МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

МАЛИК ОРЕСТ ПЕТРОВИЧ

OLS

УДК 538.935

ЯВИЩА ПЕРЕНОСУ В НАПІВПРОВІДНИКАХ А^пВ^{vi} та А^шВ^v на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду

01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Автореферат

дисертації на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Львів – 2018

Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі напівпровідникової електроніки Національного університету "Львівська політехніка" Міністерства освіти і науки України

Науковий консультант:	доктор технічних наук, професор Дружинін Анатолій Олександрович, Національний університет "Львівська політехніка", завідувач кафедри напівпровідникової електроніки
Офіційні	доктор фізико-математичних наук, професор
опоненти:	Свтух Анатолій Антонович
	Інститут фізики напівпровідників НАН України, м. Київ, завідувач лабораторії фізичних основ електронних напівпровідникових мікро- та нанотехнологій
	доктор фізико-математичних наук, професор
	Маслюк Володимир Трохимович
	Інститут електронної фізики НАН України, м. Ужгород,
	завідувач відділу фотоядерних процесів
	доктор фізико-математичних наук, професор
	Крамар Валерій Максимович
	Чернівецький національний університет імені Юрія
	Федьковича, завідувач кафедри професійної та
	технологічної освіти і загальної фізики

Захист відбудеться " _____ 2018 року о 15⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка (79005, м. Львів, вул. Драгоманова, 5) та на вебсторінці http://physics.lnu.edu.ua/research/zahysty-dysertatsij.

Автореферат розіслано " " ____ 2018 року.

Учений секретар спеціалізованої вченої ради, д-р фіз.-мат. наук

<u>А.А.</u> Ровенчак

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Напівпровідникова електроніка сьогодні значно впливає на рівень розвитку науки і техніки. Подальший прогрес у цих галузях пов'язаний з широким застосуванням найновіших технологій напівпровідникового приладобудування та використання принципово нових фізичних ефектів у твердих тілах. Це спонукає до постійного пошуку нових напівпровідникових матеріалів з ліпшими параметрами, розробки методів цілеспрямованого впливу на їхні фізичні властивості, а також розробки методів більш адекватного опису властивостей напівпровідникових матеріалів. Особливе місце серед напівпровідникових матеріалів, що мають широке практичне застосування, посідають сполуки $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$. Ці напівпровідникові сполуки, зокрема, телуриди ртуті, кадмію, цинку, селенід цинку та нітриди елементів ІІІ групи, є перспективними матеріалами для оптоелектроніки завдяки можливості електронних приладів, виготовлених на їхній основі, реєструвати випромінювання в широкому діапазоні електромагнітного спектра, а також завдяки низці інших унікальних властивостей, притаманних цим матеріалам. Тому дослідження властивостей цих катеріалів є актуальною прикладною задачею.

Зазвичай, опис явищ перенесення в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ проводиться в наближенні часу релаксації або варіаційним методом на основі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. Однак, як зазначено вище, існує потреба подальшого розвитку цих методів опису явищ перенесення в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$, які б давали точніший опис характеристик цих сполук. Тому в цій роботі на основі принципу близькодії пропонується такий подальший розвиток зазначених вище підходів у теорії розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної гратки, який би давав ліпше узгодження експериментальних даних з теоретичними розрахунками. Такий розвиток теорії розсіяння носіїв заряду на кристалічних дефектах дасть змогу адекватніше описати фізичні властивості матеріалів і ліпше спрогнозувати параметри приладів на їхній основі. Тому проблема розв'язку означеної задачі є актуальною.

<u>Зв'язок</u> роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконана відповідно до планів науково-дослідних робіт кафедри напівпровідникової електроніки Національного університету "Львівська політехніка" за темами: "Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ " (номер державної реєстрації 0107U009533); "Фізико-хімічні процеси синтезу і контрольованої модифікації властивостей матеріалів функціональної мікро- та наноелектроніки та розроблення перетворювальних приладів на їх основі" (номер державної реєстрації 0113U001367).

<u>Мета і завдання дослідження.</u> Метою дисертаційної роботи є розроблення на основі принципу близькодії нового підходу для опису процесів розсіяння носіїв заряду на кристалічних дефектах різного типу в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з використанням точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії. Для досягнення цієї мети в роботі вирішували такі завдання:

- Вибір близькодіючого потенціалу розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки зі структурою сфалериту та вюртциту.
- Розв'язок квантово-механічної задачі розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі, викликаному взаємодією носія заряду з полярними оптичними

фононами, неполярними оптичними фононами, акустичними фононами, акустичними й оптичними коливаннями п'єзоелектричного поля, зарядженою домішкою, нейтральною домішкою та потенціалом статичної деформації.

- Розв'язок стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії та визначення критерію відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків.
- Порівняння теоретичних кривих, отриманих у рамках близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння, з експериментальними даними для температурних залежностей рухливості носіїв заряду в твердих розчинах Cd_xHg_{1-x}Te, Cd_xHg_{1-x}Se, Zn_xCd_{1-x}Te, Zn_xHg_{1-x}Te, Zn_xHg_{1-x}Se, InSb (структура сфалериту) та в сполуках GaN, InN, CdS та ZnO (структура вюртциту).

Об'єкт дослідження – квантово-механічні процеси розсіяння носія заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки в низці сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V.

Предмет досліджень – явища перенесення в низці сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V, розглянутих на основі близькодіючих моделей розсіяння носія заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки.

<u>Методи дослідження.</u> Метод теорії збурень для розв'язування квантово-механічних задач теорії розсіяння, методи математичної фізики для розв'язування рівняння Пуассона та інтегро-диференціального рівняння Больцмана, методи алгебраїчної геометрії для розв'язування системи неоднорідних алгебраїчних рівнянь, метод інтерполяції для визначення залежностей фізичних характеристик твердих розчинів від складу компонентів, метод Ньютона-Котеса для числового інтегрування.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в тому, що в дисертаційній роботі вперше:

1. На основі принципу близькодії розвинуто новий підхід до опису процесу взаємодії носія заряду з точковими дефектами кристалічної гратки.

2. Запропоновано вибір радіуса дії потенціалу взаємодії у вигляді $r = \gamma_{II} a_0 (\gamma_{II} -$ підгінний параметр, що змінюється в межах [0,1]; a_0 – параметр гратки) у разі розгляду розсіяння носія заряду на іонізованій домішці.

3. Запропоновано обмежити граничну відстань дії потенціалу взаємодії носія заряду з нейтральною домішкою величиною, яка дорівнює половині сталої гратки, що призводить до збільшення ефективного радіуса Бора розсіювального центру. У разі вибору потенціалу взаємодії носія заряду з центром статичної деформації $U \sim b_0 r^{-2}$ величина b_0 , що характеризує розмір дефекту, прирівнюється до сталої гратки.

4. Прийнято до уваги дискретний характер структури кристала в ході розгляду розсіяння носіїв заряду на акустичних та неполярних оптичних фононах, що визначає вид гамільтоніана взаємодії у вигляді функції від дискретних змінних.

5. Враховано дискретну структуру кристала в описі взаємодії носіїв заряду з полярним оптичним фононом, що зумовлює вибір дипольного моменту та вектора поляризації елементарної комірки, а також відповідної об'ємної густини зв'язаного заряду у вигляді функції дискретних змінних.

6. Прийнято до уваги дискретну структуру кристала в ході розгляду розсіяння носіїв заряду на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля, що визначає вид макроскопічного вектора поляризації, який є функцією дискретних змінних. 7. Обґрунтовано знаходження аналітичного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії та екстремумом енергетичних зон у центрі зони Бриллюена.

8. На основі запропонованого підходу наведено теоретичні температурні залежності рухливості носіїв заряду в низці напівпровідникових сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V зі структурою сфалерит та вюртцит, які ліпше узгоджуються з експериментом порівняно з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

Практичне значення одержаних результатів.

1. Запропонований підхід розгляду процесів розсіяння носіїв заряду на основі принципу близькодії у твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xCd_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, InSb, GaN, InN, CdS та ZnO поглиблює наші знання з напівпровідникового матеріалознавства і може бути використаний для моделювання фізичних процесів, що відбуваються у створюваних на їхній основі приладах.

2. Розглянуті моделі розсіяння носіїв заряду на близькодіючих потенціалах кристалічних дефектів дають змогу обчислити компоненти тензора провідності в напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит, що допоможе визначити різноманітні електрофізичні характеристики цих напівпровідників.

3. Розглянутий метод розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана може бути використаний для визначення нерівноважної функції розподілу напівпровідникових твердих розчинів на основі сполук A^{II}B^{VI} та A^{III}B^V, що мають ізотропний закон дисперсії та екстремуми енергетичних зон у центрі зони Бриллюена.

Особистий внесок здобувача.

Особистий внесок автора полягає в розробці фізичних ідей, формулюванні задач та їхній реалізації, проведенні описаних у роботі теоретичних досліджень та в самостійному узагальнені результатів досліджень. Праці [1-15,17-19,23,76,79-82] написані автором самостійно. У працях, опублікованих зі співавторами [16,20-22,24, 25,73-75,77,78], дисертанту належить визначальна роль у постановці задачі, розробці фізичних моделей та інтерпретації результатів досліджень, підготовці публікацій. На міжнародних конференціях, де доповідали результати роботи, автор представив 47 доповідей (з них 44 одноосібні). Авторові належить розробка загальної концепції дисертаційної роботи, формулювання основних висновків і положень.

Апробація результатів дисертації. Результати досліджень, що включені до дисертації, доповідались і обговорювались на наступних наукових конференціях: 6th International Conference "Material Science and Material Properties for Infrared Optoelectronics" (Kyiv, 2002); 6th International Workshop on Expert Evaluation and Control of Compound Semiconductor Materials and Technologies (EXMATEC) (Budapest, Hungary, 2002); 1-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Одеса, 2002); The European Material Conference EMRS (Strasbourg, France, 2002, 2004); Symposium on Solid Solution of the II-VI Compounds - Growth, Characterization and Applications (Zakopane, Poland, 2002); I Міжнародна науковотехнічна конференція "Сенсорна електроніка і мікросенсорні технології" CEMCT-1 (Одеса, 2004); European Materials Research Society E-MRS Fall Meeting. Symposium F: "Wide band gap II-VI semiconductors: growth, characterization and applications" (Warsaw, Poland, 2004); The XXIV conference on Solid State Physics and Materials

Science & Workshop on Photonic Materials and Optoelectronic Devices (Safaga, Egypt, 2004); ІІ Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Чернівці, 2004); 12th International Conference on II-VI Compounds (Warsaw, Poland, 2005); 12th Canadian Semiconductor Technology Conference (Ottawa, Canada, 2005); 12th International conference on composites / nanoengineering ICCE-12 (Tenerife, Spain, 2005); International Conference "Functional Materials" ICFM (Crimea, Ukraine, 2005, 2007, 2009); International conference "Nanoelectronic devices for defence & security" NANO-DDS (Arlington, USA, 2007); International Conference on Defects - Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors DRIP XII (Berlin, Germany, Berlin); 13th International Conference on II-VI Compounds (Korea, 2007); III Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Одеса, 2007); ІІІ Міжнародна науковопрактична конференція "Матеріали електронної техніки та сучасні інформаційні технології» (Кременчук, 2008); 3-я Міжнародна науково-технічна конференція "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології" СЕМСТ-3 (Одеса, 2008); International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications (Edmonton, Canada, 2008); Міжнародна школа-конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників" (Дрогобич, 2005, 2008, 2013); XII Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок і наноструктур МКФТТПН-ХІІ (Івано-Франківськ, 2009); International conference "Nanoelectronic devices for defence & security" NANO-DDS (Fort Lauderdale, USA, 2009); IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Запоріжжя, 2009); International conference on defects in semiconductors (St. Petersburg, 2009; Nelson, New-Zealand, 2011); 14th International Conference on II-VI Compounds. (St. Petersburg, 2009); European Materials Research Society (E-MRS) 2009 Fall Meeting (Warsaw, 2009); International Conference on Defects - Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors DRIP XIII (Wheeling, USA, 2009); VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Чернівці, 2013); 9th International Conference on Nitride Semiconductors ICNS-9 (Glasgow, Scotland, 2011); International conference "Nanoelectronic devices for defence & security" NANO-DDS (New York, USA, 2011); International Conference on Defects -Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors DRIP XIV (Miyazaki, Japan, 2011);7th International Workshop on Zinc Oxide and Related Materials IWZnO (Nice, France, 2012); E-MRS Fall meeting. Symposium K: ZnO, Material Science from Researches to Electronic Applications (Warsaw, Poland, 2013); XV Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок і наноструктур МКФТТПН-ХV (Івано-Франківськ, 2015); 17th International Conference on II-VI Compounds and Related Materials (Paris, France, 2015).

Публікації. Основні результати дисертації опубліковано у 82 наукових працях: 35 статтях у провідних фахових журналах та збірниках (з них 16 статей, включених у науковометричні бази даних Scopus та Web of Science, 3 статті в закордонних фахових виданнях, 14 статей у фахових видання України, 2 статті у наукових збірниках) та 47 тезах доповідей на міжнародних конференціях.

<u>Структура й обсяг дисертації.</u> Дисертація складається зі вступу, п'ятьох розділів, висновків, переліку літературних посилань і додатка. Повний об'єм дисертації – 371 сторінка, з них 304 сторінки основного тексту, вона містить 94 рисунки та 22 таблиці; список використаних джерел охоплює 331 найменування.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

У <u>вступі</u> обґрунтовано актуальність теми досліджень, визначено мету та поставлено завдання дослідження, відображено новизну та практичне значення одержаних результатів.

У <u>першому розділі</u> на підставі аналізу літературних даних наведено сучасні уявлення про явища перенесення в твердих розчинах сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V.

Описано процеси розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної гратки: розсіяння на іонізованих та нейтральних домішках; розсіяння на потенціалі статичної деформації; розсіяння на акустичних фононах, розсіяння на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля; розсіяння на полярних оптичних та неполярних оптичних фононах. Зазначено, що розглянуті моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної гратки мають такі недоліки:

1) вони є далекодіючі, тобто, припускається, що носій взаємодіє з достатньо віддаленими областями кристала (випадок розсіяння на іонізованій домішці або розсіяння на потенціалі статичної деформації) або носій взаємодіє з усім кристалом (випадок розсіяння на різного типу фононах). Однак, таке припущення суперечить принципу близькодії, який надійно підтверджений експериментально і згідно з яким носій заряду взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу;

2) У межах дії потенціалу $U \approx 1/r^n$ (n=1,2) (розсіяння на іонізованій домішці та потенціалі статичної деформації) на відстанях ~10 a_0 від дефекту потенціальна енергія зменшується на порядок, тобто, стає величиною другого порядку мализни порівняно з періодичним полем кристала. Однак, розглянуті моделі є правильні в першому наближенні теорії збурень. Тобто, розглянуті моделі містять і математичну суперечність.

3) У цих моделях використано макроскопічний параметр – діелектрична проникність – який не має сенсу в мікроскопічних процесах. Застосування цього параметру в описаних вище моделях розсіяння є суперечливим: розглянуті моделі є мікроскопічні, тому вони повинні описувати макроскопічні властивості кристала, з іншого боку, у цих моделях з самого початку вводять макроскопічний параметр, а потім описують мікроскопічні і, відповідно, макроскопічні процеси.

Виконано опис двох основних наближених методів розв'язування стаціонарного рівняння Больцмана - наближення часу релаксації та варіаційного методу. Відзначено, що ці методи розв'язування мають спільний недолік – у цих методах використовують лінеаризоване, тобто, наближене кінетичне рівняння Больцмана, отримане на основі припущення малого відхилення функції розподілу від рівноважного значення. Однак, невідомо, наскільки таке припущення є правильним, наскільки реальна функція розподілу відрізняється від функції, розрахованої на основі цих методів.

<u>Другий розділ</u> присвячений розробці близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної гратки.

Потенціальну енергію взаємодії носія заряду з полем іонізованої домішки вибирали у вигляді:

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_i e^2}{r} , \qquad (1)$$

де враховано, що діелектрична проникність $\kappa = 1$.

З огляду на принцип близькодії припускаємо, що величина r змінюється в межах від 0 до a_0 , тобто, $r = \gamma_{IJ} a_0$, де γ_{IJ} ($0 < \gamma_{IJ} \leq 1$) –підгінний параметр, який вибирають так, щоб узгодити теорію та експеримент. У ході розрахунку матричного елемента переходу носія заряду зі стану k в стан k' під дією потенціальної енергії U(r) приймали, що хвильова функція носія заряду має вигляд плоскої хвилі, нормованої на одиницю об'єму (наближення ефективної маси). У підсумку вираз для ймовірності переходу носія зі стану k в стан k' завдяки розсіянню на іонізованій домішці набуває вигляду:

$$W_{III}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') == \frac{\pi Z_i^2 e^4 a_0^4 \gamma_{III}^4}{2\varepsilon_0^2 \hbar} \frac{N_i}{V} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) , \qquad (2)$$

де N_i - концентрація іонізованих домішок.

В описі процесу розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі нейтральної домішки використовують модель Ерджинсоя, згідно з якою час релаксації (випадок пружного розсіяння) визначають з виразу:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{20 N_{H\!\Pi} 4\pi\varepsilon_0 \hbar^3}{m^{*2} e^2} , \qquad (3)$$

З виразу, що зв'язує час релаксації та ймовірність переходу

$$\frac{l}{\tau} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int W(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') (1 - \cos\theta) d\boldsymbol{k}' , \qquad (4)$$

де θ –кут між векторами k та k', випливає вираз для ймовірності переходу в разі розсіяння носія заряду на нейтральній домішці:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{20 \pi^2 a_B N_{H\!\mathcal{I}} \hbar^3}{V m^{*2} k'} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) , \qquad (5)$$

де $k' = k'(\varepsilon')$ - хвильовий вектор носія заряду.

Надалі робимо таке припущення щодо радіуса дії поля нейтральної домішки: припустимо, що радіус дії поля нейтральної домішки дорівнює наближено половині сталої гратки. Таке припущення можна обґрунтувати тим, що поле нейтральної домішки має менший радіус дії, ніж поле іонізованої домішки, для якої прийнято, що верхня межа радіуса дії дорівнює сталій гратки. У моделі Ерджинсоя радіус дії поля нейтральної домішки дорівнював радіусу Бора a_B (випадок розсіяння на нейтральному атомі водню). Для розглянутих в цій дисертаційній роботі сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ половина сталої гратки становить ~ 3 A, що дорівнює наближено $5a_B$. Отже, зробивши заміну $a_B \rightarrow 5a_B$ в (5), отримаємо вираз для ймовірності переходу в разі розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі нейтральної домішки:

$$W_{H\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{100 \,\pi^2 a_B \,N_{H\mathcal{I}} \,\hbar^3}{V \,m^{*2} k'} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \,. \tag{6}$$

Електричний потенціал статичної деформації подібний до потенціалу точкового диполя і має такий вигляд:

$$\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = \frac{9 \, e_{14} \, b_0^3}{\kappa \, \varepsilon_0} \frac{x \, y \, z}{r^5},\tag{7}$$

де e_{14} – компонента п'єзоелектричного тензора; b_0 – величина, яка має розмірність довжини і пов'язана з розміром дефекту.

Далі зроблено такі припущення:

1) на підставі принципу близькодії, приймаємо, що величина b_0 , яка пов'язана з розміром дефекту, дорівнює сталій гратки, тобто поле дефекту статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки; 2) приймаємо, що діелектрична проникність кристала κ рівна одиниці; 3) приймаємо, що потенціал дефекту статичної деформації не залежить від напрямку в просторі, а залежить лише від відстані до центра дефекту, тобто є сферично-симетричним.

З урахуванням цих припущень близькодіюча потенціальна енергія дефекту статичної деформації визначається з виразу:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{9 e e_{14} a_0^3}{\varepsilon_0} \frac{1}{r^2} .$$
 (8)

У ході розрахунку матричного елемента переходу носія заряду зі стану k в стан k' під дією потенціальної енергії (8) приймали, що хвильова функція носія заряду має вигляд плоскої хвилі, нормованої на одиницю об'єму (наближення ефективної маси). У підсумку вираз для ймовірності переходу носія зі стану k в стан k' завдяки розсіянню на дефекті статичної деформації набуває вигляду:

$$W_{C\mathcal{A}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2^{5} 3^{4} \pi^{3} C^{2} e^{2} e_{14}^{2} a_{0}^{6} N_{C\mathcal{A}}}{V \varepsilon_{0}^{2} \hbar} \frac{1}{q^{2}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \qquad (9)$$

де $C \approx 0.1$; $N_{C\!\!\mathcal{I}}$ – концентрація центрів статичної деформації; $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k'}|$.

Потенціальну енергію взаємодії носія заряду з акустичним фононом вибирали у вигляді:

$$\widehat{H}' = -\mathbf{Q}' \cdot \nabla V_0 + S_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} = \widehat{H}'_1 + \widehat{H}'_2 \quad (\alpha, \beta = x, y, z) , \qquad (10)$$

де V_0 - періодичне поле недеформованого кристала; $\mathbf{Q}' = \frac{1}{2}(\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2)$; \mathbf{Q}_1 , \mathbf{Q}_2 зміщення атомів елементарної комірки, які визначають з виразу $\mathbf{Q}_1 = \mathbf{Q}_2 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},j} \left[\frac{\hbar}{2M\omega_j(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \xi(\mathbf{q},j) \left[b_j(\mathbf{q}) exp(i \mathbf{q} \mathbf{a}_n) + b_j^*(\mathbf{q}) exp(-i \mathbf{q} \mathbf{a}_n) \right];$

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial Q_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right] - \text{макроскопічний тензор деформації;} \quad V_{\alpha\beta} = V_{\beta\alpha} - V_{\beta\alpha}$$

симетрична частина коефіцієнта при першій похідній у розкладі в ряд \hat{H}' за $Q_i (i = 1, 2); M = x M_{AI} + (1 - x) M_{A2} + M_B$ – маса елементарної комірки твердого розчину $A1_x A2_{1-x} B$ (A1, A2 – елементи другої групи; B– елемент шостої групи); $b_j(q)$ і $b_j^*(q)$ – оператори анігіляції та народження фононів j - ї гілки коливань з хвильовим вектором q; $a_n = i (n_2 + n_3) a_0/2 + j (n_1 + n_3) a_0/2 + k (n_1 + n_2) a_0/2$, $(n_1, n_2, n_3 = 1, 2...)$, i, j, k – одиничні вектори вздовж головних осей кристала зі структурою цинкової обманки.

Вектори зміщення атомів є функціями від дискретних змінних $Q = Q(n_1, n_2, n_3) = Q_1 = Q_2$. Тому для визначення компонент $S_{\alpha\beta}$ означимо частинну похідну компоненти вектора Q за координатою x таким виразом:

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x} \rightarrow \frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3}) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2}+1,n_{3}) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x}.$$
(11)

Аналогічні співвідношення записуємо для частинних похідних $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial y}$ та $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial z}$ (і відповідних циклічних перестановок) з $\Delta x = \Delta y = \Delta z = a_0/2$.

Для розрахунку матричного елемента переходу носія заряду зі стану k в стан k' використовували хвильову функцію носія заряду у вигляді добутку функції Блоха, вираженої через функції Лютінгера-Кона, та хвильової функції системи незалежних гармонічних осциляторів. З урахуванням принципу близькодії інтегрування за координатами носія заряду виконували в межах елементарної комірки. У цьому разі частину матричного елемента, яка залежить від координат носія, виражали через ефективний потенціал деформації E_{AK} , відповідно, для електронів та важких дірок. У підсумку вираз для ймовірності переходу носія зі стану k в стан k' завдяки розсіянню на акустичному фононі набуває вигляду:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{AK} = \frac{\pi^3 k_B T E_{AK}^2}{144 N M \hbar} \left(\frac{1}{v_{LA}} + \frac{2}{v_{TA}}\right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \qquad (12)$$

де враховано переходи з переворотом спіну і пружний характер розсіяння носія на акустичному фононі; v_{LA} , v_{TA} –поздовжня та поперечна швидкості звуку.

Потенціальну енергію взаємодії носія заряду з неполярним оптичним фононом вибирали у вигляді:

$$H'_{H\Pi O} = \boldsymbol{Q} \cdot \boldsymbol{W}^{0}(\boldsymbol{r}) \quad , \tag{13}$$

де $W^0(\mathbf{r})$ – оптичний деформаційний потенціал, який є періодичною функцією з періодом, що дорівнює періоду кристалічної гратки; $Q = Q_1 - Q_2$, $Q_s(s = 1, 2)$ – зміщення атомів елементарної комірки, а вектор Q визначається з виразу:

$$\boldsymbol{Q} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q},j) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right]. \quad (14)$$

Матричний елемент переходу носія заряду зі стану k в стан k' визначали на основі хвильової функції носія заряду у вигляді добутку функції Блоха, вираженої через функції Лютінгера-Кона, та хвильової функції системи незалежних гармонічних осциляторів. На підставі принципу близькодії інтегрування за координатами носія заряду проводили в межах елементарної комірки. Частину матричного елемента, яка залежить від координат носія, виражали через ефективний оптичний потенціал деформації $E_{H\PiO}$, відповідно, для електронів та важких дірок. У підсумку, вираз для ймовірності переходу носія зі стану k в стан k' завдяки розсіянню на неполярному оптичному фононі набуває вигляду:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{H\Pi O} = \frac{\pi^{3} E_{H\Pi O}^{2}}{288 a_{0}^{2} N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right] \right\}$$

$$\times \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right]$$

$$(15)$$

де враховано переходи з переворотом спіну, а також непружний характер розсіяння.

Оптичні коливання кристалічної гратки напівпровідникових сполук А^{II}В^{VI} супроводжуються коливаннями дипольного моменту елементарної комірки. Зміну дипольного моменту елементарної комірки, що містить два атоми, визначають з виразу:

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{e} \left(\boldsymbol{Q}_1 - \boldsymbol{Q}_2 \right) = \boldsymbol{e} \, \boldsymbol{Q} \,. \tag{16}$$

З урахуванням співвідношення (14), зміна вектора поляризації елементарної комірки визначена виразом:

$$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{d}}{\Omega} = \frac{4 e}{a_0^{3}} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q}, j) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_n) + b_j^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_n) \right], \quad (17)$$

який є функцією дискретних змінних $n_1, n_2, n_3 = 1, 2...$. Наявність поляризації $P(n_1, n_2, n_3)$ означає, що в кристалічній гратці існує зв'язаний заряд з об'ємною густиною $\rho = - \operatorname{div} P(n_1, n_2, n_3)$. Для визначення густини означимо частинну похідну компоненти вектора P за координатою x таким виразом:

$$\frac{\partial P_x}{\partial x} \rightarrow \frac{P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} .$$
(18)

Аналогічні співвідношення запишемо для частинних похідних $\frac{\partial P_y}{\partial v}$ та $\frac{\partial P_z}{\partial z}$ з $\Delta x = \Delta y = \Delta z = a_0 / 2$.

Зв'язаний заряд створює електричне поле, потенціал якого φ визначаємо з рівняння Пуассона:

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = \frac{8ie}{a_0^3 \varepsilon_0} \sum_{\mathbf{q}_j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\mathbf{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} q \left[b_j(\mathbf{q}) \exp(i \mathbf{q} \mathbf{a}_n) - b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i \mathbf{q} \mathbf{a}_n) \right].$$
(19)

Для розв'язування цього рівняння зробимо такі спрощення: 1) замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{\Pi O} a_0$ ($\gamma_{\Pi O}$ – підгінний параметр, який підбирають так, щоб узгодити теорію та експеримент); 2) значення цього радіуса змінюється в межах від нуля до половини більшої діагоналі елементарної комірки $0 < \gamma_{\Pi O} \le \sqrt{3}/2$. Сферично-симетричний розв'язок рівняння Пуассона має вигляд:

$$\varphi(r) = \frac{\rho}{2\varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right). \tag{20}$$

Під час обчислення матричного елемента переходу носія заряду зі стану k в стан k' інтегрування за координатами носія проводили в межах сфери радіуса *R*. Хвильову функцію носія заряду вибирали у вигляді добутку плоскої хвилі та хвильової функції системи незалежних гармонічних осциляторів. В підсумку вираз для ймовірності переходу носія зі стану k в стан k' завдяки розсіянню на полярному оптичному фононі набуває вигляду:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{\Pi O} = \frac{64 \pi' \gamma_{\Pi O} e^4}{225 \varepsilon_0^2 a_0^4 N} \frac{M}{M_x M_B} \bigg\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \big[N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \big] + \frac{2}{\omega_{TO}} \big[N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \big] \bigg\},$$
(21)

де враховано непружний характер розсіяння. У кристалах А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V з частково іонним зв'язком у разі поширення коливань, окрім деформаційного потенціалу, може виникати додатковий потенціал електричної природи – п'єзоелектричний потенціал, що спричиняє розсіяння носіїв заряду. В ідеальному діелектрику (гратка без вільних носіїв заряду) індукція електричного поля дорівнює нулю. Тоді, беручи до уваги те, що в близькодіючих мікроскопічних моделях розсіяння діелектрична проникність кристалу $\kappa = 1$, отримаємо :

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \, \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \, \boldsymbol{E} + \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{0} \ . \tag{22}$$

де *е* – п'єзоелектричний тензор третього порядку; *S* – макроскопічний тензор деформації.

У кубічних кристалах існує тільки одна компонента п'єзоелектричного тензора: $e_{123} = e_{132} = e_{213} = e_{231} = e_{312} = e_{321} = e_{14}$, решта компонент дорівнює нулю. Тоді для компонент вектора поляризації $P_i = e_{ikl} S_{kl}$ (*i*, *k*, *l* = 1, 2, 3) можна отримати:

$$P_{k} = 2ie_{14} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \varepsilon_{klm} \left[\xi_{l}(\boldsymbol{q},j) + \xi_{m}(\boldsymbol{q},j) \right] \times \\ \times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right],$$
(23)

де ε_{klm} – символи Леві-Чевіта.

Потенціал взаємодії визначено з рівняння Пуассона $\Delta \varphi = \frac{div P}{\varepsilon_0}$, де компоненти

вектора поляризації $P(n_1, n_2, n_3)$ є функціями дискретних змінних $n_1; n_2; n_3$ і не залежать від координат носія. Для обчислення дивергенції вектора поляризації використано співвідношення (18) та аналогічні співвідношення для частинних похідних $\frac{\partial P_y}{\partial y}$ і $\frac{\partial P_z}{\partial z}$ з $\Delta x = \Delta y = \Delta z = a_0/2$. Для розв'язування рівняння Пуассона

зробимо такі спрощення: 1) замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{\Pi E} a_0 (\gamma_{\Pi E} - підгінний параметр, який підбирають так, щоб узгодити теорію та експеримент); 2) значення цього радіуса змінюється в межах від нуля до половини більшої діагоналі елементарної комірки <math>0 < \gamma_{\Pi E} \le \sqrt{3}/2$. Тоді сферично-симетричний розв'язок рівняння Пуассона визначаємо з виразу (20).

Під час обчислення матричного елемента переходу носія заряду зі стану k в стан k' інтегрування за координатами носія проводили в межах сфери радіуса R. Хвильову функцію носія заряду вибирали у вигляді добутку плоскої хвилі та хвильової функції системи незалежних гармонічних осциляторів. У підсумку, вираз для матричного елемента переходу носія зі стану k в стан k' набуває вигляду:

$$\langle x_{q}', \mathbf{k}' | \hat{H}_{\Pi E}' | x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{64\pi \, e_{14} e \, a_{0}^{5} \gamma_{\Pi E}^{5}}{15 \, \varepsilon_{0} \, V} \sum_{q \, j} \left[\frac{\hbar}{2NM \omega_{j}(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_{I}(q, j) + \xi_{2}(q, j) + \xi_{3}(q, j) \right] \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right)^{2} \times \begin{cases} \sqrt{N_{q \, j}} \, exp(i \, q \, a_{n}) \\ \sqrt{N_{q \, j} + 1} \, exp(-i \, q \, a_{n}) \end{cases} .$$
(24)

Подальший розрахунок цього матричного елемента виконуємо окремо для акустичної та оптичної гілок коливань кристалічної гратки.

У ході розрахунку матричного елемента (24) для акустичної гілки коливань кристалічної гратки беремо до уваги практично пружний характер розсіяння носія

заряду, а також вираз $N_q + l \approx N_q \approx \frac{k_B T}{\hbar \omega(q)} = \frac{k_B T}{\hbar v_0 q}$. Тоді матричний елемент для однієї поздовжньої (LA) та двох поперечних (TA) коливальних мод набуде вигляду:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{\Pi E}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{64\pi e_{14} e a_{0}^{5} \gamma_{\Pi E}^{5}}{15 \varepsilon_{0} V} \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\frac{k_{B} T}{2NM} \right]^{1/2} q \left(\frac{1}{v_{LA}} + \frac{2}{v_{TA}} \right) \times \begin{cases} exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \\ exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \end{cases}$$
(24)

Звідси ймовірність переходу носія заряду під час взаємодії з акустичними коливаннями п'єзоелектричного поля визначається з виразу:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{\Pi AK} = \frac{128\pi^7 e_{14}^2 e^2 a_0^2 \gamma_{\Pi E}^{\ \ 10} k_B T}{225 \varepsilon_0^2 \hbar N M} \left(\frac{1}{v_{LA}} + \frac{2}{v_{TA}}\right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon).$$
(25)

У разі розрахунку матричного елемента (24) для оптичної гілки коливань кристалічної гратки необхідно розраховувати компоненти макроскопічного тензора деформації на основі вектора зміщення атомів елементарної комірки $Q = Q_1 - Q_2$. У цьому випадку робимо заміну:

$$\xi(\boldsymbol{q}, j) \to \frac{M}{\sqrt{M_x M_B}} \xi(\boldsymbol{q}, j) .$$
⁽²⁶⁾

Тоді отримаємо:

$$\langle x_{q}', \mathbf{k}' | \hat{H}_{\Pi O \Pi}' | x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{64\pi \, e_{14} e \, a_{0}^{5} \gamma_{\Pi E}^{5}}{15 \, \varepsilon_{0} \, V} \sum_{q \, j} \left[\frac{\hbar \, M}{2NM_{x} M_{B} \omega_{j}(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_{I}(q, j) + \xi_{2}(q, j) + \xi_{3}(q, j) \right] \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right)^{2} \times \left\{ \frac{\sqrt{N_{q \, j}} \, exp(i \, q \, a_{n})}{\sqrt{N_{q \, j} + 1} \, exp(-i \, q \, a_{n})} \right.$$

$$(27)$$

Звідси ймовірність переходу носія заряду під час взаємодії з оптичними коливаннями п'єзоелектричного поля визначаємо з виразу:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{\Pi O \Pi} \frac{32^2 \pi^9 \gamma_{\Pi E}^{10} e^2 e_{14}^2}{75^2 \varepsilon_0^2 N} \frac{M}{M_x M_B} \bigg\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \big[N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \delta \omega_{LO}) \big] + \frac{2}{\omega_{TO}} \big[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \delta \omega_{TO}) \big] \bigg\}.$$
(28)

У <u>третьому розділі</u> наведено метод розв'язування стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії у випадку довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.

Розглядаємо стаціонарне рівняння Больцмана для однорідного напівпровідника, що перебуває в ізотермічних умовах, коли магнітне поле напрямлене вздовж осі "Z" $B = \{0, 0, B\}$, а електричне поле має компоненти $E = \{E_1, E_2, 0\}$:

$$\boldsymbol{v}_{a} \frac{\partial f_{a}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{e}_{a}\boldsymbol{E} + \boldsymbol{e}_{a}\left[\boldsymbol{v}_{a} \times \boldsymbol{B}\right]}{\hbar} \frac{\partial f_{a}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \int \{W_{a}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) f_{a}(\boldsymbol{k}') \times \left[1 - f_{a}(\boldsymbol{k})\right] - W_{a}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{a}(\boldsymbol{k}) \left[1 - f_{a}(\boldsymbol{k}')\right] \} d\boldsymbol{k}' , \qquad (29)$$

де a = 1, 2 відповідно для електронів та важких дірок; e_a – заряд носія; $v_a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k}$ – швидкість носія заряду ; $f_a(k)$ – функція розподілу;

Шукаємо розв'язок рівняння (3.1) у вигляді:

$$f_{a}(\boldsymbol{k}) = f_{0a}(\boldsymbol{k}) - \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon); \ a = 1, 2 \ , \tag{30}$$

де $f_{0a}(\mathbf{k})$ – рівноважна функція Фермі-Дірака, відповідно, для електронів та важких дірок; $\Phi_a(\varepsilon)$ – невідомі функції.

Підставимо (30) у (29), отримаємо:

$$e_{a}\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{a}\,\frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon} - \frac{e_{a}}{\hbar}\,[\boldsymbol{v}_{a}\times\boldsymbol{B}]\frac{\partial\,f_{0\,a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}} - \frac{e_{a}}{\hbar}\,\frac{\partial f_{0\,a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\,\frac{\partial\,\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}}\boldsymbol{E} - \\ -e_{a}\,\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{a}\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0\,a}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}} = \\ = \pm\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{a}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{0\,a}(\boldsymbol{k})[1-f_{0\,a}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)]\}d\,\boldsymbol{k}' + \\ +\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}^{2}T^{2}}\int\{W_{a}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{0a}(\boldsymbol{k})[1-f_{0a}(\boldsymbol{k}')]\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon')[f_{0a}(\boldsymbol{k}')-f_{0\,a}(\boldsymbol{k})]\}d\boldsymbol{k}'\,, \end{cases}$$
(31)

де верхній знак перед першим інтегралом у правій частині рівняння стосується електронів, а нижній – важких дірок.

Зазначимо, що рівняння (31) відрізняється від відомого рівняння Блоха, яке отриманого лінеаризацією стаціонарного рівняння Больцмана, наявністю двох останніх доданків у лівій частині рівнянь та другого доданка в правій частині рівнянь, якого нема у випадку пружного розсіяння носіїв.

Шукатимемо невідомі функції $\Phi_a(\varepsilon)$ у вигляді:

$$\Phi_a(\varepsilon) = \sum_{n,\alpha} C_{na}^{\alpha} \hbar k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n \quad , \tag{32}$$

де C_{na}^{α} – невідомі коефіцієнти; n = 0, 1, 2, 3..., a = 1, 2, відповідно, для електронів і важких дірок; $\alpha = 1, 2, 3$; $k_{\alpha}(\varepsilon)$ – компонента хвильового вектора.

ПІдставимо (32) в стаціонарне рівняння Больцмана (31), помножимо це рівняння на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо обидві його частини за хвильовим вектором. У підсумку отримаємо:

$$\begin{cases} C_{n1}^{1} \left(K_{111}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{111}^{mni} \right) + C_{n1}^{2} M_{121}^{mn} = B_{11}^{m} \\ C_{n1}^{2} \left(K_{221}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{221}^{mni} \right) + C_{n1}^{1} M_{211}^{mn} = B_{21}^{m} \\ C_{n1}^{3} \left(K_{331}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{331}^{mni} \right) = 0 \\ C_{n2}^{3} \left(K_{332}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{332}^{mni} \right) = 0 \\ C_{n2}^{2} \left(K_{222}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{222}^{mni} \right) + C_{n2}^{1} M_{212}^{nm} = B_{22}^{m} \\ C_{n2}^{1} \left(K_{112}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{122}^{mni} \right) + C_{n2}^{2} M_{121}^{nm} = B_{12}^{m} \end{cases}$$

$$(33)$$

де за індексами, що двічі повторюються, виконується підсумовування і введено такі позначення:

$$B_{\beta a}^{m} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{4}{3} \pi e_{a} \left(E_{I} \,\delta_{I\beta} + E_{2} \,\delta_{2\beta} \right) \int \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} k(\varepsilon)^{3} \varepsilon^{m} d\varepsilon ;$$

$$M_{\beta \alpha a}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{4}{3} \pi e_{a} B \left[\delta_{\alpha I} \delta_{\beta 2} - \delta_{\alpha 2} \delta_{\beta I} \right] \int \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} k(\varepsilon)^{3} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon ;$$

$$K_{\beta \alpha a}^{nm} = - \left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \right]^{2} \frac{4}{3} \frac{\pi \hbar^{2}}{k_{B}T} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0a}(\varepsilon) \left[I - f_{0a}(\varepsilon + \Delta) \right] \varepsilon^{n+m} k(\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} \times W''(\varepsilon) k(\varepsilon)^{4} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon ;$$

$$W''(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' ; \quad W'(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') k_{\alpha}'(\varepsilon) \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' ;$$

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) ;$$

$$L_{\alpha \beta a}^{mni} = \left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \right]^{2} \frac{4}{3} \frac{\pi \hbar^{3}}{k_{B}^{2}T^{2}} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0a}(\varepsilon) \left[I - f_{0a}(\varepsilon + \Delta) \right] \left[f_{0a}(\varepsilon + \Delta) - f_{0a}(\varepsilon) \right] \varepsilon^{n+m} \times (\varepsilon + \Delta)^{i} k(\varepsilon + \Delta)^{3} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W_{1}'''(\varepsilon) k(\varepsilon)^{4} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon ;$$

$$W_{1}'''(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cos \theta \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' ;$$

W'(k,k') – деяка функція від k та k'; Δ - деяка енергія, яка дорівнює нулю в разі пружного механізму розсіяння.

Отже, система алгебраїчних рівнянь (33) розпадається на два незалежних блоки рівнянь – для електронів (1-е, 2-е та 3-е рівняння системи) і важких дірок (4-е, 5-е та 6-е рівняння системи). Кожний з цих блоків, відповідно, розпадається на систему нелінійних рівнянь другого порядку відносно величин C_{n1}^3 та C_{n2}^3 (3-є та 4е рівняння системи), та на систему лінійних рівнянь (при заданих C_{n1}^3 та C_{n2}^3) відносно величин C_{n1}^1 , C_{n1}^2 та C_{n2}^1 , C_{n2}^2 (1-е та 2-е і 5-е та 6-е рівняння системи відповідно). Зазначимо також, що з одного боку величини $B_{\beta a}^m$ є лінійними функціями компонентів вектора напруженості електричного поля E_1 та E_2 , а з іншого, – вільними членами систем лінійних рівнянь для величин C_{na}^{α} . Тому самі величини C_{na}^{α} будуть лінійними функціями від величин $B_{\beta a}^{m}$, а отже, і від компонентів вектора напруженості електричного поля E_1 та E_2 . Також величини $M_{\beta\alpha a}^{nm}$ є прямо пропорційні до індукції магнітного поля **В**.

Систему рівнянь, що входять у незалежний блок, можна розв'язати в два етапи: 1) для заданого значення m = 0,1,2... знаходимо C_{n1}^3 або C_{n2}^3 (n=0,1,2...) з 3-го та 4-го рівнянь системи, які становлять систему нелінійних алгебричних рівнянь; 2) знаходимо C_{n1}^1 , C_{n1}^2 або C_{n2}^1 , C_{n2}^2 (n=0,1,2...) відповідно з 1-го,2-го та 5-го,6-го рівнянь системи, які становлять дві незалежні системи лінійних рівнянь.

Розглянемо розв'язок рівнянь, що входять у незалежний блок для електронів. Система нелінійних рівнянь для величин C_{n1}^3 (3-е рівняння системи (33)) має такі типи розв'язку:

a)
$$C_{n1}^3 = 0; b) C_{n1}^3 \neq 0$$
 . (34)

Тому виникає необхідність вибору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків системи. Для формулювання критерію вибору обчислимо попередньо компоненти вектора густини струму:

$$J_{\alpha} = -\frac{1}{4\pi^{3}} \int \left(\frac{\partial f_{0l}}{\partial \varepsilon}\right) e_{l} v_{l\alpha} \Phi_{l}(\varepsilon) d\mathbf{k} = -\frac{1}{3\pi^{2}} e_{l} C_{nl}^{\alpha} \int \left(\frac{\partial f_{0l}}{\partial \varepsilon}\right) k(\varepsilon)^{3} \varepsilon^{n} d\varepsilon \quad (35)$$

Сформулюємо такий критерій вибору : $J_z = 0$. Цьому критерію задовольняє розв'язок типу а.

Розглянемо випадок *b*. Перепишемо 3-є рівняння системи (33) у такому вигляді:

де введено позначення $a_{mn} = K_{33}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{331}^{mn}$.

Оскільки $C_{n1}^3 \neq 0$, то детермінант від коефіцієнтів системи лінійних рівнянь дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0n} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n0} & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = 0 , \qquad (37)$$

або

$$\begin{vmatrix} K_{33}^{00} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{00i} & K_{331}^{01} + C_{i1}^{3} L_{331}^{01i} & \dots & K_{331}^{0n} + C_{i1}^{3} L_{331}^{0ni} \\ K_{331}^{10} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{10i} & K_{331}^{11} + C_{i1}^{3} L_{331}^{11i} & \dots & K_{3311}^{1n} + C_{i1}^{3} L_{3311}^{1ni} \\ \dots & \dots \\ K_{331}^{n0} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{n0i} & K_{3311}^{n1} + C_{i1}^{3} L_{3311}^{n1i} & \dots & K_{3311}^{nn} + C_{i1}^{3} L_{3311}^{nni} \end{vmatrix} = 0.$$
(38)

З іншого боку, враховуючи властивості симетрії індексів величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$ та $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, бачимо, що коефіцієнти системи нелінійних рівнянь збігаються з коефіцієнтами при C_{n1}^{l} у першому рівнянні системи (33) і з коефіцієнтами при C_{n1}^{2} у другому рівнянні системи (33). Якщо припустити, що є випадок $\mathbf{B} = 0$ (відповідно, $M_{12}^{mn} = 0$), то отримаємо систему лінійних рівнянь

$$C_{n1}^{l}\left(K_{111}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{111}^{mni}\right) = B_{11}^{m}, \qquad (39)$$

детермінант якої дорівнює нулю. У цьому випадку система (39) має нескінченно багато довільних розв'язків, що є фізично беззмістовним, тому розв'язки типу *b* потрібно відкинути.

Аналогічні міркування є правильні і для випадку важких дірок – необхідно вибрати розв'язки, що задовольняють умову $C_{n,2}^3 = 0$.

Отже, знаходження нерівноважного доданка функції розподілу для будь-якого відхилення від рівноваги зводиться до розв'язування системи лінійних рівнянь для електронів та важких дірок.

Для відбору фізичних розв'язків серед розв'язків типу а необхідно визначити за заданого значення n = 0,1,2 ... компоненти тензора провідності й порівняти їх з експериментом. Для обчислення компонент тензора провідності скористаємося тим, що величини $C_{na}^{1}(a=1,2)$ є лінійними функціями E_{1} та E_{2} , тоді J_{α} ($\alpha=1,2$) теж лінійно залежатимуть від них, а коефіцієнти при величинах E_{1} та E_{2} дорівнюватимуть відповідним компонентам тензора провідності σ_{11} та σ_{12} для електронів і важких дірок.

У подальших розрахунках для обчислення величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$ приймали значення n = 5, яке давало для компонентів тензора провідності σ_{11} і σ_{12} для електронів та важких дірок значення, що відрізнялися від випадку n = 4 менше, ніж ~ 0.5 %.

В завершальній частині третього розділу наведено методику розрахунку величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$ для розглянутих у другому розділі механізмів розсіяння носіїв заряду, а також для так званого розсіяння невпорядкованості, зумовленого утворенням твердих розчинів сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$.

У <u>четвертому розділі</u> проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей рухливості електронів у сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, GaN, ZnO, CdS, InN, InSb.

Теоретичні температурні залежності рухливості електронів порівнювали з експериментальними даними для кристалів Cd_xHg_{1-x} Те зі складом x = 0; 0.08; 0.17;

0.26; 0.36; 0.52; 0.59; 1. Для x=0; 0.08; 0.17; 0.26 припускали модель одноразово іонізованої домішки, а рівень Фермі визначали з рівняння нейтральності: $n - p = N_{4.2}$, де $N_{4.2}$ -концентрація іонізованої домішки при 4.2 К. Для x=0.36; 0.52; 0.59 припускали модель одноразово іонізованої домішки, а рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності: $n = N_D^+ = 1/eR_{exp}$, де R_{exp} - експериментальне значення коефіцієнта Холла; N_D^+ - концентрація іонізованих донорів. Для x=1 рівень Фермі розраховували з рівняння нейтральності з урахуванням моделі структури дефектів, наведеної в літературі. Теоретичні залежності $\mu(T)$ показані на рис. 1. Суцільні лінії відображають криві, отримані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці 1 наведено отримані значення параметрів розсіяння γ . Як бачимо, теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис.1 точковими лініями позначено відповідні залежності. Бачимо, що



Рис.1. Температурна залежність рухливості електронів у Cd_xHg_{1-x}Te. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння, відповідно.

за низьких температур ($T < 50 \ K$) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації (СД). Розсіяння невпорядкованості (НП) та розсіяння на акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля (ПАК) теж відіграють значну роль у цьому інтервалі. За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фононах (ПО) стає переважним. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок.

Таблиця 1.

Параметр γ	🛛 для різних	механізмів	розсіяння	електронів у Cd _x Hg _{1-x} Te	
-------------------	--------------	------------	-----------	---	--

X	$\gamma_{\Pi O}$	$\gamma_{\Pi E}$	Υ _{ІД}	$\gamma_{ m CD} N_{ m CD} imes 10^{14}cm^{-3}$
0.08	0.50	0.40	1.0	2.4
0.52	0.66	0.47	1.0	2.0

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів у кристалах $Cd_xHg_{1-x}Se$ виконували з експериментальними даними, наведеними в літературі. Досліджували два типи зразків: а) зразки, отримані відпалюванням у парі селену або в динамічному вакуумі – x=0; 0.05; 0.1; 0.2; 0.268; 0.353; 0.547; б) –

зразки, отримані відпалюванням у парі ртуті -x=0; 0.05; 0.1; 0.2; 0.268;. Рівень Фермі розраховували з рівняння електронейтральності: $n - p = N_D^+ - N_A^-$, де $N_D^+; N_A^-$ - концентрації іонізованих донорів та акцепторів. Теоретичні залежності $\mu(T)$ показані на рис. 2а для зразка, відпаленого у парі селену або в динамічному вакуумі, та на рис.2б для зразків, відпаленого у парі ртуті. Суцільні лінії відображають криві, отримані на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці 2 наведено отримані значення параметрів розсіяння γ . Бачимо, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 2а,б точковими лініями позначено відповідні залежності. Як бачимо,



Рис. 2. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах Cd_xHg_{1-x}Se: *a* – відпал в парі селену або в динамічному вакуумі; *б* – відпал в парі ртуті. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння.

за низьких температур (T < 60 K) основними механізмами розсіяння для всіх типів розсіяння потенціалі статичної деформації та розсіяння зразків € на невпорядкованості (для x > 0). Однак, для зразка відпаленого у парі ртуті, що має високу концентрацію електронів, додатковим механізмом розсіяння в цьому інтервалі температур є розсіяння на іонізованих домішках, тоді як для зразка, відпаленого у парі селену або динамічному вакуумі, цей механізм відіграє незначну роль. За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння – розсіяння на акустичних фононах, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля, неполярних оптичних фононах – роблять нехтувано малий внесок.

Таблиця 2.

Зразок	X	γпо	γід	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
B5 *	0.1	0.56	0.26	0.32	7.5
26BB2	0.268	0.68	0.26	0.32	2.9

Параметр γ для різних механізмів розсіяння електронів в Cd_xHg_{1-x}Se

зразок, відпалений в парі ртуті.

Для кристала $Zn_xHg_{1-x}Te$ (x=0.15) теоретичні температурні залежності рухливості електронів порівнювали з експериментальними даними, наведеними в літературі. Рівень Фермі визначали з рівняння n = 1/e R, R – експериментальне значення коефіцієнта Холла, визначеного в [14^{*}].

Теоретична крива $\mu(T)$ для Zn_xHg_{1-x}Te (x=0.15) показана на рис. 3. Суцільна лінія відображає криву, розраховану на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці 3 наведено отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Бачимо, що теоретична крива достатньо добре узгоджується з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4 точковими лініями показано відповідні залежності. Як бачимо, що у всьому дослідженому інтервалі температур домінуючими механізмами є розсіяння на центрах



Рис. 3. Температурна залежність рухливості електронів у кристалі $Zn_xHg_{1-x}Te$ (x=0.15). Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння, відповідно.

Таблиця 3.

Параметр γ для різних механізмів розсіяння електронів в Zn_xHg_{1-x}Te

<u> </u>	-	-	-	
x	γпо	γц	$\gamma_{\Pi ext{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
0.15	0.70	1.0	0.55	70.0

статичної деформації, акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля та полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок. В інтервалі низьких температур спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це можна пояснити неповнотою СД- моделі розсіяння, де повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів виконували з експериментальними даними для кристалів $Zn_xHg_{1-x}Se$ з складом x = 0.02; 0.06; 0.15; 1.0. Для x=0.02 та x=0.15 рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності $n = N_{77}$, N_{77} - концентрація іонізованих домішок при 77 K. Для x = 0.06 рівень Фермі розраховували з рівняння $n - p = N_{4.2}$, $N_{4.2}$ – концентрація іонізованих домішок при 4.2 К. Для x = 1 рівень Фермі розраховували з рівняння $n = n_e$, де n_e - експериментальне значення концентрації електронів. Теоретичні криві $\mu(T)$ показано на рис. 4. Суцільні лінії відображають криві, розраховані на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. У

таблиці 4 наведено отримані значення параметрів розсіяння у для різних механізмів розсіяння. Бачимо, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 7 точковими лініями зазначено відповідні залежності. Як бачимо, за низьких температур ($T < 70 \, K$) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації та розсіяння невпорядкованості (для x > 0). За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фононах домінує. Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на акустичному та неполярному акустичних розсіяння оптичних оптичному фононах. на та коливаннях п'єзоелектричного поля, нейтральній та іонізованій домішці – роблять нехтувано



Рис. 4. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах Zn_xHg_{1-x}Se. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД, НД механізми розсіяння, відповідно.

малий внесок. У кристалах з високою концентрацією центрів статичної деформації простежується різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних за низьких температур. Це можна пояснити неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

Таблиця 4.

	F - · · ·	- F	F	$J \qquad X \qquad \partial I = X^{-1}$
X	γпо	γц	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
0.06	0.70	0.30	0.30	2.0
1.00	0.68	1.0	0.50	65.0

Параметр γ для різних механізмів розсіяння електронів у Zn_xHg_{1-x}Se

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів в GaN (вюртцит) виконували з експериментальними даними, наведеними в літературі. Рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності:

 $n + N_A = N_{D1}/(1 + 2\exp((F - E_{D1})/k_BT)) + N_{D2}/(1 + 2\exp((F - E_{D2})/k_BT))$, (40) де $N_{D1}, N_{D2}, N_A, E_{D1}, E_{D2}$ – концентрації донорів та акцепторів і енергії іонізації донорів відповідно. Для зразків з невідомою концентрацією домішок рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності n=1/e $R=N_D^+$, де R – експериментальне значення коефіцієнта Холла.

Теоретичні криві $\mu(T)$ для n-GaN зображені на рис.5. Суцільні лінії позначають криві, розраховані на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. У таблиці 5 наведено отримані значення параметрів розсіяння електронів у для різних механізмів розсіяння. Як бачимо, теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур крім зразка з максимальним рівнем домішки. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння штриховими лініями показано відповідні залежності. Для зразків A і E з низькою (~ 10^{16} см⁻³) та середньою (~ 10^{17} см⁻³) концентраціями домішок за низьких температур (T < 70 K) основним механізмом є розсіяння на потенціалі статичної деформації. Дещо меншим, проте не нехтувано малим є розсіяння на акустичних фононах, вплив якого підвищенням температури 3 зростає. За високих температур домінуючим механізмом розсіяння стає розсіяння на полярних оптичних фононах, однак розсіяння на акустичних фононах є теж суттєвим. В інтервалі низьких температур простежується різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це можна пояснити неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії. У зразку G з високою (~10¹⁸ см⁻³) концентрацією домішок у всьому розглянутому інтервалі температур основним механізмом розсіяння є розсіяння на центрах статичної деформації, концентрація яких є майже на два порядки вища порівняно зі зразками А та Е. Окрім того, суттєвим є вплив розсіяння на іонізованих



Рис. 5. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах GaN з різною концентрацією домішок.

Таблиця 5

Параметр *у* для різних механізмів розсіяння електронів в GaN

<u> </u>	-	-	-	
Зразок	γπο	γід	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
A	0.93	1.0	0.44	1.0

домішках, а за високих температур необхідно враховувати розсіяння на акустичних та полярних оптичних фононах. Розраховано температурну залежність фактора Холла для електронів.

Теоретичні температурні залежності рухливості електронів в ZnO порівнювали з експериментальними даними, наведеними в літературі. Рівень легування у зразках, які досліджували, складав ~ 10^{17} см⁻³. Усі ці зразки мали високе значення рухливості електронів (~ 2000 см² / (В с)), відповідно, можна було припустити, що

їхня дефектна структура є подібною. Тому для всіх зразків рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності (40) для широкозонного напівпровідника n- типу (власною провідністю нехтували) з донорами та компенсованими акцепторами, де концентрації донорів, акцепторів та енергії іонізації донорів брали з літературних даних. Теоретичні температурні залежності рухливості електронів показано на рис. 6. Для зразка В теоретичні криві розраховували в таких випадках: електричний струм перпендикулярний до осі " c_0 " та паралельний до осі " c_0 ". Отримані значення параметрів розсіяння електронів для різних механізмів наведені в таблиці 6. Як бачимо, теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментальними



Рис. 6. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах ZnO. a -зразок A; $\delta -$ зразок B.



Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в ZnO



Рис. 7. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електронів у кристалах ZnO. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД, НД механізми розсіяння, відповідно. *а* –зразок А; *б* – зразок В.

даними у всьому дослідженому інтервалі температур. Зазначимо, що теоретичні криві для зразка В демонструють гірше узгодження з експериментальними даними, оскільки розрахункові залежності $\mu_{//}(T)$ та $\mu_{\perp}(T)$ є взаємопов'язані: зміна підгінних параметрів призводить до одночасного зсуву цих кривих уверх або вниз. Для зразка А експериментальна залежність $\mu_{//}(T)$ невідома, тому в цьому випадку існує ліпша можливість узгодити теорію та експеримент. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 7 штриховими лініями показано відповідні залежності. Бачимо, що основним механізмом розсіяння за низьких температур ($T < 150 \ K$) є розсіяння на центрах статичної деформації. За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінує, проте, внесок розсіяння на оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля також суттєвий. Особливо сильно цей механізм розсіяння впливає у випадку, коли електричний струм напрямлений паралельно до осі " c_0 "). Як бачимо, в інтервалі $T > 150 \ K$ цей механізм розсіяння є одного порядку величини, що й ПО-розсіяння. Розраховано температурну залежність фактора Холла для електронів у ZnO.

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів у CdS проводили з експериментальними даними, наведеними в літературі. Рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності для широкозонного напівпровідника n-типу з донорами та компенсованими акцепторами:

$$n + N_A = N_D / [1 + 2 \exp((F - E_D) / k_B T)],$$
(41)

де N_D , N_A , E_D – концентрація донорів, акцепторів та енергія іонізації донорів, відповідно, значення яких вибирали згідно літературними даними.



Рис. 8. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі 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.

Таблиця 7

	-	-	-	-
Зразок	Υпо	Υїд	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} № _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
DM 83039-03-Y DM 82 I 54-26	0.62 0.64	1.0 1.0	0.50 0.46	1.85 1.05

Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів у CdS

Теоретичні температурні залежності рухливості електронів для CdS показані на рис. 8. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння штриховими лініями позначено відповідні залежності. Бачимо, за низьких температур (T<150K) основним механізмом розсіяння є розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації. За вищих температур (T>150K) домінуючим стає розсіяння на полярних оптичних, п'єзооптичних та акустичних фононах. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок. Розраховано температурну залежність фактора Холла для електронів.

Порівняння теоретичної температурної залежності рухливості електронів в InN виконували з експериментальними даними, наведеними в літературі. Концентрація домішок у дослідженому зразку нітриду індію становила ~ 1.1×10^{18} см⁻³. Рівень Фермі в кристалі InN визначали шляхом розв'язуванням рівняння нейтральності:

$$n + N_A = N_D \left[2 \exp((F - E_D)/k_B T) + 1 \right]^{-1} + N_{d0}, \qquad (42)$$

де N_D –концентрація донорів, N_A -концентрація акцепторів та E_D - енергія активації відповідно. Величина N_{d0} – це концентрація додаткових донорів, які утворюють домішкову зону, що формує спільну смугу енергій з зоною провідності, і яка забезпечує високу провідність за гелієвих температур. Можлива природа цих додаткових донорів у плівках нітриду індію пов'язана з надлишком азоту, який утворює антиструктурний дефект. На рис. 9 суцільна лінія відображає криву, розраховану на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 8 наведено отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Для оцінки внеску розсіяння на різних дефектах у загальну рухливість електрона в кристалі InN штриховими лініями зображено відповідні залежності. Як бачимо, у дослідженому проміжку температур домінує розсіяння на нейтральних домішках. За високих температур (T > 200 K) починає переважати АК- механізмів розсіяння і, дещо менше, розсіяння на полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння розсіяння на розсіяння на полярних оптичних фононах.



Рис.9. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі InN. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3, 4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД, НД механізми розсіяння, відповідно.

Таблиця	8
---------	---

Параметр γ для різних механізмів розсіяння електронів у InN

(n-p) ×10 ⁻¹⁷ см ⁻³	γпо	γpz	γц	γ _{СД} N _{CД} ?10 ⁻¹⁴ см ⁻³
5.3 - 7.4	0.38	0.27	0.22	2.35

ну рухливість електрона і можуть бути знехтувані. Розраховано температурну залежність фактора Холла для електронів.

Порівняння теоретичної температурної залежності рухливості електронів в InSb виконували з експериментальними даними, наведеними в літературі. Теоретичні криві, які відображали залежність рухливості електронів від температури показані на рис. 10. Суцільна лінія відображає криву, отриману з аналітичного розв'язку рівняння Больцмана. Параметри розсіяння електронів для різних механізмів розсіяння наведені в таблиці 9. Щоб оцінити внесок розсіяння на різних дефектах у загальну рухливість електрона штриховими лініями позначені відповідні залежності. Як бачимо, за температур до 100 К основний внесок у рухливість електрона визначений ПО-розсіяння. За температур понад 100 К внесок у рухливість електрона визначений ПО-розсіянням, яке домінує. У цьому інтервалі температур АК- розсіяння теж відіграє помітну роль.



Рис. 10. Внесок різних механізмів рухливість розсіяння електронів В V InSb. кристалі Суцільна крива загальний механізм розсіяння, 1,2,3,4,5,6,7 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, механізми розсіяння, ΠΟΠ, СД відповідно.

Таблиця 9

Параметр γ для різних механізмів розсіяння електронів в InSb

(n-p) ×10 ⁻¹⁴ см ⁻³	γпо	γ pz	γц	γ _{СД} <i>N</i> _{СД} ?10 ⁻¹⁴ см ⁻³
8.3	0.65	0.40	1.0	6.3

Решта механізмів розсіяння не роблять помітного внеску в рухливість.

У <u>п'ятому розділі</u> виконано порівняння теоретичних кривих та експерименттальних даних для температурних залежностей рухливості дірок у сполуках



Рис. 11. Температурна залежність рухливості важких дірок у Cd_xHg_{1-x}Te. Суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 –АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НД, НП, СД механізми розсіяння, відповідно.

 $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xCd_{1-x}Te$ ta GaN.

Теоретичні температурні залежності рухливості важких дірок порівнювали з експериментальними даними для зразків Cd_xHg_{1-x}Te зі складом x=0; 0.216; 0.224 ; 0.229; 0.232; 0.31; 0.38 ; 0.5; 0.62. Для x=0 рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності: $p-n=N_A$; а для $x>0 - p-n=N_A - N^+_D$, де N_A ; N^+_D – концентрації іонізованих акцепторів та донорів відповідно. Теоретичні криві $\mu(T)$ показані на рис. 11. Суцільні лінії відображають залежності, розраховані на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана. Отримані параметри розсіяння γ для різних механізмів наведені в таблиці 10. Як бачимо, теоретичні криві добре узгоджуються з експериментальними даними у всьому досліджуваному інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 11 позначені у вигляді точкових ліній відповідні залежності. Видно, що для x=0 основним механізмом є розсіяння на іонізованих домішках та розсіяння на полярних оптичних фононах. Для x>0 за низьких температур (T<50~K) основним ме-

Таблиця 10.

Па	раметр	γ,	для різних	механізмів	розсіяння	важких дірок	в Cd _x Hg _{1-x} Te
----	--------	----	------------	------------	-----------	--------------	--

Зразок	X	γпо	γід	γпе	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
14-7	0	0.45	0.56	0.3	2.25
7	0.31	0.4	1.0	0.3	





Рис.12. Температурна залежність рухливості важких дірок у кристалах Zn_xCd_{1-x}Te. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9–АК, IД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НД, НП, СД механізми розсіяння, відповідно.

ханізмом є розсіяння на потенціалі статичної деформації. Розсіяння непорядкованості та розсіяння на полярних оптичних фононах теж дає внесок в цьому температурному інтервалі. За вищих температур внесок розсіяння на іонізованих домішках також стає суттєвим. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок.

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості важких дірок виконували з експериментальними даними для кристалів $Zn_xCd_{1-x}Te$ зі складом x=0; 0.16; 0.40; 0.68; 0.80; 0.90; 1.Для 0 < x < 1 рівень Фермі визначали з рівняння електронейтральності: $p = N_A/[1+2 \exp((E_A-E_F)/k_BT)]$, де E_A – енергія іонізації акцептора; N_A – концентрація акцепторів. Для x = 0 рівняння нейтральності має вигляд: $p = N_A/[1+2 \exp((E_A-E_F)/k_BT)]$. Для x=1 рівень Фермі знаходили з рівняння $p=N_A^-=1/e R$, де R – експериментальне значення коефіцієнта Холла. Теоретичні криві $\mu(T)$ для $Zn_xCd_{1-x}Te$ показані на рис.12. Суцільні лінії відображають криві, розраховані на основі близькодіючих моделей у рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 11 наведено отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Бачимо, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 12 точковими лініями позначено відповідні залежності. Як бачимо,

Таблиця 11.

x	γпо	γц	$\gamma_{\Pi ext{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³			
0.00	0.44	1.0	0.34	0.5			
0.40	0.47	1.0	0.33	20.0			
1.00	0.39	1.0	0.35	0.1			

Параметр γ для різних механізмів розсіяння важких дірок в Zn_xCd_{1-x}Te

у кристалах, збагачених Cd, основними механізмами є розсіяння на центрах статичної деформації, полярних оптичних, акустичних фононах та акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля. Малий внесок СД- механізму розсіювання для x=0 можна пояснити ліпшою якістю кристалу в порівнянні з випадком x>0. В інтервалі низьких температур спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це можна пояснити неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії. У кристалах, збагачених Zn, розсіяння на полярних оптичних, акустичних фононах та акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля також домінує. Для цього випадку вплив СД- механізму розсіяння є менш суттєвим. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок.

Розраховано залежність $\mu(T)$ для дірок у p– GaN з концентрацією домішок 1.8?10¹⁹ ? 2.6?10²⁰ см⁻³. У цьому випадку порівняно добре узгодження теорії та експерименту простежується тільки в разі мінімального рівня легування, тоді як за високого рівня легування теорія тільки якісно описує експериментальні дані. Це можна пояснити тим, що у випадку високого рівня легування відбувається сильна перебудова енергетичного спектра кристала – або утворення акцепторної зони, або утворення твердого розчину акцепторної домішки та нітриду галію. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння дірок на рис. 13 штриховими лініями позначено відповідні залежності. Параметри розсіяння γ наведені в таблиці 12. Як бачимо, у низькотемпературному інтервалі основну роль відіграє СД- розсіяння, тоді як за високих температур простежується комбіноване розсіяння — розсіяння на іонізованих домішках, акустичних та полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння роблять нехтувано малий внесок. Розраховано температурну залежність фактора Холла для дірок у нітриді галію.



Рис. 13. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість дірки в кристалі GaN. *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД, НД механізми розсіяння, відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей.

Таблиця 12.

Параметр *у* для різних механізмів розсіяння важких дірок в GaN

The manual for the formation of the form							
Зразок	γпо	Υщ	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³			
К	0.53	0.45	0.30	130.0			

висновки

Проведені дослідження дали змогу запропонувати новий підхід для описання явищ переносу в кристалах А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V, що ґрунтується на принципі близькодії носіїв заряду в ході моделювання їхнього розсіювання на дефектах кристалічної гратки різної природи. Зокрема, виявлено таке:

1. З'ясовано, що врахування близькодії в разі розсіяння носія заряду на іонізованій домішці вводить обмеження на характерний радіус кулонівської взаємодії розмірами кристалічної комірки a_0 , тобто допускає представлення $r = \gamma_{III} a_0$, де підгінний параметр γ_{III} змінюється в межах [0,1].

2. Визначено, що врахування у кристалі принципу близькодії в разі розсіяння носія заряду на нейтральній домішці можливе у випадку обмеження характерного радіуса їхньої взаємодії половиною сталої гратки.

3. Моделювання на основі принципу близькодії процесу взаємодії носія заряду з центром статичної деформації виконано видозміною потенціалу взаємодії $U \sim b_0 r^{-2}$ $(b_0 - величина, яка зв'язана з розміром дефекту), зроблено припущення, що$

величина *b*₀ дорівнює сталій гратки, тобто сферично-симетричне поле центра статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки.

4. Виявлено, що врахування принципу близькодії в описі взаємодії носія заряду з акустичним фононом у кристалі зумовлює необхідність вибору вихідного гамільтоніана взаємодії у вигляді функції дискретних змінних.

5. У ході розгляду процесу розсіянні носія заряду (електрон або дірка) на неполярному оптичному фононі в рамках принципу близькодії зроблено вибір гамільтоніана взаємодії у вигляді функції, залежної від дискретних змінних.

6. З'ясовано, що врахування близькодії під час взаємодії електрона (дірки) з полярним оптичним фононом визначає вибір дипольного моменту та вектора поляризації елементарної комірки у вигляді функції дискретних змінних.

7. Визначено, що врахування принципу близькодії в разі опису процесу розсіяння носія заряду на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля визначає вигляд виразу для макроскопічного вектора поляризації, що виражається через компоненти тензора деформації та п'єзоелектричного тензора, та є функцією дискретних змінних.

8. Запропоновано метод знаходження аналітичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії, який справджується для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.

9. Розраховано температурні залежності рухливості носіїв заряду в низці напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит, які дають ліпше узгодження з експериментом порівняно з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

- 1. Малик О.П. Непружне розсіяння електронів у телуриді ртуті/ О.П. Малик // УФЖ. - 2002.- Т.47, № 9.- С. 842-845.
- Malyk O.P. Nonelastic electron scattering in HgTe./ O.P. Malyk// Proceedings of SPIE. - 2003. - V.5065. - P.117-121.
- Malyk O.P. Nonelastic charge carrier scattering in mercury telluride/ O.P. Malyk // J. Alloys Compd. – 2004. - V.371/1-2. - P.146-149.
- 4. Малик О.П. Непружне розсіяння електронів на полярних оптичних фононах в телуриді ртуті/ О.П. Малик // УФЖ. 2004. Т.49, № 7. С.677-680.
- 5. Malyk O.P. Inelastic electron-polar optical phonon scattering in the solid solution Cd_xHg1_{-x}Te/ O.P. Malyk // J. Alloys Compd. 2004. V.379. P.60-63.
- 6. Malyk O.P. The inelastic electron polar optical phonon scattering in HgTe/ O.P. Malyk // WSEAS Trans. Math. 2004. V. 3, Issue 2. P.293-296.
- Malyk O.P. Construction of the exact solution of the stationary Boltzmann equation for the semiconductor with isotropic dispersion law/ O.P. Malyk // WSEAS Trans. Math.-2004. - Issue 2. V. 3. - P. 354-357.
- 8. Malyk O.P. The local inelastic electron -polar optical phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk // Comp. Mater. Sci. 2005. V.33. P. 153-156.

- Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential in narrow gap Cd_xHg_{1-x}Te/ O.P. Malyk // Mater. Sci. & Engineering B. - 2006. - V. 129. - P. 161-171.
- 10.Malyk O.P. Short-range principle in the theory of the charge carrier scattering in CdHgSe solid solution/O.P. Malyk // Proceedings of the 10th WSEAS International Conference on Mathematical Methods and Computational Techniques in Electrical Engineering (MMACTEE'08). Sofia, 2 4 May, 2008. P.259-262.
- 11.Malyk O.P. The local electron interaction with crystal lattice defects in CdHgSe solid solution/ O.P. Malyk // Phys. Status Solidi C. 2009. V.6, No. S1. P.S86-S89.
- 12.Malyk O.P. Electron mobility in Cd_xHg_{1-x}Se/ O.P. Malyk // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. 2009. V.12, N.3. P. 272-275.
- 13. Малик О.П. Розсіяння важких дірок на близькодіючому потенціалі кристалічних дефектів в твердому розчині CdHgTe / О.П. Малик // Фізика і хімія твердого тіла. 2009. Т.10, № 2. С. 253-257.
- 14.Malyk O.P. The local charge carrier interaction with lattice defects in ZnCdTe and ZnHgTe solid solutions/O.P. Malyk//Functional Materials.-2009.-V.16,N.2.-P.179-182.
- 15.Malyk O.P. Charge carrier scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in ZnCdTe, ZnHgSe and ZnHgTe / O.P. Malyk // Physica B: Condensed Matter. - 2009. – V. 404. - N.23-24. – P. 5022-5024.
- Malyk O.P. Charge carrier scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in ZnCdTe and ZnHgTe solid solutions./O.P. Malyk, D.Hui. // World Journal of Engineering.-2009. –V. 6. Supplement.-P. 647-648.
- 17. Malyk O.P.Electron scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in gallium nitride /O.P. Malyk // Phys. Status Solidi C.-2012.-V.9,N3-4.-P.842-846.
- 18. Malyk O.P. Charge carrier mobility in gallium nitride /O.P. Malyk // Diamond Relat. Mater. 2012. V.23, N 3. P.23-27.
- 19. Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in ZnO/O.P. Malyk // Can. J. Phys.-2014.- V.92, N.11.- P. 1372-1379.
- 20. Малик О.П. Локальна взаємодія електронів з потенціалом дефектів в кристалах CdTe:Cl / О.П. Малик, Г.А. Ільчук, В.М. Родич. // Фізика і хімія твердого тіла.– 2014. Т.15, №4.– С.728-732.
- 21. Малик О.П. Рухливість електронів в сульфіді кадмію./О.П. Малик, В.М. Родич, Г.А. Ільчук.//Журнал нано- та електронної фізики. 2015. Т.7. №3. Р. 03019-1 –03019-7.
- 22. Malyk O. The local electron interaction with crystal defects in wurtzite CdS./ O. Malyk, V. Rodych, H.II'chuk.// Phys. Status Solidi C. 2016.–V.13.-P.494–497.
- 23. Малик О. П. Локальне розсіяння електронів на дефектах кристалічної гратки в InSb та InN./ О.П. Малик // Журнал нано- та електронної фізики. 2016. Т.8.– Р. 02018-1 02018-7.
- 24. Malyk O.P. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on firstprinciple wave function. / O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk // Comp. Mater. Sci. – 2017. – V. 139. – P. 387–394.
- 25. Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential of the point defects in sphalerite GaN: calculation from the first principles. / O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk // J. Nano- Electron. Phys. 2017. V. 9. N 6. P. 06007-1 06007-6.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

- 26. Malyk O.P. Nonelastic electron-phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk // 6-th International Workshop on Expert Evaluation and Control of Compound Semiconductor Materials and Technologies (EXMATEC), 26-29 May 2002. - Book of Abstracts.- Budapest, 2002. - P.147.)
- 27. Malyk O.P. Nonelastic heavy-hole-phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk // European Material Conference "EMRS 2002", 18-21 June 2002. Abstracts.- Strasbourg, 2002. P. E-18.
- 28. Малик О.П. Непружна дірково-фононна взаємодія в HgTe/ О.П. Малик // І Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 10-14 вересня 2002. Тези доповідей. Одеса, 2002. Т.2. С.16.
- 29.Malyk O.P. Nonelastic charge carrier scattering in mercury telluride/ Malyk O.P. // Symposium on Solid Solution of the II-VI Compounds - Growth, Characterization and Applications, 14-18 October 2002. – Programme and Abstracts.- Zakopane, 2002. – Abstract 44.
- 30. Малик О.П. Непружна взаємодія електронів з полярними оптичними фононами в HgTe/ О.П. Малик // І міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка і мікросенсорні технології» (СЕМСТ-1), 1-5червня 2004. Тези доповідей. Одеса, 2004. С.55.
- 31. Малик О.П. Непружне електрон-фононне розсіяння в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te (x =0.52 ; 0.59 ; 1) / О.П. Малик // II Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 20-24 вересня 2004. Тези доповідей. Чернівці, 2004 С.164.
- 32. Malyk O.P. The local inelastic electron -polar optical phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk //European Material Conference "EMRS 2004",24-28 May 2004.
 Book of Abstracts.- Strasbourg, 2004. P.13. Abstract H/P.09.
- 33. Malyk O.P. The exact solution of a stationary Boltzmann equation for the semiconductor with isotropic dispersion law/ O.P. Malyk// The European Material Conference "EMRS 2004", 24-28 May 2004. - Book of Abstracts.- Strasbourg, 2004. -P.13. - Abstract H/P.10.
- 34. Malyk O.P. Inelastic electron-polar optical phonon scattering in wide gap CdHgTe alloys/ O.P. Malyk//European Materials Research Society (E-MRS) 2004 Fall Meeting. Symposium F:"Wide band gap II-VI semiconductors: growth, characterization and applications", 6-10 September 2004.-Book of Abstracts.- Warsaw, 2004. P.175-176.
- 35. Malyk O.P. The model of short-range inelastic electron-polar optical phonon interaction in HgTe/O.P. Malyk // The XXIV conference on Solid State Physics and Materials Science & Workshop on Photonic Materials and Optoelectronic Devices, 22-26 February 2004. - Book of Abstracts. - Safaga, Red Sea, Egypt, 2004. - P. 109.
- 36. Малик О.П. Взаємодія електронів з близькодіючим потенціалом дефектів кристалічної гратки в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52; 0.59; 1) / О.П. Малик // V міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників», 27-30 червня 2005 р.- Тези доповідей. Дрогобич, 2005. С. 119.
- 37. Malyk O.P. Electron interaction with a short-range potential of a crystal lattice defect in CdHgTe solid solution/O.P. Malyk // 12th International Conference on II-VI Compounds, 12-16 September 2005. – Program & Abstracts.- Warsaw, 2005. - P.59.

- 38. Malyk O.P. Electron interaction with a short-range potential of a crystal lattice defect in wide gap CdHgTe solid solution/O.P. Malyk // 12th Canadian Semiconductor Technology Conference, 16-19 August 2005.– Program.- Ottawa, 2005 - Poster WP.61.
- 39. Malyk O.P. The local charge carrier interaction with a crystal lattice defect in CdHgTe solid solution/O.P. Malyk // International Conference "Functional Materials" (ICFM'2005), 3-8 October 2005. Abstracts.- Crimea, 2005. P.297.
- 40. Malyk O.P. The new approach to the description of the electron scattering in Cd_xHg_{1-x}Te based on the short-range principle/O.P. Malyk //12th international conference on composites/nanoengineering (ICCE-12),1–6 August, 2005.-Program.- Tenerife, 2005. P.21.
- 41. Malyk O.P. Heavy-hole scattering on the short-range potential in Cd_xHg_{1-x}Te (x≈0.22) /O.P. Malyk// International conference "Nanoelectronic Devices for Defence & Security"(NANO-DDS-2007),18-21June 2007.-Book of Abstracts.-Arlington, 2007.-P.38.
- 42.Malyk O.P. Heavy-hole scattering on the short-range potential of the crystal defect in narrow gap CdHgTe solid solution/O.P. Malyk // 12th International Conference on Defects Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP XII), 9-13 September 2007. Program.- Berlin, 2007. Poster 64.
- 43. Malyk O.P. Heavy-hole interaction with a short-range potential of a crystal lattice defect in HgTe/O.P. Malyk // 13th International Conference on II-VI Compounds, 10-14 September 2007. Program.- Korea, 2007. Poster Th-P-44.
- 44. Malyk O.P. Heavy-hole interaction with a short-range potential of a crystal lattice defect in Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.38) /O.P. Malyk// International Conference "Functional Materials" (ICFM' 2007),1-6 October, 2007.-Book of Abstracts.-Crimea, 2007.- P.465.
- 45. Малик О.П. Взаємодія важких дірок з близькодіючим потенціалом дефектів кристалічної гратки в телуриді ртуті/ О.П. Малик // III Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 17-22 червня 2007. -Збірник тез доповідей.- Одеса, 2007. С. 408.
- 46. О.П. Малик. Особливості взаємодії електронів з близькодіючим потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині CdHgTe при низькій температурі/ О.П. Малик // III міжнародна науково-практична конференція «Матеріали електронної техніки та сучасні інформаційні технології», 21-23 травня 2008. Тези доповідей.- Кременчук, 2008. С. 114.
- 47. Малик О.П. Взаємодія електронів з близькодіючим потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині CdHgTe при низькій температурі/О.П. Малик//3-я Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології», 2-6 червня 2008.-Тези доповідей. - Одеса, 2008- С.199.
- 48. Malyk O.P. The local electron interaction with crystal lattice defects in CdHgSe solid solution/O.P. Malyk//International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications, 20-25 July 2008.-Program.-Edmonton, 2008.- Poster P053.
- 49. Малик О.П. Розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі кристалічних дефектів в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Se/O.П. Малик // VI Міжнародна школаконференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників", 23 – 26 вересня 2008. - Тези доповідей. - Дрогобич, 2008. - С. 129.

- 50. Малик О.П. Розсіяння носіїв заряду на близькодіючому потенціалі дефектів у твердих розчинах ZnCdTe та ZnHgTe /O.П. Малик // XII Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок і наноструктур (МКФТТПН-XII), 18-23 травня 2009. Матеріали конференції. Івано-Франківськ, 2009. Т. 2. С. 219-221.
- 51. Malyk O.P. Charge carrier scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in ZnCdTe, ZnHgSe and ZnHgTe solid solutions/O.P. Malyk// 25th International conference on defects in semiconductors (ICDS-25), 20-24 July 2009. – Book of Abstracts. - St. Petersburg, 2009. – P. 313-314.
- 52. Malyk O.P. The local electron interaction with crystal lattice defects in ZnHgSe and ZnHgTe solid solutions/O.P. Malyk //14th International Conference on II-VI Compounds,23-28 August 2009.-Program and Abstracts.-St.Petersburg,2009.-P. 307.
- 53. Malyk O.P. Charge carrier mobility in ZnCdTe and ZnSe /O.P. Malyk // European Materials Research Society (E-MRS) 2009 Fall Meeting. Symposium C, 14-18 September 2009. Book of Abstracts.- Warsaw, 2009. P. 66.
- 54. Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential of the crystal defects in ZnHgSe and ZnHgTe solid solutions/O.P. Malyk // 13th International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP-XIII), 13-17 September 2009. –Program.- Wheeling, USA, 2009. P. 6.
- 55. Малик О.П. Локальна взаємодія носіїв заряду з потенціалом кристалічних дефектів у твердих розчинах ZnCdTe, ZnHgSe та ZnHgTe /O.П. Малик // IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 15 19 вересня 2009. Тези доповідей. Т.2.- Запоріжжя, 2009. С.187.
- 56. Malyk O.P. The local charge carrier scattering on the crystal lattice defects in ZnCdTe and ZnHgTe solid solutions/O.P. Malyk // 2009 Nanoelectronic Devices for Defense & Security (NANO-DDS) Conference, 27 September-2 October 2009. -Technical Program & Abstract Digest.- Fort Lauderdale, USA, 2009. P. 76.
- 57. Malyk O.P. Electron mobility in ZnHgSe solid solution /O.P. Malyk// International Conference "Functional Materials" (ICFM' 2009),5-10 October,- 2009.- Abstracts.- Crimea, 2009.- P.50.
- 58. O.P. Malyk. Electron scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in gallium nitride/O.P. Malyk//9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9),10-15 July 2011.-Program.-Glasgow, Scotland, 2011.- P.92.
- 59. O.P. Malyk. Charge carrier scattering on the short-range potential of the crystal defects in gallium nitride/O.P. Malyk//26th International Conference on Defects in Semiconductors (ICDS-26), 17-22 July 2011.-Program.-Nelson, New-Zealand, 2011. - P.11.
- 60. O.P. Malyk. The local charge carrier scattering on the crystal lattice defects in GaN /O.P. Malyk// Nanoelectronic Devices for Defense & Security (NANO-DDS 2011)Conference, 29 August-1 September 2011.- Program.-NewYork,USA.-P. 5.
- 61. O.P. Malyk. The local charge carrier interaction with crystal lattice defects in GaN /O.P. Malyk//14th International Conference on Defects -Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors (DRIP-XIV), 26-29 September 2011,- Program.-Miyazaki, Japan.- P. 12.
- 62. O.P. Malyk. The local electron interaction with crystal lattice defects in ZnO/O.P. Malyk// 7th International Workshop on Zinc Oxide and Related Materials (IWZnO), 11-14 September 2012. Program.- Nice, France. P. 10. Poster 111.

- 63. О.Р. Malyk. Electron mobility in zinc oxide /O.P. Malyk// VIII міжнародна школаконференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників», 25-28 червня 2013. - . Тези доповідей. - Дрогобич, Україна. - С. 94.
- 64. O.P. Malyk. The local electron interaction with crystal defects in zinc oxide /O.P. Malyk// E-MRS Fall meeting. Symposium K: ZnO, Material Science from Researches to Electronic Applications, 16-20 September 2013.-Program.-Warsaw.- Poland. Abstract K I 4.
- 65. Малик О.П. Принцип близькодії в теорії розсіяння носіїв заряду в оксиді цинку /О.П. Малик // VI Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 30 вересня - 4 жовтня 2013. - Тези доповідей. - Чернівці, 2013. - С. 521-522.
- 66. Malyk O. Electron mobility in cadmium sulfide./ O.P. Malyk, V.M. Rodych, G.A. Ilchuk.// Матеріали XV Міжнародної конференції «Фізика і технологія тонких плівок та наносистем» (МКФТТПН-XV). 11-16 травня 2015.- Івано-Франківськ, Україна. -С.105.
- 67. Malyk O. The local electron interaction with crystal defects in wurtzite CdS./ O. Malyk, V. Rodych, H.II'chuk.// 17th International Conference on II-VI Compounds and Related Materials. 13-18 September 2015.- Paris , France.- Conference book.- P.290-291.
- 68. Малик О.П. Локальна взаємодія електронів з кристалічними дефектами в нітриді індію./ О.П. Малик. // Матеріали І міжнародної науково-практичної конференції «Актуальні проблеми прикладної фізики». – 24-28 вересня 2012. – Севастополь, Україна. - С.116.
- 69. Malyk O.P. The local electron interaction with lattice defects in InN./ O.P. Malyk // 21 European Workshop on Heterostructure Technology HETECH 2012. - 5-7 November 2012. - Barcelona, Spain.- Program.- P. 1.
- 70. Malyk O.P. Short-range principle in the theory of electron scatte-ring on the crystal lattice defects in InSb./ O.P. Malyk, G.V. Kenyo.//II Міжнародна науково-практична конференція "Напівпровідникові матеріали, інформаційні технології та фотовольтаїка" (НМІТФ-2013).- 22 24 травня 2013.- Кременчук, Україна. Тези доповідей. С. 168.
- 71. Malyk O.P. The local electron scattering on the crystal lattice defects in InSb. / O.P. Malyk.//Матеріали XIV Міжнародної конференції «Фізика і технологія тонких плівок та наносистем» (МКФТТПН-XIV).-20-25 травня 2013.- Івано-Франківськ, Україна. -С.566.
- 72.Malyk O.P. The use of the short-range principle in the electron scattering theory in indium antimonide./O.P. Malyk.// E-MRS Fall meeting. Symposium A: Alter-native semiconductor integration in Si microelectronics: materials, techniques & applications.-16-20 September 2013.-Warsaw, Poland.-Program.-Abstract A9.

Наукові праці, які додатково відображають наукові результати дисертації:

- 73. Малик О.П.Непружна електрон-фононна взаємодія в HgTe/ О.П. Малик, Г.В. Кеньо // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Елементи теорії та прилади твердотілої електроніки". 2002. № 454. С 28-37.
- 74. Малик О.П. Непружне розсіювання дірок на оптичних коливаннях кристалічної гратки в HgTe/ О.П. Малик, Г.В. Кеньо // Вісник НУ "Львівська політехніка".Сер. "Електроніка". 2002. № 455. С. 166-171.

- 75. Побудова точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана / Малик О.П., Кеньо Г.В., Петрович І.В.[та ін.] // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Елементи теорії та прилади твердотілої електроніки". -2003. - № 491. - С.3-8.
- 76. Малик О.П. Непружне розсіювання електронів на полярних оптичних коливаннях кристалічної гратки в твердому розчині Сd_x Hg_{1-x} Te/ О.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Електроніка ". – 2004. - № 513. - С.137-142.
- 77. Малик О.П. Розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te(x=0.52; 0.59; 1)/О.П. Малик, Г.В.Кеньо, І.В.Петрович// Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Електроніка ".-2005.-№ 532.- С.117-126.
- 78. Малик О.П. Моделювання локальної взаємодії важких дірок з потенціалом дефектів в HgTe/ О.П. Малик, І.С. Собчук // Вісник НУ «Львівська політехніка» . Сер. «Фізико-математичні науки». 2007. № .601. С. 78-81.
- 79. Малик О.П. Взаємодія електронів з близькодіючим потенціалом кристалічних дефектів у вузькощілинному твердому розчині CdHgTe при низькій температурі/ О.П. Малик // Вісник НУ «Львівська політехніка». Сер. "Електроніка". - 2008. - № 619. - С.134-138.
- 80. Малик О.П. Локальна взаємодія електронів з потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52; 0.59; 1) при низькій температурі/ О.П. Малик // Вісник НУ «Львівська політехніка». Сер. «Фізико-математичні науки».
 2008. № 625. С.86-89.
- 81. Малик О.П. Особливості взаємодії електронів з близькодіючим потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині CdHgTe при низькій температурі/ О.П. Малик // Нові технології. 2008. №1(19). С.125-128.
- 82.Малик О.П. Розсіяння важких дірок на близькодіючому потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині Zn_xCd_{1-x}Te (0.16 ≤ x ≤ 0.9)/ О.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Електроніка ".-2009.-№.646-С.158-164.

АНОТАЦІЯ

Малик О.П. Явища переносу в напівпровідниках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків. – Львівський національний університет імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, Львів, 2018.

Дисертація присвячена застосуванню принципу близькодії до опису процесів розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної гратки. У разі розсіянні носія заряду на акустичному та неполярному оптичному фононах, нейтральному дефекті та потенціалі статичної деформації радіус дії близькодіючого потенціалу обмежений однією елементарною коміркою. У випадку розсіяння носія заряду на іонізованій оптичному, п'єзоелектричних (п'єзоакустичному домішці, полярному та п'єзооптичному) фононах радіус дії близькодіючого потенціалу шукали у вигляді $R = \gamma a_0 (a_0 - \text{стала гратки, } \gamma$ - відповідний підгінний параметр). Для розрахунку компонентів провідності використано тензора метод точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана. Розраховано температурну залежність рухливості носіїв заряду в кристалах $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0 \le x \le 1$), $Cd_xHg_{1-x}Se$ ($0 \le x \le 0.547$), $Zn_xCd_{1-x}Te$ ($0 \le x \le 1$), $Zn_xHg_{1-x}Se$ ($0.02 \le x \le 1$), $Zn_xHg_{1-x}Te$ (x=0.15), ZnO, GaN, CdS, InN, InSb. Розглянуто вплив різних механізмів розсіяння на рухливість носія заряду. Виявлено добру узгодженість теорії та експерименту в всьому розглянутому інтервалі температур. Визначено параметри розсіяння γ для різних механізмів розсіяння.

Ключові слова: сполуки А^{II}В^{VI}та А^{III}В^V, розсіяння носіїв заряду, дефекти кристалічної гратки, стаціонарне рівняння Больцмана.

ANNOTATION

Malyk O.P. Transport phenomena in $A^{II}B^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ semiconductors based on short-range scattering models of charge carriers. – A Manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, specialty 01.04.10 – Physics of Semiconductors and Dielectrics. – Ivan Franko National University of Lviv, Ministry of Education and Science of Ukraine, Lviv, 2018.

The thesis is devoted to the application of the short-range principle to the description of the charge carrier scattering on the crystal lattice defects. For the charge carrier scattering on the nonpolar optical and acoustic phonons, neutral defects and static strain potential the interaction radius of the short-range potential is limited by one unit cell. For the charge carrier scattering on the ionized impurity, polar optical and piezoelectric (piezoacoustic and piezooptic) phonons the interaction radius of the short-range potential was searched in the form of $R = \gamma \ a_0 \ (a_0 - \text{lattice constant}, \ \gamma - \text{the respective adjusting parameters})$. The method of a precise solution of the stationary Boltzmann equation was used for the calculation of the conductivity tensor components. The temperature dependence of the charge carriers mobility in $Cd_xHg_{1-x}Te \ (0 \le x \le 1)$, $Cd_xHg_{1-x}Se \ (0 \le x \le 0.547)$, $Zn_xCd_{1-x}Te \ (0 \le x \le 1)$, $Zn_xHg_{1-x}Se \ (0.02 \le x \le 1)$, $Zn_xHg_{1-x}Te \ (x=0.15)$, ZnO, GaN, CdS, InN, InSb crystals was calculated. The influence of the different scattering mechanisms on the charge carrier mobility is considered. A good agreement between theory and experiment in all investigated temperature range is established. The scattering parameters γ for different scattering modes are determined.

Key words: $A^{II}B^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ compounds, charge carrier scattering, crystal lattice defects, stationary Boltzmann equation.

АННОТАЦИЯ

Малык О.П. Явления переноса в полупроводниках $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^{V}$ на основании близкодействующих моделей рассеяния носителей заряда. – На правах рукописи. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников и диэлектриков. – Львовский национальный университет имени Ивана Франко Министерства образования и науки Украины, Львов, 2018.

Диссертация посвящена применению принципа близкодействия к описанию процессов рассеяния носителей заряда на дефектах кристаллической решетки. При рассея-

нии носителя заряда на акустическом и неполярном оптическом фононах, нейтральном дефекте и потенциале статической деформации радиус действия близкодействующего потенциала ограничивался одной элементарной ячейкой. При рассеянии носителя заряда на ионизированной примеси, полярном оптическом и пьезоэлектрическом (пьезоакустическом и пьезооптическом) фононах радиус действия близкодействующего потенциала искали в виде $R = \gamma a_0 (a_0 - \text{постоянная решетки}, \gamma)$ - соответствующий подгоночный параметр). Расчет матричного элемента перехода носителя заряда из состояния k в состояние k' под действием потенциальной энергии дефекта кристаллической решетки проводили на основании волновой функции, выбранной в виде плоской волны, нормированной на единицу объема (приближение эффективной массы), либо в виде произведения функций Блоха, выраженных через амплитуды Лютингера-Кона, и волновой функции системы независимых гармонических осцилляторов. Предложена методика вычисления производных от вектора смещения атомов элементарной ячейки и вектора поляризации, являющихся функцииями дискретных переменных, по координатам. Приведено формулы для вычисления вероятностей рассеяния носителей заряда на близкодействующем потенциале кристаллических дефектов различного типа. Предложен метод точного решения стационарного уравнения Больцмана для полупроводника с изотропным законом дисперсии для случая произвольного отклонения от состояния равновесия. Решение уравнения Больцмана искали в виде разложения в ряд по компонентам волнового вектора и по степеням энергии носителя заряда. Путем интегрирования по волновому вектору уравнение Больцмана приведено к системе нелинейных алгебраических уравнений для электронов и тяжелых дырок. Проведена классификация типов решений системы нелинейных алгебраических уравнений и представлен критерий отбора физических решений среди совокупности математических решений. Разработана методика вычисления компонентов тензора проводимости на основании физических решений уравнения Больцмана. Рассчитано температурную зависимость подвижности носителей заряда в кристаллах Cd_xHg_{1-x}Te (0≤x≤1), Cd_xHg_{1-x}Se $(0 \le x \le 0.547)$, B Zn_xCd_{1-x}Te $(0 \le x \le 1)$, Zn_xHg_{1-x}Se $(0.02 \le x \le 1)$ Zn_xHg_{1-x}Te (x=0.15), ZnO, GaN, CdS, InN, InSb. Рассмотрено влияние различных механизмов рассеяния на подвижность носителя заряда. Установлено хорошее согласование теории и рассмотренном интервале температур. Установлено эксперимента во всем параметры рассеяния у для различных механизмов рассеяния.

Ключевые слова: соединения $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^{V}$, рассеяния носителей заряда, дефекты кристаллической решетки, стационарное уравнение Больцмана.