{cases} \quad (7)$$

Для цих двох ТО-мод домінуючі коливання спостерігається в підгратці Cd. Для цієї моди ймовірність переходу носія заряду  $W_{E_2^{(1)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  має вигляд, аналогічний співвідношенню (6) з відповідним значенням  $\omega_{LO}$  та  $A = 0.583$ .

Коливання моди  $E_2^{(2)}$  задовольняють умові (7), з тією різницею, що домінуючі коливання відбуваються в підгратці S. Аналогічно до попереднього випадку

Для неполярної оптичної моди коливань  $B_1^{(1)}$  виконується умова:  $\mathbf{q} = (0, 0, q)$ ;  $\xi = (0, 0, 1)$ . Для цієї LO-моди одна підгратка (S) знаходиться в спокої, тоді як в іншій підгратці (Cd) сусідні атоми рухаються в протилежних напрямках. Тоді ймовірність переходу для цього типу коливань визначається з виразу [7]:

ку ймовірність переходу носія заряду  $W_{E_2^{(2)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  має вигляд (6) з відповідним значенням  $\omega_{LO}$  та  $A = 3.41$ .

Результуюча ймовірність переходу носія при розсіянні на неполярному оптичному (НПО) фоні визначається з виразу:

$$W_{НПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W_{B_1^{(1)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{B_1^{(2)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{E_2^{(1)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + W_{E_2^{(2)}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (8)$$

Ймовірність переходу носія заряду з стану  $\mathbf{k}$  в стан  $\mathbf{k}'$ , викликаного взаємодією з акустичними коливаннями (АК) кристалічної ґратки визначається із співвідношення [7]:

$$W_{АК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{8}{3} \cdot \frac{a_0^4 c_0^2}{(3 a_0^2 + c_0^2)^3} \times \frac{\pi^3 E_{AC}^2 k_B T}{\hbar G M} \left( \frac{1}{c_{||}} + \frac{2}{c_{\perp}} \right)^2 \cdot \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (9)$$

де враховано пружний характер процесу розсіяння;  $E_{AC}$  – константа акустичного потенціалу деформації;  $c_{||}, c_{\perp}$  – поздовжня та поперечна швидкість звуку відповідно.

При розгляді взаємодії електрона з

п'єзоелектричними коливаннями необхідно визначити компоненти п'єзоелектричного тензора  $\mathbf{e}$  та макроскопічного тензора деформації  $\mathbf{S}$ . Для структури вюртциту компоненти тензора  $\mathbf{e}$  мають вигляд:

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{13} & e_{13} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

де для компонентів тензора використані позначення Воїгта (Voigt), в координатних позначеннях ці компоненти виражаються наступним чином:  $e_{13} = e_{133}$ ;  $e_{33} = e_{333}$ ;  $e_{15} = e_{113}$ ; решта  $e_{\alpha\beta\gamma} = 0$ .

Компоненти тензора  $\mathbf{S}$  визначаються з співвідношення:

$$B_{13} = \frac{1}{2} i \left[ q_x \left( 2 \xi_{z,v} + \xi_{x,v} \frac{a_0}{c_0} \right) + q_z \left( 2 \xi_{z,v} \frac{c_0}{a_0} + \xi_{x,v} \right) \right]; \quad B_{33} = i \xi_{z,v} \left( q_x \frac{a_0}{c_0} + q_z \right). \quad (13)$$

Поляризація кристалу визначається з виразу  $\mathbf{P} = \mathbf{e} \cdot \mathbf{S}$ , відповідно отримаємо:

$$P_1 = e_{1ik} S_{ik} = e_{133} S_{33} + 2 e_{113} S_{13}; \quad P_2 = e_{2ik} S_{ik} = 0; \quad P_3 = e_{3ik} S_{ik} = e_{333} S_{33}, \quad (14)$$

тобто, необхідно знати лише дві компоненти макроскопічного тензора ( $S_{13}$  та  $S_{33}$ ) деформації.

Спочатку розглянемо поширення поздовжньої акустичної хвилі вздовж осі  $c_0$  кристалу:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & S_{13} \\ 0 & 0 & S_{23} \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} \end{pmatrix}; \quad S_{13} = \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{\hbar}{2 M G \omega_{||}} \right]^{1/2} \left[ b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \mathbf{a}} \right] i \mathbf{q} \frac{c_0}{a_0};$$

$$S_{33} = \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{\hbar}{2 M G \omega_{||}} \right]^{1/2} \left[ b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \mathbf{a}} \right] i \mathbf{q}.$$

Використовуючи методику розрахунку, представлену в [4], отримаємо вираз для ймовірності перехо-

де  $\mathbf{Q}$  – вектор зміщення атомів в елементарній комірці, який є функцією дискретних змінних  $\mathbf{Q}_i = \mathbf{Q}_i(n_1, n_2, n_3)$ .

Використовуючи методику розрахунку похідних  $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x^{\beta}}$ , описану в [7], отримаємо вираз:

$$S_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{q},v} \left[ \frac{\hbar}{2 M G \omega_v} \right]^{1/2} B_{\alpha\beta} \left[ b_{\mathbf{q},v} e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}} - b_{\mathbf{q},v}^* e^{-i \mathbf{q} \mathbf{a}} \right], \quad (12)$$

де  $b_{\mathbf{q},v}$  та  $b_{\mathbf{q},v}^*$  – оператори анігіляції та народження фононів,  $B_{\alpha\beta}$  – деякі величини, серед яких, як буде показано нижче, суттєвими є  $B_{13}$  та  $B_{33}$ :

$\mathbf{q} = (0, 0, q)$ ;  $\xi = (1, 0, 0)$ . В цьому випадку компоненти тензора  $\mathbf{S}$  мають вигляд:

ду носія заряду у випадку поширення поздовжньої акустичної хвилі вздовж осі  $c_0$  кристалу:

$$W_{|| \text{ ПАК}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{e^2 \pi^7 \gamma_{PZ}^{10} (3 a_0^2 + c_0^2) k_B T}{450 \varepsilon_0^2 \hbar c_1^2 G M} E_{PZ ||}^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (15)$$

де  $\gamma_{PZ}$  – підгоночний параметр, що визначає радіус дії близькодійючого потенціалу,

$$R = \gamma_{PZ} \frac{1}{2} \sqrt{3 a_0^2 + c_0^2} \quad (0 < \gamma_{PZ} \leq 1), \quad E_{PZ ||} = 2 \frac{c_0}{a_0} \left( e_{13} + 2 e_{15} \frac{c_0}{a_0} \right) + e_{33}.$$

Для поширення поперечної акустичної хвилі вздовж осі  $c_0$  кристалу маємо два випадки.

1)

$$\mathbf{q} = (0, 0, q); \quad \xi = (1, 0, 0); \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} \\ S_{21} & 0 & 0 \\ S_{31} & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad S_{13} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{\hbar}{2 M G \omega_{\perp}} \right]^{1/2} \left[ b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}} - b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \mathbf{a}} \right] i \mathbf{q};$$

$$S_{33} = 0; \quad P_1 = 2 e_{15} S_{13}; \quad P_2 = P_3 = 0;$$

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = 2 e_{15} \frac{\partial S_{13}}{\partial x} = - \sum_{\mathbf{q}} \left[ \frac{\hbar}{2 M G \omega_{\perp}} \right]^{1/2} \left[ b_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \mathbf{a}} + b_{\mathbf{q}}^* e^{-i \mathbf{q} \mathbf{a}} \right] \mathbf{q}^2 2 e_{15} \frac{c_0}{a_0}.$$

2)

$$\mathbf{q} = (0, 0, q); \xi = (0, 1, 0); \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 & S_{12} & 0 \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} \\ 0 & S_{32} & 0 \end{pmatrix}; S_{13} = 0; S_{33} = 0; P_1 = P_2 = P_3 = 0.$$

Розрахунок ймовірності переходу електрона аналогічний до попереднього випадку і дає:

$$W_{\perp \text{ ПАК}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{e^2 \pi^7 \gamma_{PZ}^{10} (3 a_0^2 + c_0^2) k_B T}{450 \varepsilon_0^2 \hbar c_{\perp}^2 G M} E_{PZ\perp}^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (16)$$

де  $E_{PZ\perp} = 2e_{15} \frac{c_0}{a_0}$ .

Розглянемо поширення поздовжньої оптичної хвилі вздовж осі  $c_0$  кристалу:  $\mathbf{q} = (0, 0, q); \xi = (1, 0, 0)$ .

Цим умовам задовольняє  $A_1$  коливання ПО моди і

$$A_1 \text{ мода: } W_{\parallel \text{ ПОП}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{32 e^2 \pi^9 \gamma_{PZ}^{10} E_{PZ\perp}^2}{75^2 \varepsilon_0^2 G \omega_{LO}} \frac{M_{Zn} + M_O}{M_{Zn} M_O} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO})]; \quad (17)$$

$B_1^{(1)}$  та  $B_1^{(2)}$  моди:

$$W_{\parallel \text{ ПОП}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64 e^2 \pi^9 \gamma_{PZ}^{10} E_{PZ\perp}^2 A^2}{75^2 \varepsilon_0^2 G M \omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO})]. \quad (18)$$

Розгляд поширення поперечної оптичної хвилі вздовж осі  $c_0$  кристалу аналогічний до попереднього випадку. Тут відповідний внесок дають  $E_1$  коливан-

$E_1$  мода:

$$W_{\perp \text{ ПОП}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{32 e^2 \pi^9 \gamma_{PZ}^{10} E_{PZ\perp}^2}{75^2 \varepsilon_0^2 G \omega_{TO}} \frac{M_{Zn} + M_O}{M_{Zn} M_O} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO})]; \quad (19)$$

$$E_2^{(1)} \text{ та } E_2^{(2)} \text{ моди: } W_{\perp \text{ ПОП}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64 e^2 \pi^9 \gamma_{PZ}^{10} E_{PZ\perp}^2 A^2}{75^2 \varepsilon_0^2 G M \omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO})]. \quad (20)$$

Згідно близькодіючих моделей розсіяння в напівпровідниках зі структурою вюртциту ймовірності переходу носія заряду з стану  $\mathbf{k}$  в стан  $\mathbf{k}'$ , викликаного взаємодією з потенціалом статичної деформації (СД), іонізованою (ІД) та нейтральною (НД) домішкою має вигляд [7]:

$$W_{CD}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2^5 3^4 \pi^3 R_1^6 C^2 e^2 E_{PZ}^2 N_{CD}}{V \varepsilon_0^2 \hbar} \frac{1}{q^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (21)$$

$$W_{ID}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\pi e^4 Z_i^2 R_1^4 N_{ID} \gamma_{ID}^4}{2 \varepsilon_0^2 \hbar V} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \quad (22)$$

$$W_{ND}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\gamma_{II} R_1}{2} \frac{20 \pi^2 N_{ND} \hbar^3}{V m^*{}^2 k'} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \quad (23)$$

де  $N_{CD}, N_{ID}, N_{ND}$  – концентрація центрів статичної деформації, іонізованих та нейтральних домішок відповідно;  $Z_i$  – кратність іонізації дефекту;  $m^*$  – ефективна маса носія заряду;  $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$ ;  $C \approx 0.1$ ;  $\gamma_{II}$

$B_1^{(1)}$  та  $B_1^{(2)}$  НПО моди. В результаті можна отримати ймовірності переходу носія заряду при взаємодії з цими вітками коливань:

ня ПО моди і  $E_2^{(1)}$  та  $E_2^{(2)}$  коливання НПО моди. Відповідні вирази для ймовірності переходу носія заряду мають вид:

– підгоночний параметр, що визначає радіус дії близькодіючого потенціалу іонізованої домішки ( $R_1 = \frac{1}{2} \sqrt{3 a_0^2 + c_0^2}$ ,  $0 < \gamma_{II} \leq 1$ );  $E_{PZ}$  – п'єзоелектрична константа, яка має вид  $E_{PZ\parallel}$  або  $E_{PZ\perp}$ . Зауважимо, що в (23) було зроблене наступне припущення – радіус дії близькодіючого потенціалу нейтральної домішки рівний половині радіуса дії близькодіючого потенціалу іонізованої домішки (множник  $\gamma_{II} R_1 / 2$ ).

### 3. ПОРІВНЯННЯ ТЕОРІЇ ТА ЕКСПЕРИМЕНТУ

Розрахунок компонентів тензора провідності проведено на основі формалізму точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана [9]. Використовуючи цей формалізм, отримуємо додатковий підгоночний параметр  $\gamma_{SS} N_{SS}$  (було покладено  $\gamma_{SS} = 1$ ) для СД – механізму розсіяння. Параметри матеріалу, що використовувалися для розрахунку, представлені в таблиці 1.

Таблиця 1 – Параметри CdS, які використовувалися при розрахунку

Параметр напівпровідника	Значення
Постійна ґратки, $a_0$ (м)	$4.1365 \times 10^{-10}$ a
$c_0$ (м)	$6.716 \times 10^{-10}$ a
Ширина забороненої зони, $E_g$ (eV)	$2.579-4.7 \times 10^{-4} T^2/(T+230)$ b
Густина, $\rho$ (кг/м <sup>3</sup> )	$4.82 \times 10^3$ c, d
Швидкість звуку, (м/с)	
$v_{\perp}$	$1.76 \times 10^3$ e
$v_{\parallel}$	$4.25 \times 10^3$ e
Оптичний потенціал деформації, $d_0$ (eV)	6.9 f
Акустичний потенціал деформації, $E_{AK}$ (eV)	3.3 g
Енергетичний еквівалент матричного елемента, $E_P$ (eV)	21 h
Спін-орбітальне розщеплення, $\Delta$ (eV)	0.062 i
Частота оптичних коливань, (рад/с):	
коливання вздовж осі $c_0$	
$A_1$ (LO), $\omega_{LO}$	$5.71 \times 10^{13}$ j
$A_1$ (TO), $\omega_{TO}$	$4.37 \times 10^{13}$ j
$B_1^{(1)}$ (LO), $\omega_{LO}$	$2.46 \times 10^{13}$ j
$B_1^{(2)}$ (LO), $\omega_{LO}$	$5.51 \times 10^{13}$ j
коливання, перпендикулярні до осі $c_0$	
$E_1$ (LO), $\omega_{LO}$	$5.77 \times 10^{13}$ j
$E_1$ (TO), $\omega_{TO}$	$4.56 \times 10^{13}$ j
$E_2^{(1)}$ (TO), $\omega_{TO}$	$7.33 \times 10^{12}$ j
$E_2^{(2)}$ (TO), $\omega_{TO}$	$4.77 \times 10^{13}$ j
Компоненти п'єзoeлектричного тензора, (Кл/м <sup>2</sup> )	
$e_{13}$	- 0.262 k
$e_{33}$	0.385 k
$e_{15}$	- 0.183 k

a – [10]; b – [11]; c – [12]; d – [13]; e – [14]; f – [15]; g – [16]; h – [17]; i – [18]; j – [19]; k – [20];

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в роботі [3] для трьох зразків (зразки 2, 9, 10) сульфїду кадмію. Рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності для широкозонного напівпровідника n-типу (власна провідність нехтувалася) з донорами та компенсованими акцепторами:

$$n + N_A = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{F - E_D}{k_B T}\right)}, \quad (24)$$

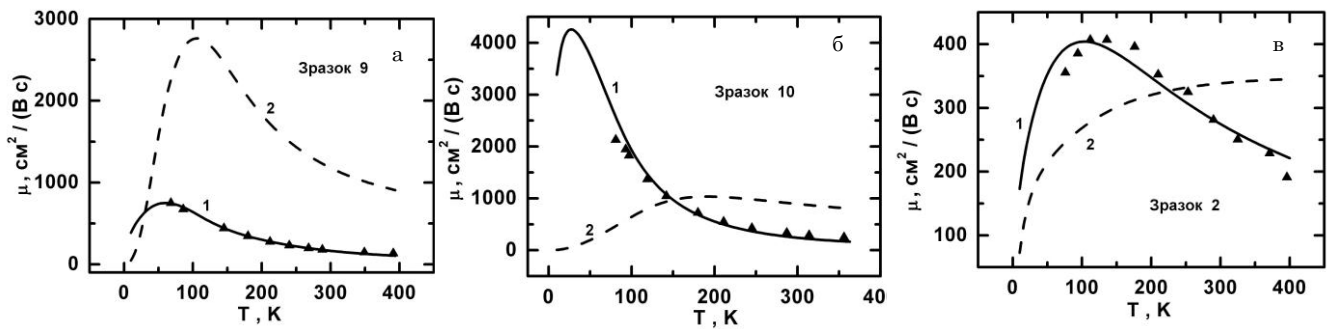
де  $N_D$ ,  $N_A$ ,  $E_D$  – концентрація донорів, акцепторів та енергія іонізації донорів відповідно, значення яких вибиралося згідно результатів роботи [3].

Теоретичні криві  $\mu(T)$  для CdS представлені на

рис. 1. Суцільні лінії представляють криві, розраховані на основі близькодїючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 2 представлені отримані значення параметрів розсіяння  $\gamma$  для різних механізмів розсіяння. Штриховими лініями представлені криві, розраховані на основі далекодїючих моделей розсіяння в наближенні часу релаксації. Відзначимо, що при розрахунках цих кривих використовувалися однакові механізми розсіяння носіїв заряду. Видно, що у всьому розглянутому інтервалі температур близькодїючі моделі розсіяння дають достатньо добре узгодження теорії та експерименту, тоді як наближення часу релаксації дає як якісне (зразки 2 та 10), так і кількісне відхилення теорії від експерименту в 2÷5 разів. Це свідчить про те, що близькодїючі моделі більш адекватно описують процеси розсіяння електронів в сульфїді кадмію у порівнянні з наближенням часу релаксації.

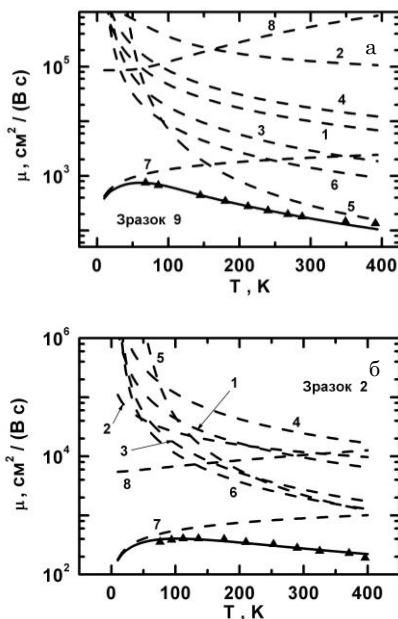
Таблиця 2 – Параметри  $\gamma$  для різних механізмів розсіяння

Зразок	$\gamma_{PO}$	$\gamma_{PZ}$	$\gamma_{II}$	$\gamma_{SS\ NCD}, \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3}$
2	0.58	0.50	1.0	27.0
9	0.72	0.52	1.0	12.0
10	0.70	0.53	1.0	1.3

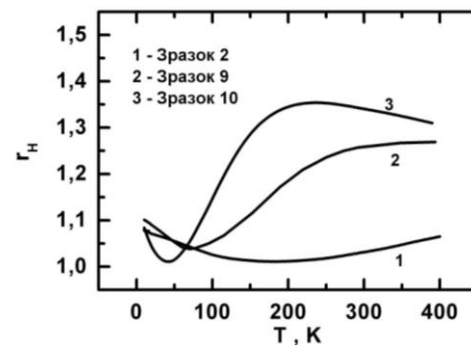


**Рис. 1** – Температурні залежності рухливості електронів в CdS з різною концентрацією домішок. 1 – близькодючі моделі розсіяння; 2 – далекодіючі моделі розсіяння (наближення часу релаксації)

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 2 штриховими лініями представлені відповідні залежності. Видно, що за низьких температур ( $T < 150$  К) основним механізмом розсіяння є розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації (крива 7). За більш високих температур ( $T > 150$  К) домінуючим стає розсіяння на полярних оптичних (крива 5) та п'єзооптичних (крива 6) фононах. Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на неполярних оптичних фононах, розсіяння на акустичних та п'єзоакустичних фононах, нейтральних та іонізованих домішках – дають знехтувано малий внесок.



**Рис. 2** – Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електронів в CdS. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД, НД механізми розсіяння відповідно



**Рис. 3** – Температурна залежність фактору Холла електронів в CdS

На основі отриманих параметрів розсіяння була розрахована температурна залежність Холл-фактору електронів, яка представлена на рис. 3. Видно, що мінімуми на цих кривих відповідають переходу від одного механізму розсіяння за низьких температур (СД – розсіяння) до іншого механізму за високих температур (ПО та ПОП – розсіяння). Цей перехід спостерігається при тим вищій температурі, чим більша концентрація центрів статичної деформації.

**4. ВИСНОВОК**

На основі принципу близькодії розглянуто процеси розсіяння електронів на різного типу дефектах ґратки в кристалах сульфїду кадмію. Встановлено достатньо добру узгодженість теорії та експериментальних даних у дослідженому інтервалі температур. Показано, що близькодючі моделі більш адекватно описують процеси розсіяння електронів в сульфїді кадмію у порівнянні з далекодіючими моделями.

## Подвижность электронов в сульфиде кадмия

О.П. Малык<sup>1</sup>, В.М. Родыч<sup>2</sup>, Г.А. Ильчук<sup>2</sup><sup>1</sup> *Національний університет «Львівська політехніка»,  
кафедра напівпровідникової електроніки, пл. Св. Юра, 1, 79013 Львів, Україна*<sup>2</sup> *Національний університет «Львівська політехніка»,  
кафедра фізики, ул. Ст. Бандеры, 12, 79013 Львів, Україна*

Рассмотрены процессы рассеяния электронов на ближкодействующем потенциале, обусловленном взаимодействием с полярными и неполярными оптическими фононами, пьезоэлектрическими и акустическими фононами, центрами статической деформации, заряженной и нейтральной примесью в кристаллах CdS с концентрацией примеси  $\sim 5.6 \times 10^{16} \div 8.7 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . Рассчитано температурную зависимость подвижности и Холл фактора электронов в интервале  $10 \div 400 \text{ К}$ .

**Ключевые слова:** Явления переноса, Рассеяние носителей заряда, Сульфид кадмия.

## Electron Mobility in Cadmium Sulfide

O.P. Malyk<sup>1</sup>, V.M. Rodych<sup>2</sup>, H.A. Ilchuk<sup>2</sup><sup>1</sup> *Lviv Polytechnic National University, Semiconductor Electronics Department, 1, St. Yura Sq., 79013 Lviv, Ukraine*<sup>2</sup> *Lviv Polytechnic National University, Physics Department, 12, S. Bandera Str., 79013 Lviv, Ukraine*

The processes of the electron scattering by the short-range potential caused by the interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons, static strain centers, ionized and neutral impurities in CdS crystals with impurity concentration of  $\sim 5.6 \times 10^{16} \div 8.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  are considered. The temperature dependences of the electron mobility and Hall factor in the temperature range of  $10 \div 400 \text{ K}$  are calculated.

**Keywords:** Transport phenomena, Charge carrier scattering, Cadmium sulfide.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. D.M. Meysing, C.A. Wolden, M.M. Griffith, H. Mahabuduge, J. Pankow, M.O. Reese, J.M. Burst, W.L. Rance, T.M. Barnes, *J. Vac. Sci. Technol. A* **33**, 021203 (2015).
2. H. Moualkia, G. Rekhila, M. Izerrouken, A. Mahdjoub, M. Trari, *Mat. Sci. Semicon. Proc.* **21**, 186 (2014).
3. B. Pödör, J. Balazs, M. Harsy, *phys. status solidi a* **8**, 613 (1971).
4. O.P. Malyk, *Mater. Sci. Eng. B* **129**, 161 (2006).
5. O.P. Malyk, *Physica B* **404**, 5022 (2009).
6. O.P. Malyk, *Diamond Relat. Mater.* **23**, 23 (2012).
7. O.P. Malyk, *Can. J. Phys.* **92**, 1372 (2014).
8. C.F. Klingshirn, B.K. Meyer, A. Waag, A. Hoffmann, J. Geurts, *Zinc Oxide. From Fundamental Properties Towards Novel Applications. Springer Series in Materials Science*. Vol. **120**, Chap. 2. (Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg: 2010).
9. O.P. Malyk, *WSEAS Trans. Math.* **3**, 354 (2004).
10. H. Sova, *Solid State Sci.* **7**, 73 (2005).
11. A. Imada, S. Ozaki, S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **92**, 1793 (2002).
12. *Handbook of Chemistry and Physics* (Ed. by C. Hodgman) (Chemical Rubber Publishing Company Co.: Cleveland, Ohio: 1962).
13. N.Kh. Abrikosov, V.F. Bankina, L.V. Poretskaya, L.E. Shelimova, E.V. Skudnova, *Semiconducting II-VI, IV-VI and V-VI Compounds, Plenum*, 27 (New York: 1969).
14. J. Wicksted, M. Matsushita, H.Z. Cummins, T. Shigenari, X.Z. Lu, *Phys. Rev. B* **29**, 3350 (1984).
15. A. Blacha, H. Presting, M. Cardona, *phys. status solidi b* **126**, 11 (1984).
16. D.L. Rode, *Semiconductors and Semimetals*. Vol. **10**, Chap. 1 (Eds. by R.K. Willardson, A.C. Beer) (Academic Press: New York, San Francisco, London: 1975).
17. S.Zh. Karazhanov, L.C. Lew Yan Voon, *Semiconductors* **39**, 161 (2005).
18. O. Goede, D. Hennig, L. John, *phys. status solidi b* **96**, 189 (1979).
19. A. Debernardi, N.M. Pyka, A. Göbel, T. Ruf, R. Lauck, S. Kramp, M. Cardona, *Solid State Commun.* **103**, 297 (1997).
20. I.B. Kobiakov, *Solid State Commun.* **35**, 305 (1980).