

## بررسی پراکندگی ناکشسان فونونهای اپتیکی قطبی در CdTe

عربشاهی، هادی<sup>۱</sup>؛ گل افروز، سپیده<sup>۱,۲</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

<sup>۲</sup>موسسه آموزش عالی سلمان مشهد

چکیده:

یک مدل جدید پراکندگی ناکشسان الکترون-فونون در فونونهای اپتیکی قطبی نشان می‌دهد که احتمال پراکندگی به پارامترهای ماکروسکوپیک وابسته نیست. مدل مذکور در محدوده دماهای  $77-300\text{ K}$  توافق خوبی با نتایج تجربی نشان می‌دهد.

## A Study of inelastic electron – polar optical phonon scattering in CdTe

Arabshahi, Hadi<sup>1</sup>; Golafrooz, Sepideh<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

<sup>2</sup>Salman Institute of Higher Education, Mashhad, Iran

### Abstract

A new model of inelastic electron-phonon scattering on polar optical phonons have been carried out. The model shows that the scattering probability does not depend on macroscopic parameters. The reviewed model gives the good agreement between the theory and experiment in temperature range of 77 - 300 K.

PACS No. 72.10

نیز مانند GaAs یک دره مینیمموم در  $k=0$  دارد (دره  $\Gamma$ )، بنابراین

مقدمه:

در حضور میدانهای ضعیف میتوان از پراکندگی بین درهای چشم پوشی کرد. همچنین در پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی دو حالت جذب و گسل در نظر گرفته می‌شوند [۲]. همچنین آهنگ پراکندگی در CdTe تقریباً یک مرتبه از GaAs بزرگتر است که این را می‌توان به خواص یونی قویتر آن نسبت داد.

### مدل پراکندگی الکترون – فونون اپتیکی قطبی:

جابجایی اتم  $Z$  در یک سلول واحد کریستالی با ساختار زینک بلند را تحت تاثیر نوسانات قطبی بصورت زیر در نظر می‌گیریم [۳].

مکانیزم پراکندگی غالب در نیمرسانهای قطبی نظیر CdTe به جز در پایین ترین دماها از برهمکنش الکترون-فونون نتیجه می‌شود. برهمکنش الکترون-فونون در هر دو حرک پذیری اهمی و غیر اهمی شرکت می‌کنند. در CdTe دمای دبای بیشتر از  $1000\text{ K}$  است [۱]، از اینرو پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی می‌تواند به عنوان یک فرآیند ناکشسان در نظر گرفته شود. دیگر فرآیندهای پراکندگی نظیر پراکندگی از فونونهای اکوستیکی و پراکندگی پیزو الکتریک به عنوان فرآیندهای کشسان در نظر گرفته شده‌اند. CdTe

که برای یک سلول واحد ساختار زینک بلند  $\Delta x = \frac{a_0}{2}$  در نظر گرفته شده است. روابط مشابهی برای

$\frac{\partial P_z}{\partial z}$  با  $\frac{\partial P_y}{\partial y}$  و شده است. روابط مشابهی برای  $\Delta y = \Delta z = \frac{a_0}{2}$  می توان نوشت. نهایتاً معادله پواسون برای یک پتانسیل اسکالر مقید به صورت زیر بدست می آید.

$$\nabla^2 \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} = \frac{8ie}{a_0^3 \epsilon_0} \sum_q \left[ \frac{\hbar}{2G \omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \times \left[ b_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b_q^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right], \quad (5)$$

که در آن  $\frac{a_0}{2} < i = x, y, z$  و فقط نوسانات اپتیکی طولی در نظر گرفته شده اند. ثابت دی الکتریک است. برای حل معادله (5) مقدار  $\gamma = 0/628$  را انتخاب می کنیم، بنابراین با حل معادله پواسون در مختصات کروی به سازگاری خوبی با محاسبات تجربی می رسیم.

$$\varphi = \frac{\rho}{2\epsilon_0} (R^2 - \frac{r}{3}), \quad (0 \leq r \leq R) \quad (6)$$

آنگاه انرژی برهمنکش یک الکترون با نوسانات اپتیکی قطبی شبکه از رابطه زیر بیان می شود:

$$U = -e\varphi = \frac{4ie^2}{a_0^3 \epsilon_0} (R^2 - \frac{r}{3}) \sum_q \left[ \frac{\hbar}{2G \omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \times \left[ b_{q,v} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b_{q,v}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right]. \quad (7)$$

باید توجه شود که این پتانسیل کوتاه برد است در نتیجه فقط برهمنکش الکترون با یک سلول واحد در محاسبات به حساب می آید. برای محاسبه احتمال گذار در برهمنکش الکترون - فونون یا باید تابع موج سیستم الکترون - فونون را بصورت زیر بنویسیم:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (8)$$

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{\sqrt{G}} \sum_{q,v} \left[ \frac{\hbar}{2M \omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} [\xi_j(\mathbf{q}, v) b_{q,v} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + \xi_j^*(\mathbf{q}, v) b_{q,v}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}],$$

که  $G$  تعداد سلولهای واحد در یک حجم کریستال است.  $M = M_{Cd} + M_{Te}$  جرم سلول واحد،  $\mathbf{q}$  و  $(\mathbf{q}, v)$  به ترتیب بردار موج و فرکانس زاویه ای شاخه  $v$  ام نوسانهای اپتیکی یک کریستال است.  $\xi_j$  بردار پولاrizاسیون نوسانهای کریستال،  $b_{q,v}^*$  به ترتیب عملگرهای فنا و تولید فونونها برای شاخه  $v$  با بردار موج  $\mathbf{q}$  است.

$$\rho = i(n_2 + n_3) \frac{a_0}{2} + j(n_1 + n_3) \frac{a_0}{2} + k(n_2 + n_1) \frac{a_0}{2}$$

تحت نوسانات اپتیکی در سلول واحد یک بردار پولاrizاسیون به صورت:

$$\mathbf{P} = \frac{e(\mathbf{Q}_1 - \mathbf{Q}_2)}{V_0} \quad (2)$$

است که  $V_0 = \frac{a_0}{4}$  حجم سلول واحد و  $e$  بار اولیه است. با بکار بردن معادله (1) می توان نوشت

$$\mathbf{P} = \frac{4e}{a_0^3} \sum_{q,v} \left[ \frac{\hbar}{2M \omega_v(\mathbf{q})} \right]^{1/2} (\xi_1(\mathbf{q}, v) - \xi_2(\mathbf{q}, v)) \times \left[ b_{q,v} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b_{q,v}^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \right]. \quad (3)$$

باید توجه شود که بردار پولاrizاسیون تابعی از متغیرهای گستته است. برای محاسبه مشتق جزئی یک بردار پولاrizاسیون نسبت به مختصات را جایگذاری کنیم.

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_x}{\partial x} &\rightarrow \frac{P_x(n_1+1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \\ &+ \frac{P_x(n_1, n_2+1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \\ &+ \frac{P_x(n_1, n_2, n_3+1) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x}, \end{aligned} \quad (4)$$

انتگرال گیری روی مختصات نوسانگرهای هارمونیک ، جملات  $\sqrt{N_q}$  و

$$N_q = \sqrt{N_q + I} \quad (\omega(\mathbf{q}) = \omega_0) \quad \text{در}$$

$\rightarrow \mathbf{q} \rightarrow 0$  را به ترتیب برای عملگرهای تولید و فناوری فونون بدست می

دهد. برای محاسبه مجموع بر روی  $\mathbf{q}$  باید مختصص‌سازی زیر را انجام

دهیم. فاکتور گاوی پیوسته بردار تغییر موج را در نظر بگیرید. از انتگرال

گیری خواهیم داشت

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} \dots &\rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \dots dq_x dq_y dq_z \rightarrow \\ &\rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/a_0} \int_0^{\pi/a_0} q^2 \sin \theta dq d\theta d\varphi. \end{aligned} \quad (11)$$

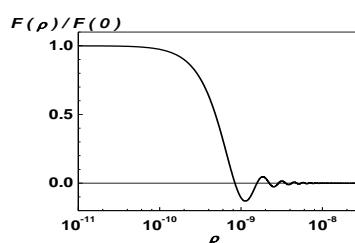
آنگاه عبارت زیر را بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} \sum_q \dots &= F(\rho) = \\ &= \pi \frac{8 \cos \rho Q + 8 \rho Q \sin \rho Q - 4 \rho^2 Q^2 \cos \rho Q - 8}{\rho^4} \times \\ &\times \begin{cases} \sqrt{N_q} - \text{absorption}; \\ \sqrt{N_q + 1} - \text{radiation}. \end{cases} \quad Q = \pi/a_0. \end{aligned} \quad (12)$$

همانطور که از شکل (۲) پیداست وابستگی مقدار  $F(\rho)/F(0)$  به

$\rho$  نشان میدهد که تابع  $F(\rho)$  می تواند با عبارت زیر تخمین زده شود:

$$F(0) = \pi Q^4 \times \begin{cases} \sqrt{N_q} \\ \sqrt{N_q + 1} \end{cases} \quad (\text{الف}) \quad (12)$$



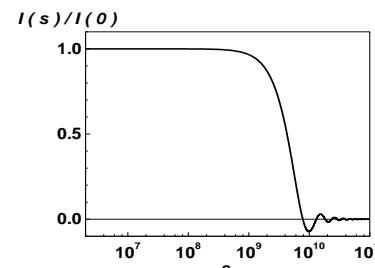
شکل (۲): وابستگی مقدار  $F(\rho)/F(0)$  به  $\rho$

که  $V$  حجم کریستال و  $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$  تابع موج سیستم نوسانگرهای هارمونیک است. آنگاه عناصر ماتریس گذار با استفاده از انرژی برهمکنش به صورت:

$$\begin{aligned} \langle N'_q, \mathbf{k}' | U | N_q, \mathbf{k} \rangle &= \frac{4ie^2}{a_0^3 \epsilon_0 V} \int \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) (R^2 - \frac{r}{3}) \\ &\times \int \Phi^*(x_1, x_2, \dots, x_n) [b_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b_q^* e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}] \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) \times \\ &\times dx_1 dx_2 \dots dx_n, \quad \mathbf{s} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'. \end{aligned} \quad (4)$$

بدست می آید. انتگرال گیری روی مختصات الکترون در محدوده سلول واحد بدست نتیجه می دهد:

$$\begin{aligned} I(s) &= \int \exp(i\mathbf{s}\mathbf{r}) (R^2 - \frac{r}{3}) dr = \\ &= \frac{\pi (8 \sin Rs - 8Rs \cos Rs - 8/3 R^3 s^3 \cos Rs)}{s^5} \end{aligned} \quad (10)$$



شکل (۱): وابستگی مقدار  $I(s)/I(0)$  به  $s$

محاسبه نشان می دهد که بردار موج الکترون با تغییر انرژی از  $0$  تا  $T_{K_B}$  در محدوده دمایی  $4/2-300 K$  از  $0$  تا  $10^9 M^{-1}$  تغییر می کند. همانطور که در شکل (۱) مشخص است وابستگی مقدار  $I(s)/I(0)$  به  $s$  که در محدوده تغییر بردار موج نشان داده شده است، رابطه زیر را نتیجه می دهد

$$I(s) \approx I(0) = 16/15 \pi R^5 = 16/15 \pi a_0^5 \gamma^5$$

که  $\delta_{\alpha\beta}$  دلتای کرونوکر،  $f_0(\varepsilon)$  ثابت فرمی-دیراک و  $\theta(x)$  تابع گام است. محاسبات وابستگی دمایی حرک پذیری الکترون برای چگالی

پذیرنده  $N_a = 3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  انجام شده است، بنابراین این امکان فراهم است که از سهم حفره های سنگین (حدود ۱%) چشم پوشی کرد. همانگونه که از شکل (۳) مشخص می شود منحنی تئوری به خوبی

با داده های تجربی در محدوده دمایی  $T > 100 \text{ K}$  منطبق است [۳و۴].

مشهود است که مدل پیشنهادی ما به طور کافی فرآیند پراکندگی الکترون-فونون اپتیکی قطبی را، بر خلاف مدل معرفی شده در [۱]، توصیف می کند. همچنین از شکل مشخص است که فرآیند پراکندگی غالب در  $K > 100 \text{ K}$  پراکندگی برون دره ای است و میتوان از سهم پراکندگی درون دره ای چشم پوشی کرد.

#### نتیجه:

مدل پراکندگی ناکشسان الکترون-فونون اپتیکی قطبی در CdTe که در چارچوب حل دقیق معادله بولتزمن بیان شده توافق خوبی با مقادیر تجربی در محدوده دمایی  $T > 100 \text{ K}$  بدست می دهد.

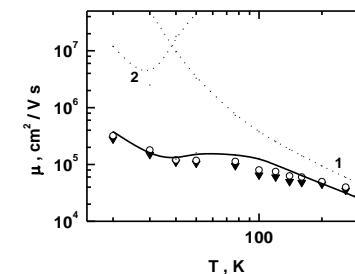
#### مراجع:

- [1] W. Szymanska, T. Dietl, Electron scattering and transport phenomena in small-gap zinc-blende semiconductors, J. Phys. Chem. Solids, Vol. 39, 1978, pp. 1025-1040.
- [2] J. Dubowski, T. Dietl, W. Szymanska, Electron scattering in  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ , J. Phys. Chem. Solids, Vol. 42, 1981, pp. 351-362.
- [3] O.P.Malyk, Nonelastic electron scattering in mercury telluride. Ukr. Phys. Zhurn., Vol.47, 2002, pp. 842-845.
- [4] O.P. Malyk, Nonelastic charge carrier scattering in mercury telluride, Accepted to publication in Journal of Alloys and Compounds.
- [5] V.L. Bonch-Bruevich, S.G. Kalashnikov, Physics of Semiconductors, Nauka, Moscow, 1977 (in Russian).

بعد از محاسبات می توانیم بیانی برای احتمال گذار الکترون در ارتباط با جذب و گسیل فونون بدست آوریم.

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{64 \pi^7 \gamma^{10} e^4}{225 \varepsilon_0^2 a_0^4 G \omega_0} \times [N_q \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_0) + (N_q + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_0)] \quad (13)$$

که  $\mathcal{E}$  انرژی الکترون است.



شکل (۳): وابستگی حرک پذیری الکترون به دما در CdTe. منحنی تئوری مجموع مکانیزمهای پراکندگی، منحنی (۱) پراکندگی برون دره ای و منحنی (۲) پراکندگی درون دره ای را نشان می دهد.

بر مبنای این برای گذار دروندرهای و بروندرهای الکترون مقادیر  $K_{\beta\alpha ab}^{n m}$  رسم شده از یک روش حل دقیق معادله بولتزمن، بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} K_{\beta\alpha 11}^{n m} = & - \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{64 \pi^6 e^4 \hbar^2 \gamma^{10}}{675 \varepsilon_0^2 a_0 \omega_0 k_B T} \frac{M_{Hg} + M_{Te}}{M_{Hg} M_{Te}} \delta_{\alpha\beta} \times \\ & \times \int [N_q f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon + \hbar\omega_0)] k^2 (\varepsilon + \hbar\omega_0) \times \\ & \times \frac{\partial k(\varepsilon + \hbar\omega_0)}{\partial \varepsilon} + (N_q + 1) \theta(\varepsilon - \hbar\omega_0) f_0(\varepsilon) \times \\ & \times [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_0)] k^2 (\varepsilon - \hbar\omega_0) \frac{\partial k(\varepsilon - \hbar\omega_0)}{\partial \varepsilon}] k^4(\varepsilon) \times \\ & \times \left( \frac{2 m_{hh}}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{\alpha\beta} \int (N_q + 1) f_0(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon - \hbar\omega_0)] \times \\ & \times (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar\omega_0)^{\frac{1}{2}} k^4(\varepsilon) \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon, \end{aligned}$$