Національний університет " Львівська політехніка" Міністерство освіти і науки України

Львівський національний університет імені Івана Франка Міністерство освіти і науки України

> Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

МАЛИК ОРЕСТ ПЕТРОВИЧ

УДК 538.935

ДИСЕРТАЦІЯ

Явища переносу в напівпровідниках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду

<u>01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків</u> (шифр і назва спеціальності)

> <u>01 – фізико-математичні науки</u> (галузь знань)

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

О.П. Малик

Науковий консультант- Дружинін Анатолій Олександрович, д. т. н., професор

Львів – 2017

АНОТАЦІЯ

Малик О.П. Явища переносу в напівпровідниках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ на основі близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків (105 – прикладна фізика та наноматеріали).

Національний університет " Львівська політехніка".

Львівський Національний університет імені Івана Франка, Львів, 2017.

Дисертаційна робота присвячена розробленню 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.

У першому розділі на підставі аналізу літературних даних представлено сучасні уявлення про явища перенесення в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$.

Описано процеси розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної решітки: 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 решітки мають наступні недоліки:

1) вони є далекодіючі, тобто, припускається, що носій взаємодіє з достатньо віддаленими областями кристалу (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 якого носій заряду взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу;

2) В межах дії потенціалу $U \approx l/r^n (n=1,2)$ (розсіяння на іонізованій домішці та на потенціалі статичної деформації) на відстанях ~ 10 a_0 від дефекту величина потенціальної енергії зменшується на порядок, тобто, стає величиною другого порядку малості в порівнянні з періодичним полем кристалу. Однак, розглянуті моделі є вірні в першому наближенні теорії збурень. Тобто, розглянуті моделі містять і математичну суперечність.

3) в цих моделях використовується макроскопічний параметр діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах. Застосування цього параметру у вищеописаних моделях розсіяння є суперечливим: розглянуті моделі є мікроскопічні, тому вони повинні описувати макроскопічні властивості кристалу, з іншого боку, в цих моделях з самого початку вводиться макроскопічний параметр, а потім проводиться опис мікроскопічних і, відповідно, макроскопічних процесів.

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

Другий розділ присвячений розробці близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної решітки.

Встановлено, що врахування близькодії при розсіянні 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 підгоночний параметр γ_{III} змінюється в межах [0,1]. В цьому

випадку ймовірність розсіювання носія заряду на іонізованій домішці у k-просторі в наближенні ефективної маси демонструє сильну степеневу залежність від γ_{III} (~ γ_{III}^4), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

Визначено, що врахування у кристалі принципу близькодії при розсіянні носія заряду на нейтральній домішці можливе при обмеженні характерного радіус їх взаємодії половиною величини сталої гратки. Показано, що моделювання такої взаємодії в рамках моделі Ерджинсоя дозволяє отримати перенормований вираз для ймовірності розсіяння носія заряду на потенціалі нейтральної домішки, що суттєво (у 5 разів) завищує ефективний радіус Бора.

Моделювання на основі принципу близькодії процесу взаємодії носія заряду з центром статичної деформації здійснено шляхом видозміни потенціалу взаємодії $U \sim b_0 r^{-2} (b_0 - величина, яка зв'язана з розміром дефекту). Зроблено$ $припущення, що величина <math>b_0$ рівна постійній решітки, тобто, сферичносиметричне поле центру статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки.

Встановлено, що врахування принципу близькодії при описі взаємодії носія заряду з акустичним фононом в кристалі обумовлює необхідність вибору вихідного гамільтоніана взаємодії у вигляді функції дискретних змінних. З врахуванням дискретності кристалічної решітки розроблена методика розрахунку компонентів тензора деформації. Розроблена методика інтегрування за величиною хвильового вектора фонона в межах зони Бриллюена з врахуванням пружного характеру розсіяння.

При розгляді 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. В наближенні ефективної маси представлено вираз для обчислення величини ефективного потенціалу деформації $E_{H\Pi O}$ для електронів та дірок. Обґрунтована методика інтегрування за величиною хвильового вектора фонона

в межах зони Бриллюена, де враховано непружний характер розсіяння та розсіяння з переворотом спіна.

Встановлено, що врахування близькодії при взаємодії електрона (дірки) з полярним оптичним фононом визначає вибір дипольного моменту та вектора поляризації елементарної комірки у вигляді функції дискретних змінних. Розроблено методику розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, що відповідає вектору поляризації елементарної комірки. Представлено метод розв'язку рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{\Pi O} a_0 (0 < \gamma_{\Pi O} \le \sqrt{3}/2)$. Для обчислення матричного елементу переходу носія заряду з стану k в стан k' розроблено: а) спосіб інтегрування по координатам електрона та проведена оцінка отриманого виразу для хвильового вектора носія заряду k в межах $0 \div 10^9 \, \text{m}^{-1}$; б) спосіб інтегрування по хвильовому вектору фонона та проведена оцінка отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії (~10⁻¹⁰ м), де враховано непружний характер розсіяння. Встановлено, що ймовірність переходу при даному типі взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від підгоночного параметра $\gamma_{\Pi O}$ (~ $\gamma_{\Pi O}^{10}$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

Встановлено, що врахування принципу близькодії при описі процесу розсіяння носія заряду на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля визначає вид виразу для макроскопічного вектора через компоненти тензора поляризації, ЩО виражається деформації і п'єзоелектричного тензора та є функцією дискретних змінних. Представлена методика розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, який відповідає макроскопічному вектору поляризації. Запропоновано метод розв'язку рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{\Pi E} a_0 \ (0 < \gamma_{\Pi E} \le \sqrt{3}/2)$. В рамках наближення ефективної маси представлено: а) спосіб інтегрування по координатах електрона та проведена

оцінка отриманого виразу для хвильовий вектор носія заряду k в межах $0 \div 10^9 \, {}_{M}{}^{-1}$; б) спосіб інтегрування по хвильовому вектору фонона та проведена оцінка отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії (${}^{-10} \, {}_{M}$) з врахуванням пружного характеру розсіяння на близькодіючому потенціалі акустичних коливань п'єзоелектричного поля, а також враховано непружний характер розсіяння на близькодіючому потенціалі оптичних коливань п'єзоелектричного поля, а також враховано непружний характер розсіяння на близькодіючому потенціалі оптичних коливань п'єзоелектричного поля. Встановлено, що ймовірність переходу при даних типах взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від підгоночного параметра γ_{IIE} (${}^{-\gamma_{IIE}{}^{I0}$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

У третьому розділі представлено метод розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії у випадку відхилення функції розподілу від рівноважного довільного значення. Розглядається стаціонарне рівняння однорідного Больцмана для напівпровідника, що знаходиться в ізотермічних умовах, коли магнітне поле напрямлене вздовж осі «Z» $B = \{0, 0, B\}$, а електричне поле має компоненти E = $\{E_1, E_2, 0\}$. Для такого типу рівняння запропоновано метод знаходження аналітичних розв'язків для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії. Цей метод є справедливий для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення. Визначено критерій відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана. *К*^{*n m*}_{*β α a*} при коефіцієнтах Представлена методика розрахунку множників розкладу в ряд за степенями енергії нерівноважної функції розподілу для різних механізмів розсіяння.

В четвертому розділі проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей рухливості електронів в 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. Для цих сполук визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість електронів, а також встановлено параметри γ для різних

механізмів розсіяння електронів. Показано, що теоретичні температурні залежності рухливості електронів у вищезазначених напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит дають краще узгодження з експериментом в порівнянні з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

В п'ятому розділі проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей рухливості дірок в сполуках $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xCd_{1-x}Te$ та GaN. Для цих сполук визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння важких дірок. Показано, що теоретичні температурні залежності рухливості дірок у вищезазначених напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ зі структурою сфалерит та вюртцит дають краще узгодження з експериментом в порівнянні з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

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

Список публікацій здобувача:

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

- 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.
- Малик О.П. Непружне розсіяння електронів на полярних оптичних фононах в телуриді ртуті/ О.П. Малик // УФЖ. - 2004. - Т.49, № 7. - С.677- 680.
- 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.
- 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_xHg₁₋ _xTe/ 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.
- 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.
- 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.
- 16.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.

- 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,N 3-4.-P.842-846.
- 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., Syrotyuk S.V. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on first-principle wave function. / O.P. Malyk // 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 // The 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 inter-action 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 напівпро-відників», 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 // ІІІ 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 // ІІІ 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 близькодіючим потенціалом 3 кристалічних дефектів твердому розчині CdHgTe при низькій V температурі/О.П. Малик//З-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 школа-конференція "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.
- 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 Semi-conductors (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.Р. Malyk// VIII міжнародна школа- конференція «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.
- 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. -C.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: Alternative 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 коливан-нях кристалічної гратки в твердому розчині Cd_x Hg_{1-x} Te/ O.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.

ABSTRACT

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

Thesis for a competition of the Doctor's physical-mathematical sciences academic degree by speciality 01.04.10 – physics of semiconductors and dielectrics (105 – applied physics and nanomaterials).

Lviv Polytechnic National University.

Lviv Ivan Franko National University, Lviv, 2017.

The dissertation is devoted to the development of a new approach based on the short-range principle for description the processes of charge carriers scattering on various types of crystal defects in a number of semiconductor compounds $A^{II}B^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ using the exact solution of Boltzmann stationary equation for semiconductor with isotropic dispersion law.

In the first section on the base of the analysis of literary data the modern ideas of the transport phenomena in the $A^{II}B^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ solid solutions are presented.

A description of charge carriers scattering processes on the different types of crystal lattice defects is carried out: scattering on ionized and neutral impurities; scattering on the static strain potential; scattering on the acoustic phonons, scattering on the acoustic and optical oscillations of piezoelectric field; scattering on the polar optical and nonpolar optical phonons. It was noted that the considered models of the charge carriers scattering on crystal lattice defects have the following disadvantages:

1) They are long-range, i.e. it is assumed that the carrier interacts with sufficiently far regions of the crystal (the case of scattering on the ionized impurity or scattering on the potential of static deformation) or the carrier interacts with whole crystal (the case of scattering on the different types of phonons). However, such assumption contradicts the short-range principle which is reliably confirmed experimentally and according to which the charge carrier would interact only with the neighboring crystal regions;

2) Within the action of the potential $U \approx 1/r^n$ (n = 1,2) (scattering on the ionized impurity or scattering on the potential of static deformation) on distances ~ 10 a_0 from the defect the potential energy value decreases by an order of magnitude, i.e. becomes a value of the second order of smallness in comparison with the periodic crystal field. However, the considered models are correct in the first approximation of the perturbation theory. I.e. the considered models also contain the mathematical contradiction.

3) In these models the macroscopic parameter - dielectric permittivity - is used which has no sense in microscopic processes. The using of this parameter in above mentioned scattering models is controversial: the considered models are macroscopic therefore they must describe the macroscopic crystal properties. On the other hand, from the beginning in these models the macroscopic parameter is introduced and then a description of the microscopic and respectively the macroscopic processes is carried out.

A description of two major approximate methods of the solution of the stationary Boltzmann equation – relaxation time approximation and variational method – is carried out. It is noted that these methods of solution have a common

disadvantage: in these methods a linearized i.e. an approximate kinetic Boltzmannn equation is obtained which is based on the assumption of a small deviation of the distribution function from its equilibrium value. However, it remains unknown to what extent such an assumption is correct, how much the real distribution function differs from the function calculated on the basis of these methods.

The second section is devoted to the development of short-range charge carriers scattering models on the crystal lattice defects.

It is established that taking into account the short-range principle during the charge carrier scattering on an ionized impurity introduces a limitation on the characteristic radius of Coulomb interaction by the dimensions of a crystalline cell a_0 is introduced, i.e. admits the representation $r = \gamma_{II} a_0$ where the adjustment parameter γ_{II} varies within limits [0,1]. In this case the probability of the charge carrier scattering on the ionized impurity in \mathbf{k} -space in effective mass approximation demonstrates a strong power dependence on γ_{III} (~ γ_{III}^{4}), which sharply limits the possibility of choosing its numerical value.

It was determined that accounting in crystal the short-range principle during the charge carrier scattering on neutral impurity is possible by limiting the characteristic radius of their interaction by a half of lattice constant. It is shown that the modeling of such an interaction within the framework of Erginsoy model allows us to obtain a renormalized expression for the probability of a charge carrier scattering on the neutral impurity potential which substantially (in 5 times) overestimates the Bohr effective radius.

Simulation on the base of short-range principle of the process of charge carrier interaction with the static deformation center is accomplished by modifying the interaction potential $U \sim b_0 r^{-2}$ (b_0 - the magnitude associated with the defect size). It was assumed that the value b_0 equal to lattice constant, i.e. the spherically symmetric field of the static deformation center acts only within the limits one elementary cell.

It is established that taking into account the short-range principle during the description of the charge carrier interaction with acoustic phonon in crystal causes the

necessity of choice the initial Hamiltonian in the form of a function on discrete variables. Taking into account the discreteness of crystal lattice the calculation method of the deformation tensor components is developed. Taking into account the elastic character of scattering the method of integration over the phonon wave vector within the boundary of Brillouin zone is developed.

During the consideration of the charge carrier (electron or hole) scattering on nonpolar optical phonon in the framework of short-range principle the choice of the interaction Hamiltonian in the form of function on discrete variables is made. In the effective mass approximation the expression for calculation of the value of the optical deformation potential E_{NPO} for electrons and holes is presented. The method of integrating over the value of phonon wave vector within the limits of Brillouin zone is substantiated where the inelastic character of scattering and spin flip scattering were taken into account.

It is established that taking into account the short-range principle during the interaction of electron (hole) with polar optical phonon determines the choice of the dipole moment and the polarization vector of the elementary cell in a form of function of discrete variables. The method of calculation of the bound charge volume density which corresponds to polarization vector of the unit cell is developed. The method of solving the Poisson equation for the bound charge potential is presented, which involves the replacing of elementary cell by the sphere with effective radius that defines the action radius of the interaction potential $R = \gamma_{PO} a_0 (0 < \gamma_{PO} \le \sqrt{3}/2)$. For calculation of the charge carrier transition matrix element from state k to state k' it was developed: a) the method of integration over the electron coordinates and estimation of the obtained expression for the charge carrier wave vector k within the limits $0 \div 10^9 m^{-1}$ is carried out; b) the method of integration over the phonon wave vector and the estimation of the obtained expression within the limits of action of interaction potential ($\sim 10^{-10}$ M) is carried out where the inelastic character of the scattering is taken into account. It was established that the transition probability for given interaction type demonstrates the strong power dependence on adjustable

parameter γ_{PO} (~ γ_{PO}^{10}), which sharply limits the possibility of choosing its numerical value.

It is established that taking into account the short-range principle during the description of the charge carrier scattering on acoustic and optical oscillations of the piezoelectric field determines the form of the term for the macroscopic polarization vector which is expressed through the components of the deformation tensor and the piezoelectric tensor. The polarization vector is also a function of discrete variables. The method of calculation of the bound charge volume density which corresponds to macroscopic polarization vector is presented. The method of solving the Poisson equation for the bound charge potential is presented, which involves the replacing of elementary cell by the sphere with effective radius that defines the action radius of the interaction potential $R = \gamma_{PE} a_0 \ (0 < \gamma_{PE} \le \sqrt{3}/2)$. Within the framework of effective mass approximation it was presented: a) the method of integration over the electron coordinates and estimation of the obtained expression for the charge carrier wave vector **k** within the limits $0 \div 10^9 m^{-1}$ is carried out; b) the method of integration over the phonon wave vector and the estimation of the obtained expression within the limits of action of interaction potential ($\sim 10^{-10} \text{ M}$) is carried out where the elastic character of the scattering on the short-range potential of the acoustic oscillations of the piezoelectric field is taken into account. The inelastic character of scattering on the short-range potential of the optical oscillations of the piezoelectric field is also taken into account. It was established that the transition probability for given interaction types demonstrates the strong power dependence on adjustable parameter γ_{PE} (~ γ_{PE}^{10}), which sharply limits the possibility of choosing its numerical value.

The third section presents a method for solving a Boltzmann stationary equation for semiconductor with isotropic dispersion law in the case of an arbitrary deviation of the distribution function from equilibrium value. The stationary Boltzmann equation for a homogeneous semiconductor under isothermal conditions is considered In this case the magnetic field is directed along «Z» axis $B = \{0, 0, B\}$ and the electric field has the components $E = \{E_1, E_2, 0\}$. For this type of equation a method for finding the analytic solutions for a semiconductor with an isotropic dispersion law is proposed. This method is valid for an arbitrary deviation of the distribution function from equilibrium value. The criterion for the selection of physical solutions among the totality of mathematical solutions of the Boltzmann stationary equation is determined. The method of calculation of multiplier factors $K_{\beta \alpha a}^{nm}$ at coefficients of the expansion into series in power of energy of a nonequilibrium distribution function for different scattering mechanisms is presented.

In the fourth section a comparison between theoretical curves and experimental data for the temperature dependences of electron mobility in the compounds $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, GaN, ZnO, CdS, InN, InSb is made. For these compounds the contribution of various scattering mechanisms to electron mobility is determined. The parameters γ for different mechanisms of electron scattering are also established. It is shown that the theoretical temperature dependences of the electron mobility in the above-mentioned $A^{II}V^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ semiconductor compounds with the sphalerite and wurtzite structure give better agreement with experiment in comparison with long-range models in the relaxation time approximation.

In the fifth section a comparison between theoretical curves and experimental data for temperature dependences of hole mobility in the compounds $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xCd_{1-x}Te$ and GaN is made. For these compounds the contribution of various scattering mechanisms to the charge carrier's mobility is determined. Parameters γ for different scattering mechanisms of heavy hole have been established. It is shown that the theoretical temperature dependences of the hole mobility in the abovementioned $A^{II}V^{VI}$ and $A^{III}B^{V}$ semiconductor compounds with the sphalerite and wurtzite structure give better agreement with experiment in comparison with long-range models in the relaxation time approximation.

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

The list of author's publications:

Scientific papers in which basic scientific results of the dissertation are published:

- Malyk O.P. Inelastic electron scattering in mercury telluride/ O.P. Malyk // Ukr. J. Phys. - 2002.- V.47, N 9.- P. 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. Malyk O.P. Inelastic electron scattering on polar optical phonons in mercury telluride / O.P. Malyk // Ukr. J. Phys. 2004. V.49, N 7. P.677-680.
- 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.
- 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_xHg₁₋ _xTe/ 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.

- 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.
- Malyk O.P. Heavy hole scattering on the short-range potential of crystal defects in CdHgTe solid solution / O.P. Malyk // Physics and Chemistry of Solid State. – 2009. – V.10, N 2. – P. 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.
- 16. 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.
- 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.
- 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.Malyk O.P. The local electron interaction with the defect potential in CdTe:Cl crystals/ O.P. Malyk, H.A. Il'chuk, V.M. Rodych. // Physics and Chemistry of Solid State.–2014. –T.15, №4.– C.728-732.
- 21.Malyk O.P. Electron mobility in cadmium sulfide./ O.P. Malyk, V.M. Rodych, H.A. Il'chuk.//J. Nano- Electron. Phys. 2015. V.7. N3. P. 03019-1 –03019-7.
- 22.Malyk O.P. 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.Malyk O.P. The local electron scattering on the lattice defects in InSb and InN./ O.P. Malyk // J. Nano- Electron. Phys.. 2016. – V.8. N 2.– P. 02018-1 – 02018-7.
- 24.Malyk O.P., Syrotyuk S.V. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on first-principle wave function. / O.P. Malyk // 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.

Scientific papers certifying the approbation of the materials of dissertation:

- 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.
- Malyk O.P. Inelastic hole-phonon interaction in HgTe/ O.P. Malyk // I Ukrainian Scientific Conference on Semiconductor Physics, 10-14 September 2002. – Book of Abstracts.- Odesa, 2002. - V.2. - P.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.Malyk O.P. Inelastic electron interaction with polar optical phonon in HgTe/ O.P. Malyk // I International Scientific and Technical Conference «Sensor Electronics and Microsensory Technologies» (SEMST-1), 1-5 June 2004. - Book of Abstracts. - Odesa, 2004. - P.55.
- 31.Malyk O.P. Inelastic electron-phonon scattering in Cd_xHg_{1-x}Te (x =0.52; 0.59; 1) solid solution./ O.P. Malyk // II Ukrainian Scientific Conference on

Semiconductor Physics, 20-24 September 2004. - Book of Abstracts. - Chernivtsi, 2004 - P.164.

- 32.Malyk O.P. The local inelastic electron -polar optical phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk // The 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 inter-action 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.Malyk O.P Electron interaction with short-range potential of crystal lattice defect in solid solution Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52; 0.59; 1) solid solution./ O.P. Malyk // V International School-Conference «Actual problems of semiconductor physics», 27-30 June 2005.- Book of Abstracts.- Drohobych, 2005. - P. 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

- 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.Malyk O.P. Heavy-hole interaction with a short-range potential of a crystal lattice defect in mercury telluride/O.P. Malyk//III Ukrainian Scientific Conference on Semiconductor Physics, 17-22 June 2007.- Book of Abstracts.-Odesa, 2007. - P. 408.
- 46. Malyk O.P. Peculiarities of the electron interaction with the short-range potential of crystal defects in CdHgTe solid solution at low temperature / O.P. Malyk // III international scientific-practical conference «Materials of electronic technique and

modern information technologies», 21-23 May 2008. - Book of Abstracts.-Kremenchug, 2008. - P. 114.

- 47. Malyk O.P. Electron interaction with the short-range potential of crystal defects in CdHgTe solid solution at low temperature /O.П. Малик//3 International Scientific and Technical Conference «Sensor electronics and microsystem technologies», 2-6 June 2008.- Book of Abstracts.- Odesa, 2008- P.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.Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential of crystal lattice defects in Cd_xHg_{1-x}Se solid solution/ O.P. Malyk // VI International School-Conference «Actual problems of semiconductor physics», 23 26 June 2008.-Book of Abstracts.- Drohobych. P. 129.
- 50.Malyk O.P. Charge carrier scattering on the short-range potential of defects in ZnCdTe and ZnHgTe solid solutions /O.P. Malyk// XII International Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanostructures (ICPTTFN-XII), 18-23 May 2009. – Conference Proceedings.- Ivano-Frankivs'k, 2009. - V. 2. - P. 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.Malyk O.P. Local charge carriers interaction with the potential of crystal defects in ZnCdTe, ZnHgSe and ZnHgTe solid solutions / O.P. Malyk // IV Ukrainian Scientific Conference on Semiconductor Physics, 15 - 19 September 2009. - Book of Abstracts. V.2.- Zaporizhzhia, 2009. - P.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.Malyk O.P. 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.Malyk O.P. Charge carrier scattering on the short-range potential of the crystal defects in gallium nitride/O.P. Malyk//26th International Conference on Defects in Semi-conductors (ICDS-26), 17-22 July 2011.-Program.-Nelson, New-Zealand, 2011. - P.11.
- 60.Malyk O.P. 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.Malyk O.P. 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.Malyk O.P. 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.
- Malyk O.P. Electron mobility in zinc oxide /O.P. Malyk// VIII International School-Conference «Actual problems of semiconductor physics», 25-28 June 2013. -. Book of Abstracts. – Drohobych, Ukraine. - P. 94.
- 64.Malyk O.P. 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.Malyk O.P.. The short-range principle in the theory of charge carriers scattering in zinc oxide / O.P. Malyk // VI Ukrainian Scientific Conference on Semiconductor Physics, September 30 - October 4, 2013. - Book of Abstracts. -Chernivtsi, 2013. - P. 521-522.
- 66.Malyk O. Electron mobility in cadmium sulfide./ O.P. Malyk, V.M. Rodych , G.A. Ilchuk.// Proceedings of XV International Conference «Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems» (ICPTTFN-XV). 11-16 May 2015.-Ivano-Frankivs'k. -P.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.Malyk O.P. The local electron interaction with lattice defects in indium nitride./
 O.P. Malyk // Materials of the I International Scientific and Practical Conference «Actual Problems of Applied Physics». 24-28 September 2012. Sevastopol, Ukraine. P.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 International Scientific and Practical Conference «Semiconductor Materials, Information Technologies and Photovoltaics» (SMITP-2013) .- 22 May 24, 2013. Kremenchuk, Ukraine. Book of Abstracts. P. 168.
- 71.Malyk O.P. The local electron scattering on the crystal lattice defects in InSb. / O.P. Malyk.// Proceedings of the XIV International Conference "Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems" (ICPTTFN-XIV) .- 20-25 May, 2013.- Ivano-Frankivs'k, Ukraine. -P.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: Alternative semiconductor integration in Si microelectronics: materials, tech-niques & applications.-16-20 September 2013.-Warsaw, Poland.-Program.-Abstract A9.

Scientific papers which additionally reflect the scientific results of the dissertation:

- 73.Malyk O.P. Inelastic electron-phonon interaction in HgTe / O.P. Malyk, G.V. Kenyo // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Elements of the theory and devices of solid-state electronics». 2002. -N 454. P. 28-37.
- 74. Malyk O.P. Inelastic holes scattering on optical oscillations of crystal lattice in HgTe/ O.P. Malyk, G.V. Kenyo // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Electronics». – 2002. - N 454. – P. 28-37.
- 75.Construction of the exact solution of the Boltzmann stationary equation / Malyk O.P., Kenyo G.V., Petrovych I.V. [et al.] // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Elements of the theory and devices of solid-state electronics».
 -2003. N 491. P.3-8.
- 76.Malyk O.P. Inelastic electrons scattering on polar optical oscillations of crystal lattice in Cd_x Hg_{1-x} Te solid solution/ O.P. Malyk // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Electronics». – 2004. - N 513. - P.137-142.
- 77.Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential in Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52; 0.59; 1) solid solution / O.P. Malyk, G.V. Kenyo, I.V. Petrovych //

Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Electronics». -2005.-N 532.- P.117-126.

- 78.Malyk O.P. Modeling of the local heavy hole interaction with the potential of defects in HgTe / O.P. Malyk, I.S. Sobchuk // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Physical and Mathematical Sciences». - 2007. - N .601. - P. 78-81.
- 79.Malyk O.P. Electron interaction with short-range potential of crystal defects in narrow-gap CdHgTe solid solution at low temperature / O.P. Malyk // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Electronics». - 2008. - N 619. -P.134-138.
- 80.Malyk O.P. The local electron interaction with potential of crystal defects in Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52; 0.59; 1) solid solution at low temperature / O.P. Malyk // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Physical and Mathematical Sciences». 2008. N 625. P.86-89.
- 81.Malyk O.P. Peculiarities of electron interaction with the short-range potential of crystal defects in CdHgTe solid solution at low temperature / O.P. Malyk // New technologies. - 2008. – N 1(19). - P.125-128.
- 82.Malyk O.P. Heavy hole scattering on the short-range potential of crystal defects in $Zn_xCd_{1-x}Te$ (0.16 $\leq x \leq$ 0.9) solid solution / O.P. Malyk // Bulletin of Lviv Polytechnic National University. Series «Electronics».-2009.-N.646- P.158-164.

DMICT				
3 IVI I (. I	СТ	T	Μ	3

всту	Π
РОЗДІ	IЛ 1. Сучасні уявлення про явища перенесення в сполуках А ^{II} В ^{VI} та
$\mathbf{A}^{\mathbf{III}}\mathbf{B}^{\mathbf{V}}$.	
1.1.	Кристалічна і зонна структура сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$
1.2. I	Розсіяння носіїв заряду в напівпровідникових сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з
Į	довільною ізотропною зоною 49
1.2.	1. Ймовірність переходу 49
1.2.	2. Розсіяння носіїв заряду на іонізованих домішках 54
1.2.	3. Розсіяння носіїв заряду на нейтральних домішках 56
1.2.	4. Розсіяння носіїв заряду на потенціалі статичної деформації 58
1.2	.5. Нормальні коливання кристалічної решітки 62
1.2.	.6. Розсіяння носіїв заряду на акустичних фононах 66
1.2.	.7. Розсіяння носіїв заряду на неполярних оптичних фононах
1.2.	.8. Розсіяння носіїв заряду на полярних оптичних фононах
1.2.	9. Розсіяння носіїв заряду на акустичних коливаннях п'єзоелектрич-
	ного поля
1.3. (Опис явищ перенесення на основі кінетичного рівняння Больцмана 78
1.3.	1. Розв'язок кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу
Į	релаксації
1.3.	2. Розв'язок кінетичного рівняння Больцмана варіаційним методом82
РОЗДІ	ІЛ 2. Близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах
криста	алічної решітки сполук А ^П В ^{VI} та А ^Ш В ^V
2.1. I	Тотенціал іонізованої домішки
2.2. I	Тотенціал нейтральної домішки 89
2.3. I	Тотенціал центру статичної деформації 91
2.4. I	Потенціал взаємодії носіїв заряду з акустичними фононом
2.5.	Потенціал взаємодії носіїв заряду з неполярним оптичним
	фононом113
2.6.	Потенціал взаємодії носіїв заряду з полярним оптичним
	фононом 123

2.7. Розсіяння носіїв заряду на близькодіючому потенціалі п'єзоелектричних
коливань гратки """". 142
2.7.1. Потенціал взаємодії носіїв заряду з акустичними коливаннями
п'єзоелектричного поля 153
2.7.2 Потенціал взаємодії носіїв заряду з оптичними коливаннями
п'єзоелектричного поля 156
Висновки до розділу 2 163
РОЗДІЛ З. Розв'язок стаціонарного рівняння Больцмана для напівпро-
відника з ізотропним законом дисперсії166
3.1. Побудова розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для
напівпровідника з ізотропним законом дисперсії 166
3.2. Обчислення множників $K^{nm}_{\beta\alphaa}$ при коефіцієнтах розкладу в ряд за
степенями енергії нерівноважної функції розподілу для різних механізмів
розсіяння
3.2.1. Близькодіючий потенціал іонізованої домішки 192
3.2.2. Близькодіючий потенціал нейтральної домішки 196
3.2.3. Близькодіючий потенціал центру статичної деформації 199
3.2.4. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з акустичним
фононом
3.2.5. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з неполярним
оптичним фононом207
3.2.6. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з полярним
оптичним фононом 212
3.2.7. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з акустичними
коливаннями п'єзоелектричного поля 217
3.2.8. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з оптичними
коливаннями п'єзоелектричного поля 221
3.2.9. Випадок розсіяння на близькодіючому потенціалі
невпорядкованості
3.3. Розв'язок рівняння нейтральності

Висновки до розділу 3	
РОЗДІЛ 4. Застосування принципу близькодії до опису процесії	в розсіяння
електронів в твердих розчинах сполук А ^{II} В ^{VI} та А ^{III} В ^V	236
4.1. Параметри твердого розчину Cd _x Hg _{1-x} Te	
4.2. Температурні залежності рухливості електронів	
в твердому розчині Cd _x Hg _{1-x} Te	
4.3. Параметри твердого розчину Cd _x Hg _{1-x} Se	245
4.4. Температурні залежності рухливості електронів	
в твердому розчині Cd _x Hg _{1-x} Se	
4.5. Параметри твердого розчину Zn _x Hg _{1-x} Te	256
4.6. Температурні залежності рухливості електронів	
в твердому розчині Zn _x Hg _{1-x} Te	
4.7. Параметри твердого розчину Zn _x Hg _{1-x} Se	
4.8. Температурні залежності рухливості електронів	
в твердому розчині Zn _x Hg _{1-x} Se	
4.9. Параметри GaN	
4.10. Температурні залежності рухливості електронів в GaN	
4.11. Параметри ZnO	
4.12. Температурні залежності рухливості електронів в ZnO	
4.13. Параметри CdS	
4.14. Температурні залежності рухливості електронів в CdS	
4.15. Параметри InN	292
4.16. Температурні залежності рухливості електронів в InN	293
4.17. Параметри InSb	297
4.18. Температурні залежності рухливості електронів в InSb	
Висновки до розділу 4	302
РОЗДІЛ 5. Розсіяння важких дірок на близькодіючому	потенціалі
кристалічних дефектів в сполуках А ^{II} В ^{VI} та А ^{III} В ^V	304
5.1. Температурні залежності рухливості важких дірок	
в твердому розчині Cd _x Hg _{1-x} Te	304

		010
	5.2. Параметри твердого розчину $Zn_xCd_{1-x}Te$	313
	5.3. Температурні залежності рухливості важких дірок	
	в твердому розчині Zn _x Cd _{1-x} Te	. 316
	5.4. Температурні залежності рухливості важких дірок в GaN	. 322
	Висновки до розділу 5	.326
ł	Висновки	. 327
(Список використаних джерел	. 329
J	Додаток	361

36
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 А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V. Ці напівпровідникові сполуки, зокрема, телуриди ртуті, кадмію, цинку, селенід цинку та нітриди елементів III групи, є перспективними матеріалами для оптоелектроніки завдяки можливості приладів, їхній електронних виготовлених на основі, реєструвати випромінювання в широкому діапазоні електромагнітного спектра, а також завдяки низці інших унікальних властивостей, притаманних цим матеріалам. Тому дослідження властивостей цих матеріалів 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 моде-лей 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.

Зв'язок 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 А^{II}В^{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).

Мета і завдання дослідження

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 вирішувалися такі завдання:

- Вибір близькодіючого потенціалу розсіяння носіїв заряду на різного типу дефектах кристалічної решітки 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 решітки 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 решітки.

Методи дослідження

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

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 $r = \gamma_{II} a_0$ (γ_{III} – 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 $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ 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 напів-провідникового 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 [29,36,37,43-45,62-66,75,79,135,161-163,185,186,213,234,248,273,312] написані автором самостійно. У працях, опублікованих зі співавторами [30,76-78,134,278,280,294,295, 329,331], дисертанту належить визначальна роль у постановці задачі, розробці інтерпретації результатів досліджень, фізичних моделей та підготовці публікацій. На міжнародних конференціях, де доповідали результати роботи, 47 доповідей [32-35,39-42,46-49,67-72,80,81,136автор представив 140,187,188,208-212,214,235-238,274-277,296 ,297,313,314,326-328] (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 таких 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); The European Material Conference EMRS (Strasbourg, France, 2002, 2004); I Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Одеса, 2002); Symposium on Solid Solution of the II-VI Compounds - Growth, Characterization and Applications (Zakopane, Poland, 2002); I міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка і мікросенсорні технології» СЕМСТ-1 (Одеса, 2004); II Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Чернівці, 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); V міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників» (Дрогобич, 2005); 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); International conference "Nanoelectronic devices for defence & security" NANO-DDS-2007 (Arlington, USA, 2007); 12th International Conference on Defects - Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors DRIP XII (Berlin, Germany, 2007); 13th International Conference on II-VI Compounds (Korea, 2007); III Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Одеса, 2007); III міжнародна науково-практична конференція «Матеріали електронної техніки та сучасні інформаційні технології» (Кременчук, 2008); 3-я Міжнародна науковотехнічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» CEMCT-3 (Одеса, 2008); International Conference on Optical, Optoelectronic and Photonic Materials and Applications (Edmonton, Canada, 2008); VI Міжнародна школа-конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників" (Дрогобич,

2008, 2013); XII Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок і наноструктур МКФТТПН-ХІІ (Івано-Франківськ, 2009); 25th International conference on defects in semiconductors ICDS-25 (St. Petersburg, 2009); 2009 Nanoelectronic Devices for Defense & Security (NANO-DDS) Conference (Fort Lauderdale, USA, 2009); 14th International Conference on II-VI Compounds. (St. Petersburg, 2009); European Materials Research Society (E-MRS) 2009 Fall Meeting (Warsaw, 2009); 13th International Conference on Defects-Recognition, Imaging and Physics in Semiconductors DRIP-XIII (Wheeling, USA, 2009); Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (Запоріжжя, 2009. 2013); 9th International Conference on Nitride Semiconductors ICNS-9 (Glasgow, Scotland, 2011); 26th International Conference on Defects in Semiconductors ICDS-26 (Nelson, New-Zealand, 2011); Nanoelectronic Devices for Defense & Security (NANO-DDS 2011) Conference (New York. USA, 2011); 14th 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); 21 European Workshop on Heterostructure Technology (Barcelona, Spain, 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.

Структура й обсяг дисертації

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.

РОЗДІЛ І

Сучасні уявлення про явища перенесення в сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$

1.1. Кристалічна і зонна структура твердих розчинів сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V

В умовах термодинамічної рівноваги сполуки $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ кристалізуються в кубічній структурі сфалериту (структурі цинкової обманки) або в гексагональній структурі вюртциту [1] (рис. 1.1). Кристалічну решітку сфалериту можна уявити у вигляді двох гранецентрованих кубічних решіток, зсунутих одна відносно іншої на вздовж просторової діагоналі куба на 1/4 її довжини.



Рис. 1.1. Кристалічна структура сфалериту (а) та вюртциту (б).

Одна підрешітка складається з атомів катіонів, друга – з атомів аніонів. Атоми катіонів розподілені по вузлам підрешітки випадковим чином і їх середня густина розподілу відповідає мольному складу *x*. Решітка сфалериту подібна до решітки алмазу, однак, внаслідок відмінності атомів не має центру інверсії. Кожен іон решітки сфалериту оточений чотирма сусідами першого порядку –

атомами протилежного типу, розміщеними у вершинах правильного тетраедру на відстані ~ 0.43 постійної решітки.

Зона Бриллюена структури цинкової обманки має форму октаедра з відрізаними шістьма вершинами. Теоретико-груповий аналіз показує [2], що в точці Γ (центрі зони) може реалізуватися максимум або мінімум енергетичної зони.

При врахуванні спін-орбітальної взаємодії в точці Γ мають місце двократні Γ_6^{\pm} , Γ_7^{\pm} та чотирикратні Γ_8^{\pm} представлення. В якості базових функцій для представлень Γ_6 , Γ_7 та Γ_8 вибирають функції Ψ_m^{j} [3,4]:

$$\Gamma_{6} \begin{cases} \Psi_{l/2}^{1/2} = iS\alpha \\ \Psi_{-1/2}^{1/2} = iS\beta \end{cases}; \qquad \Gamma_{7} \begin{cases} \Psi_{l/2}^{1/2} = -\frac{1}{\sqrt{3}}(X + iY)\beta - \frac{1}{\sqrt{3}}Z\alpha \\ \Psi_{-1/2}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{3}}(X - iY)\alpha - \frac{1}{\sqrt{3}}Z\beta \end{cases};$$

$$(1.1)$$

$$\Gamma_{8} = \begin{cases} \Psi_{3/2}^{3/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \alpha \\ \Psi_{-3/2}^{3/2} = -\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \beta \\ \Psi_{1/2}^{3/2} = \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \beta - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \alpha \\ \Psi_{-1/2}^{3/2} = -\frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \alpha - \sqrt{\frac{2}{3}} Z \beta \end{cases}$$

де j – значення повного моменту імпульсу в одиницях \hbar ; m – магнітне квантове число; S, X, Y, Z - хвильові функції при k = 0, які мають відповідно S, P_x , P_y , P_z - симетрію; α , β - спінори Паулі.

Виходячи з властивостей симетрії та використовуючи експериментальні дані, Кейн [5-7] з допомогою kp – методу розрахував форму зон в кристалах з структурою цинкової обманки в околиці точки Γ . В наближенні трьох зон "взаємодія" найближчих зон Γ_6 , Γ_7 та Γ_8 , об'єднаних в один клас А згідно

Льовдина [2], враховується точно, а внесок віддалених зон враховується згідно теорії збурень з точністю до членів, пропорційних κ^2 .

Якщо вибрати в якості базисних функцій три функції p – типу (P_x , P_y , P_z) для валентної зони і функцію S - типу для зони провідності, то секулярне рівняння для визначення закону дисперсії $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{k})$ приймає наступний вид:

$$(\varepsilon' + \varepsilon_g) \left[\varepsilon'(\varepsilon' + \varepsilon_g)(\varepsilon' + \varepsilon_g + \Delta) - k^2 P^2(\varepsilon' + \varepsilon_g + \frac{2}{3}\Delta) \right] = 0 , \qquad (1.2)$$

де
$$\varepsilon'(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2 m_0}$$
 (m₀- маса електрона); $P = -\frac{i \hbar}{m_0} \langle S | \hat{p}_x | X \rangle$ -

матричний елемент "взаємодії" зони провідності та валентної зони; $\Delta = -\frac{3i\hbar}{4m_0^2c^2} \langle X | \left[\nabla V \hat{p} \right] | Z \rangle - спін-орбітальне розщеплення між зонами \Gamma_7 та$

 Γ_8 (*V*(*r*) – періодичний потенціал кристалу); $\varepsilon_g = \varepsilon(\Gamma_6) - \varepsilon(\Gamma_8)$ - ширина забороненої зони при k = 0 (при цьому ε_g може бути більше, менше або рівне нулю), а початок відліку енергії вибрано в точці Γ_6 (рис. 1.2).



Рис. 1.2. Модель Кейна країв зони провідності та валентної зони для напівпровідникових сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$. $a - \varepsilon_g > 0$, $b - \varepsilon_g < 0$.

З рівняння (1.2) випливає, що чотирьом власним значенням енергії ε' для $\mathbf{k} = 0$ відповідають значення $\varepsilon'_1 = 0$, $\varepsilon'_2 = \varepsilon'_3 = -\varepsilon_g$, $\varepsilon'_4 = -\varepsilon_g - \Delta$. Енергія ε'_1 ототожнюється з дном зони провідності, енергія ε'_2 та ε'_3 - з вершинами валентних зон важких та легких дірок, а ε'_4 - з вершиною відщепленої за рахунок спін-орбітальної взаємодії валентною зоною.

Закон дисперсії зони важких дірок $\varepsilon'_2(k)$, що визначається з рівняння (1.2), описує зону з додатною кривизною. Таким чином, наближення трьох зон виявляється недостатнім для опису валентної зони Γ_8 . Правильна (від'ємна) кривизна зони важких дірок обумовлена виключно членами kp – взаємодії з віддаленими зонами. В той же час трьохзонне наближення є прийнятне для опису спектра зони провідності в достатньо широкому енергетичному інтервалі і правильно відображає залежність ефективної маси електрона від параметра ε_g та квазіімпульсу $\hbar k$.

Слід відзначити, що для кейнівської моделі зонної структури вузькощілинних напівпровідників $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ характерна достатньо сильна непараболічність енергетичного спектру і дуже мала ефективна маса носіїв заряду, що різко змінюється при зміщенні від екстремуму зони. Тому мала концентрація вільних носіїв заряду приводить до більш високого заповнення зони в порівняння з параболічним законом дисперсії. Як наслідок, рівень Фермі різкіше наближається до відповідної зони або заходить в неї. Це приводить до необхідності використовувати вироджену, а не класичну статистику носіїв заряду, що, в свою чергу, накладає відбиток на явища перенесення у вузькощілинних та безщілинних напівпровідниках.

1.2. Розсіяння носіїв заряду в напівпровідникових сполуках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V з довільною ізотропною зоною

1.2.1. Ймовірність переходу

Для розрахунку кінетичних коефіцієнтів необхідно визначити ймовірність переходу носія заряду W(k,k') з початкового стану k в кінцевий стан k' внаслідок розсіяння на дефектах кристалічної решітки. Знаходження ймовірності переходу є задачею квантової теорії розсіяння. Вона розв'язується на основі методу нестаціонарної теорії збурень [8]. Загальний гамільтоніан електрона в реальній кристалічній решітці представляється у виді:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' , \qquad (1.3)$$

де \hat{H}_0 - незбурений гамільтоніан, який у випадку розсіяння на домішках (дефектах) представляє собою гамільтоніан електрона в ідеальній кристалічній гратці $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2 m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$, а у випадку розсіяння на фононах гамільтоніан \hat{H}_0 включає в себе також і гамільтоніан ідеального фононного газу, що не взаємодіє з електроном; \hat{H}' описує взаємодію електрона з домішками (дефектами) або фононами, яка вважається малим збуренням.

Стаціонарний розв'язок незбуреної задачі з гамільтоніаном \hat{H}_0 має вид:

$$\Psi_n(t) = \Psi_n \exp(-i\varepsilon_n t/\hbar) , \qquad (1.4)$$

де ψ_n та ε_n - власні функції и власні значення рівняння

$$H_0 \psi_n = \varepsilon_n \psi_n, \tag{1.5}$$

а *n* означає сукупність дискретних та квазідискретних квантових чисел, що визначають стани електрона в ідеальні кристалічний гратці (випадок розсіяння на дефектах) або електрона і фононного газу (випадок розсіяння на фононах).

Для знаходження розв'язку збуреної задачі з гамільтоніаном (1.3) використовують загальне рівняння Шредінгера:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}')\Psi \quad . \tag{1.6}$$

Хвильова функція Ψ розкладається в ряд по власним функціям (1.4) незбуреної задачі з гамільтоніаном \hat{H}_0 :

$$\Psi(t) = \sum_{n} a_n(t) \psi_n \exp(-i\varepsilon_n t/\hbar) .$$
(1.7)

Підставимо (1.7) в (1.6) і приймемо до уваги (1.5). Отримане рівняння зліва помножимо на $\psi_{n'}^*$ і проінтегруємо по всьому об'єму кристала (випадок розсіяння на дефектах) або проінтегруємо по об'єму кристала та по всім нормальним коливанням кристалічної решітки (випадок розсіяння на фононах). Якщо скористатися ортонормованістю власних функції ψ_n , то отримаємо наступну систему рівнянь для коефіцієнтів розкладу:

$$\frac{d a_{n'}}{d t} = \frac{1}{i \hbar} \sum_{n} \langle n' | \hat{H}' | n \rangle a_n(t) \exp(i\omega_{n'n}t) , \qquad (1.8)$$

де $\omega_{n'n} = (\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)/\hbar$, а

$$\langle n' \left| \hat{H}' \left| n \right\rangle = \int \psi_{n'}^* \hat{H}' \psi_n \, d \, \boldsymbol{r}$$
 (1.9)

- матричний елемент збурення, розрахований на відомих хвильових функціях рівняння (1.5).

Система рівнянь (1.8), яка еквівалентна вихідному рівнянню Шредінгера (1.6), дає можливість визначити коефіцієнти $a_{n'}(t)$, якщо відомі розв'язки незбуреної задачі (1.5) та величина збурення \hat{H}' . Згідно квантової механіки величина $|a_{n'}(t)|^2$ представляє собою ймовірність виявити систему в момент часу t в стані n'. Тому в будь-який момент часу виконується умова $\sum_{n'} |a_{n'}(t)|^2 = 1.$

Систему (1.8) можна розв'язати наближено, вважаючи збурення малим: $\hat{H}' \ll \hat{H}_0$. Для цього коефіцієнт $a_n(t)$ представляється у виді степеневого ряду по степеням \hat{H}' :

$$a_n = a_n^{(0)} + a_n^{(1)} + a_n^{(2)} + \dots$$
(1.10)

Підставляючи (1.10) в (1.8), можна розв'язати систему методом ітерацій. Припустимо, що до моменту включення збурення система знаходилася у визначеному квантовому стані n. Тоді, якщо збурення починає діяти при $t \ge 0$, то $\Psi(t \le 0) = \psi_n$. Це означає, що коефіцієнт в нульовому наближенні $a_n^{(0)} = 1$ тільки для даного значення n, а для всіх інших значень індексу рівний нулю. Підстановка $a_n^{(0)} = 1$ в праву частину (1.8) дає просте рівняння для $a_n^{(1)}$. Інтегруючи це рівняння, отримаємо:

$$a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle n' | \hat{H}' | n \rangle \exp(i\omega_{n'n}t') dt' .$$
(1.11)

Використовуючи цей вираз в правій частині (1.8), можна отримати коефіцієнти другого порядку $a_n^{(2)}$ і т.д.

Якщо за час дії збурення гамільтоніан \hat{H}' залишається постійним, то матричний елемент (1.11) можна винести за знак інтеграла. Тоді з (1.11) отримаємо:

$$a_n^{(1)}(t) = \langle n' | \widehat{H'} | n \rangle \frac{1 - exp(i\omega_{n'n}t)}{\hbar \omega_{n'n}} .$$
(1.12)

Таким чином, в першому наближенні теорії збурень ймовірність того, що в момент часу t система буде знаходитися в стані n', рівна:

$$\left|a_{n}^{(1)}(t)\right|^{2} = \left|\left\langle n'\right|\widehat{H}'\left|n\right\rangle\right|^{2} \frac{2\left[1-\cos\left(\omega_{n'n}t\right)\right]}{\hbar^{2}\omega_{n'n}^{2}}.$$
(1.13)

В початковий момент часу t=0 система знаходилася в стані n, потім завдяки дії збурення \hat{H}' в момент часу t вона перейшла в стан n' з ймовірністю (1.13). Тоді, диференціюючи (1.13), для ймовірності переходу $n \rightarrow n'$ за одиницю часу отримаємо:

$$W(n,n') = \left| \left\langle n' \right| \widehat{H}' \left| n \right\rangle \right|^2 \frac{2 \sin(\omega_{n'n} t)}{\hbar^2 \omega_{n'n}} .$$
(1.14)

В цьому виразі $t \in$ час, що пройшов після початку дії збурення H'. Цей час необхідно взяти достатньо великим, щоб процес розсіяння повністю завершився. Тоді, приймаючи до уваги відому асимптотику для δ - функції

$$\lim \frac{\sin(\omega_{n'n}t)}{\omega_{n'n}} = \pi \,\delta(\omega_{n'n}) = \pi \,\delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) , \qquad (1.15)$$

з (1.14) отримаємо остаточний вираз для ймовірності переходу за одиницю часу:

$$W(n,n') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle n' \right| \hat{H}' \left| n \right\rangle \right|^2 \delta\left(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n \right).$$
(1.16)

Ця формула лежить в основі теорії розсіяння носіїв струму і тим самим теорії явищ перенесення у напівпровідниках [9,10].

Застосуємо формулу (1.16) для опису процесу розсіяння носія заряду на атомах домішок (іонізованих або нейтральних) та дефектах решітки при низьких температурах, коли коливання решітки неінтенсивні, а фононний газ є розріджений. У цьому випадку збуренням є потенціал, створений всіма атомами домішок (дефектів) у довільній точці:

$$\widehat{H}' = \sum_{j=1}^{N} U(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_{j}), \qquad (1.17)$$

де $U(\mathbf{r})$ - потенціал домішки (дефекту); \mathbf{R}_j - координата домішки (дефекту); N – загальне число домішок (дефектів) у кристалі.

Незбуреним станом в цьому випадку є стан електрона (дірки) в ідеальній решітці без коливань. Тому достатньо характеризувати стан носія заряду n хвильовим числом k та енергією $\varepsilon(k)$.

Тоді з (1.16) ймовірність переходу $k \to k'$ буде мати вид:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int \psi_{\boldsymbol{k}'}^*(\boldsymbol{r}) \sum_{j=1}^N U(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_j) \int \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} \right|^2 \delta(\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n) . \quad (1.18)$$

Якщо при обчисленні матричного елементу (1.18) обмежитися наближенням ефективної маси і при розрахунках замінити функцію Блоха $\psi_k(\mathbf{r})$ хвильовою функцією вільного електрона з ефективною масою, нормованою на об'єм кристалу V

$$\psi_{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}) , \qquad (1.19)$$

а також використати некогерентність розсіяння носіїв заряду на атомах домішок (дефектах), то для ймовірності розсіяння отримаємо:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{V} \left| \int U(\boldsymbol{r}) \exp\left[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}\right] d\boldsymbol{r} \right|^2 \delta\left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}\right), \quad (1.20)$$

де $N_i = \frac{N}{V}$ - концентрація атомів домішок (дефектів).

1.2.2. Розсіяння носіїв заряду на іонізованих домішках

Позитивно або негативно заряджений іон домішки створює в кристалічній решітці напівпровідника далекодіюче кулонівське поле з потенціалом :

$$\varphi(r) = \pm \frac{l}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e}{\kappa r} , \qquad (1.21)$$

де κ - діелектрична проникність напівпровідника; ε_0 – діелектрична стала. Якщо в (1.20) використати в якості потенціалу збурення $U(r) = e \varphi(r)$ і розрахувати час релаксації τ , то видно, що величина τ^{-1} логарифмічно розходиться і, отже, поняття рухливості носія заряду втрачає сенс. Для отримання скінченого часу релаксації (і, відповідно, рухливості) Конуелл та Вайскопф [11] запропонували обмежити сферу дії іона величиною, рівною половині середньої відстані між сусідніми атомами домішки. Цей штучний прийом дає якісно правильний результат для температурної залежності рухливості носіїв заряду при низьких температурах.

Більш строгий розгляд питання про розсіяння носіїв заряду на на іонізованих дефектах полягає у врахуванні [12] екранування кулонівського

потенціалу носіями заряду. При цьому потенціал однократно іонізованого домішкового атому набуває виду:

$$\varphi(r) = \pm \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e}{\kappa r} exp(-\frac{r}{r_0}) , \qquad (1.22)$$

де r_0 - так званий радіус екранування поля іона, що для випадку однократно іонізованих донорів та акцепторів визначається з виразу [13] :

$$\frac{1}{r_0^2} = \frac{e^2}{\kappa \,\varepsilon_0 \,k_B T} \left[n - p - \left(N_D^+ - \frac{N_D^{+2}}{N_D} \right) - \left(N_A^- - \frac{N_A^{-2}}{N_A} \right) \right], \tag{1.23}$$

де *n*, *p* - концентрація електронів та дірок; N_D^+ , N_D^- , N_A^- , N_A концентрація іонізованих та нейтральних донорів і акцепторів; k_B - постійна Больцмана.

Використовуючи енергію збурення $U = e\varphi(r) = \pm \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{\kappa r} exp(-\frac{r}{r_0})$ у виразі (1.20) та приймаючи до уваги сферичну симетрію потенціалу, для ймовірності переходу отримаємо:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{V} \left(\frac{e^2}{\kappa \varepsilon_0}\right)^2 \frac{\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}})}{\left[(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')^2 + r_0^{-2}\right]^2} .$$
(1.24)

Однак, описана вище модель розсіяння носія заряду на іонізованій домішці має наступні недоліки:

 Вона є далекодіючою, тобто, припускається, що носій заряду взаємодіє з потенціалом домішки, радіус дії якого рівний радіусу екранування r₀.
 Попередній розрахунок цієї величини показує, що вона може знаходитися в межах від ~ 50 a_0 (a_0 - стала решітки) для вузькозонних твердих розчинів Cd_xHg_{1-x}Te i Cd_xHg_{1-x}Se до ~ $10^4 a_0$ для широкозонних твердих розчинів Zn_xCd_{1-x}Te та Zn_xHg_{1-x}Se. Таке припущення суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу. 2. В межах дії потенціалу (1.22) на відстанях ~ $10 a_0$ від домішки величина потенціальної енергії зменшується на порядок, тобто, стає величиною другого порядку малості в порівнянні з періодичним полем кристалу. Однак, згідно (1.13) вся розглянута модель є вірною в першому наближенні теорії збурень. Тобто, розглянута модель містить і математичну суперечність.

3. В цій моделі (див. (1.22)) використовується макроскопічний параметр діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах.

1.2.3. Розсіяння носіїв заряду на нейтральних домішках

При зниженні температури носії заряду "виморожуються" і при достатньо низьких температурах в напівпровіднику з одним типом домішок число нейтральних атомів домішки стає більшим числа іонізованих домішок. При цих умовах основну роль відіграє розсіяння на нейтральних атомах домішки. Розсіяння на нейтральних атомах домішки можна наближено розглядати як *m*^{*} на атомі розсіяння повільних електронів (дірок) з ефективною масою що занурений В середовище 3 діелектричною проникністю водню, напівпровідника к . В цьому випадку, згідно роботи [14] ефективний транспортний переріз нульового порядку σ_c (тобто, для розсіяних носіїв з орбітальним моментом l = 0) визначається з виразу:

$$\sigma_c = \frac{20 a_B \kappa}{k} , \qquad (1.25)$$

де a_B - радіус Бора, $\boldsymbol{k} = \frac{m^* \boldsymbol{v}}{\hbar}$ (\boldsymbol{v} - швидкість носія).

Тоді час релаксації при розсіянні на нейтральній домішці визначається з виразу – так званої формули Ерджинсоя [15, 16]:

$$\frac{1}{\tau} = N_0 v \,\sigma_c = \frac{20 \,N_0 \,4\pi\varepsilon_0 \kappa \,\hbar^3}{m^{*2} e^2} \,, \tag{1.26}$$

де N₀ - концентрація нейтральних домішок.

Якщо виходити з виразу, що зв'язує час релаксації та ймовірність переходу

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2V}{\left(2\pi\right)^3} \int W(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \left(1 - \cos\theta\right) d\boldsymbol{k}' , \qquad (1.27)$$

де θ - кут між векторами k та k', то з (1.26) отримаємо вираз для ймовірності переходу при розсіяння носія заряду на нейтральній домішці:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{20 \,\pi^2 a_B \,\kappa \,N_0 \,\hbar^3}{V \,m^{*2} k'} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) \,. \tag{1.28}$$

Відносно виразу (1.28) необхідно зробити ряд зауважень:

1) радіус дії потенціалу нейтрального дефекту рівний радіусу Бора (має місце розсіяння на атомі водню);

2) В цій моделі використовується макроскопічний параметр - діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах, тобто, має місце то й же недолік, що і в моделі розсіяння на іонізованій домішці.

1.2.4. Розсіяння носіїв заряду на потенціалі статичної деформації

Відомо, що статичні деформації в п'єзоелектричних сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ можуть спричиняти виникнення електричного поля, яке, в свою чергу, буде впливати на розсіяння, а, отже, й на рухливість носіїв заряду. Електричний потенціал, що виникає завдяки статичному напруженню, є подібний до потенціалу точкового диполя.

Згідно теорії пружного континуума [17] деформаційний дефект породжує зміщення решітки, пропорційне r^{-2} , та поле напружень, пропорційне r^{-3} , на відстанях r, які набагато більші від розмірів дефекту. В роботі [18] запропонована модель дефекту в п'єзоелектричному напівпровіднику, в якій зміщення решітки має вид:

$$Q(\mathbf{r}) = \frac{b_0 \, \mathbf{r}}{r^3} \,, \tag{1.29}$$

де b_0 - величина, яка має розмірність довжини і пов'язана з розміром дефекту.

Необхідно відзначити, що (1.29) описує сферично симетричне зміщення. Зміщення решітки (1.29) породжує поле деформацій:

$$S_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial Q_i}{\partial r_j} + \frac{\partial Q_j}{\partial r_i} \right] = \frac{\left(r^2 \,\delta_{ij} - 3 \,r_i \,r_j\right) b_0}{r^5} , \qquad (1.30)$$

де δ_{ii} - символ Кронекера.

В присутності поля деформацій рівняння, що зв'язує електричні індукцію *D* і напруженість *E* та поле деформацій, має вид [19]:

$$D_i = \kappa \,\varepsilon_0 \, E_i + e_{ijk} \, S_{jk} \, , \qquad (1.31)$$

де e_{ijk} - п'єзоелектричний тензор третього порядку, а в (1.31) використано правило сумування по індексам, що повторюються, яке застосовують в тензорному аналізі,

В 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 рівна нулю.

Рівняння

$$\nabla \boldsymbol{D} = \boldsymbol{0} \tag{1.32}$$

та

$$\boldsymbol{E} = -\nabla \, \boldsymbol{\varphi} \tag{1.33}$$

разом з (1.31) дають:

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = -4 \pi \rho(\mathbf{r}) , \qquad (1.34)$$

де $\rho(\mathbf{r})$ - густина заряду, яка визначається з виразу:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{e_{ijk} S_{jk}(\mathbf{r})}{\kappa \varepsilon_0} \right].$$
(1.35)

Використовуючи (1.31), отримаємо :

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{90 \, b_0^3 \, e_{14}}{\kappa \, \varepsilon_0} \frac{x \, y \, z}{r^7} \,. \tag{1.36}$$

Рівняння (1.34) та (1.36) можуть бути розв'язані шляхом використання Фур'є – перетворення. Тоді (1.34) приводиться до виду:

$$\boldsymbol{k}^{2}\varphi(\boldsymbol{k}) = 4\pi\,\rho(\boldsymbol{k})\,,\qquad(1.37)$$

де *k* - хвильовий вектор.

При цьому Фур'є – перетворення $\rho(\mathbf{r})$ проводиться наступним чином [18]: а) радіальна частина інтегралу Фур'є обмежується знизу деяким малим значенням r_{min} ; б) проводиться інтегрування по кутовим змінним; в) обчислюється величина інтеграла Фур'є у випадку, коли $\lim r_{min} \to 0$.

В результаті отримаємо:

$$\varphi\left(\boldsymbol{k}\right) = \frac{24 \pi i e_{14} b_0^3}{\kappa \varepsilon_0} \frac{k_x k_y k_z}{k^4} , \qquad (1.38)$$

$$\varphi\left(\boldsymbol{r}\right) = \frac{9\,e_{14}\,b_0^3}{\kappa\,\varepsilon_0}\,\frac{x\,y\,z}{r^5}\,.\tag{1.39}$$

Якщо прийняти до уваги ефекти екранування, то для відповідних потенціалів отримаємо:

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{24 \pi i e_{14} b_0^3}{\kappa \varepsilon_0} \frac{k_x k_y k_z}{k^2 (k^2 + k_s^2)}, \qquad (1.38a)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{9 e_{14} b_0^3}{\kappa \varepsilon_0} \left(\frac{\partial A}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial y} + \frac{\partial A}{\partial z} \right), \qquad (1.39a)$$

де
$$A = r_0^2 [1 - exp(-r/r_0)]; k_s = \frac{1}{r_0}.$$

Звідси видно, що $\varphi(\mathbf{r})$ пропорційний r^{-2} при $r << r_0$ і пропорційний r^4 при $r >> r_0$.

При заданому потенціалі (1.39) можна обчислити час релаксації та, відповідно, рухливість, використовуючи то й же метод, що і для випадку розсіяння на іонізованій домішці [20]. При цьому виконується наступна процедура - величина $|\varphi(k)|^2$ замінюється усередненим по кутовим змінним аналогом $|\overline{\varphi}(k)|^2$, де

$$\left| \overline{\varphi}(\boldsymbol{k}) \right|^{2} = \langle \left| \varphi(\boldsymbol{k}) \right|^{2} \rangle = \frac{3 \cdot 2^{6} \pi^{2}}{35} \left(\frac{e_{14} b_{0}^{3}}{\kappa \varepsilon_{0}} \right)^{2} \frac{1}{k^{2}} .$$
(1.40)

Тоді час релаксації, розрахований в наближенні ефективної маси, має вид:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3 \cdot 2^5 \pi}{35} \left(\frac{e \, e_{14} \, b_0^{\ 3}}{\kappa \, \varepsilon_0} \right)^2 \frac{m^* \, N_0}{\hbar^3 \, k} \,, \tag{1.41}$$

де N₀ - концентрація "модельних дефектів", що створюють поле статичної деформації.

Відповідно, рухливість носія заряду може бути обчислена з виразу:

$$\mu = \frac{35}{2^2 \cdot 3^2 \pi} \left(\frac{\kappa \,\varepsilon_0 \,\hbar}{e \,e_{14} \,b_0^{\ 3} \,m^*} \right)^2 \left(\frac{2 \,m^* \,k_B \,T}{\pi} \right)^{1/2} \frac{e}{N_0} \quad . \tag{1.42}$$

Однак, розглянута модель розсіяння носія заряду на потенціалі статичної деформації має наступні недоліки:

1) В цій моделі використовується макроскопічний параметр - діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах.

2) Використання цієї моделі для опису процесів розсіяння важких дірок в твердому розчині $Cd_xHg_{1-x}Te$ [13] дає добре узгодження з експериментом при умові, що параметр b_0 має значення ~ 40 A . Якщо порівняти це значення з постійною решітки $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($a_0 \approx 6 A$), то видно, що "модельний дефект" не є точковим і, відповідно не може описуватися потенціалом (1.39).

1.2.5. Нормальні коливання кристалічної решітки

У випадку розсіяння носія заряду на коливаннях кристалічної решітки розглядається один електрон в зоні провідності (або одна дірка в валентній зоні) в решітці. Нехай кристалічна решітка складається з N елементарних комірок, кожна з яких містить s атомів або іонів. Вектор зміщення k-го атома в n-ій комірці представляється у виді [21]:

$$\boldsymbol{Q}_{nk} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q} j} \left[\boldsymbol{e}_{k j}(\boldsymbol{q}) b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) + \boldsymbol{e}_{k j}^{*}(\boldsymbol{q}) b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \right], \quad (1.43)$$

де $b_j(q) \sim exp[-i\omega_j(q)t]$ - комплексні нормальні координати, що гармонічно залежать від часу; a_n - вектор решітки, що відповідає положенню *n*- ої комірки; $e_{kj}(q)$ - деякий вектор, що визначає напрям коливання *k*-го атома, коли він приймає участь в утворенні монохроматичної хвилі з хвильовим вектором q, який відповідає j – ій гілці, тобто, з частотою $\omega_j(q)$. Цей вектор характеризується властивістю [10]:

$$\boldsymbol{e}_{k\,j}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{e}_{k\,j}^{*}(-\boldsymbol{q}) \tag{1.44}$$

та задовольняє умові ортонормованості

$$\sum_{k=1}^{s} M_{k} e_{k j}^{*}(q) e_{k j'}(q) = M \delta_{j j'}, \qquad (1.45)$$

де
$$M = \sum_{k=1}^{s} M_k$$
 - маса елементарної комірки

Хвильовий вектор q змінюється в межах першої зони Бриллюена і приймає N значень. Спектр частоти складається з 3s гілок, тобто, число можливих частот рівно 3Ns - числу ступенів свободи кристалу (рис.1.3).



Рис. 1.3. Схематична залежність $\omega_j(q)$ для акустичних та оптичних гілок коливань.

Залежність ω від q можна аналітично записати для випадку довгих хвиль, коли $a_0 q \ll 1$. З 3 *s* гілок 3 є акустичними і при малих q маємо :

$$\omega_j(q) = v_{0j}q$$
, $j = 1, 2, 3,$ (1.46)

а решта 3 *s* - 3 мають оптичний характер: $\omega_j(q \rightarrow 0) = \omega_{0j}$ і при $a_0 q \ll 1$ характеризуються слабою дисперсією

$$\omega_j(q) = \omega_{0j} - \alpha_j q^2$$
, $j = 4, 5..., 3s$, (1.47)

де α_j - постійна величина; v_{0j} - швидкість поздовжніх та поперечних звукових хвиль у кристалі.

Повну енергію коливань кристалу у квадратичному по зміщенню атомів наближенні можна виразити через комплексні нормальні координати:

$$E = \sum_{q j} \left[\frac{P_{q j}^{2}}{2M} + \frac{M \omega_{q}^{2}(q)}{2} X_{q j}^{2} \right], \qquad (1.48)$$

де дійсні нормальні координати

$$X_{q\,j} = b_j(q) + b_j^{*}(q) , \qquad (1.49)$$

та спряжені їм імпульси

$$P_{\boldsymbol{q}\,j} = M \, \dot{X}_{\boldsymbol{q}\,j} = -i \, M \, \omega_j(\boldsymbol{q}) \Big[b_j(\boldsymbol{q}) - b_j^{*}(\boldsymbol{q}) \Big] \,. \tag{1.50}$$

Видно, що у квазіупружному наближенні повну енергію коливань решітки можна представити як суму енергій 3 N s не взаємодіючих гармонічних осциляторів з частотами $\omega_j(q)$ та масою M. Для квантово-механічного опису коливань решітки необхідно вважати величини $X_{q j}$ та $P_{q j}$ операторами:

 $X_{q\,j} \to \hat{X}_{q\,j}$; $P_{q\,j} \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial X_{q\,j}}$. Тоді гамільтоніан решітки записується у виді:

$$H' = \sum_{q j} \hat{H}_{q j} = \sum_{q j} \frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial X_{q j}^2} + \frac{M \omega_j^2(q)}{2} X_{q j}^2 , \qquad (1.51)$$

де $\hat{H}_{\boldsymbol{q}|i}$ - гамільтоніан осцилятора з частотою $\omega_i(\boldsymbol{q})$.

Розв'язок рівняння Шредінгера для коливань решітки $H'\Phi = E\Phi$ має відомий вигляд:

$$E = \sum_{q,j} \varepsilon_{q,j}, \quad \Phi = \prod_{q,j} \varphi_{N_{q,j}} \left(X_{q,j} \right), \quad (1.52)$$

де $\varepsilon_{q j} = \left(N_{q j} + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_j(q)$ - енергія гармонічного осцилятора з частотою

 $\omega_j(q);$ $N_{q\,j} = 0,1,2...$ - осциляторні квантові числа; $\varphi_{N_{q\,j}}(X_{q\,j})$ - ортонормовані функції гармонійного осцилятора.

З (1.52) видно, що з точки зору квантової механіки повна енергія коливань решітки рівна

$$E = \sum_{\boldsymbol{q} j} \frac{\hbar \omega_j(\boldsymbol{q})}{2} + \sum_{\boldsymbol{q} j} N_{\boldsymbol{q} j} \hbar \omega_j(\boldsymbol{q}) . \qquad (1.53)$$

Перший доданок представляє енергію нульових коливань, другий – енергію збудження гармонійних осциляторів. Оскільки $N_{q\,j}$ приймає тільки цілі значення, то енергія кристалу може мінятися дискретно – кратно $\hbar \omega_j(q)$ на величину енергії фонона. Таким чином, енергію збудженого стану кристалу, тобто, енергію коливань, можна представити як енергію ідеального фононного газу.

Фононний газ – Бозе-газ з хімічним потенціалом, рівним нулю, тому середнє число фононів типу $\omega_j(q)$ з енергією $\hbar\omega_j(q)$ при температурі T визначається функцією Планка :

$$N_{\boldsymbol{q}\,j} = \left\{ exp\left(\frac{\hbar\omega_j(\boldsymbol{q})}{k_BT}\right) - I \right\}^{-1}.$$
(1.54)

Так як носії заряду взаємодіють з фононами, хвильове число яких $q \sim k$, то представляють інтерес зміщення, що відповідають $a_0 q \ll 1$ (довгі хвилі). У цьому граничному випадку дискретність решітки є несуттєва (наближення континуума) і в (1.43) вектор a_n заміняється неперервним радіусом-вектором. Тоді для цього випадку зміщення точки r в кристалі приймає вид:

$$\boldsymbol{Q}_{k}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q} j} \left[\boldsymbol{e}_{k j}(\boldsymbol{q}) \left\{ b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{r}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{r}) \right\} \right].$$
(1.55)

Конкретний вид зв'язку гамільтоніана H' з вектором зміщення $Q_k(r)$ залежить від складності елементарної комірки та від природи хімічного зв'язку в кристалі.

1.2.6. Розсіяння носіїв заряду на акустичних фононах

Розсіяння носіїв заряду на акустичних фононах описується на основі методу потенціалу деформації [22,23]. Ідея методу полягає в наступному: при поширенні в кристалі пружної хвилі, елементарна комірка, деформуючись, змінює свій об'єм (змінюється постійна решітки), що приводить до зміни положення дна зони провідності та стелі валентної зони. Зміна дна зони провідності і є енергією взаємодії електрона провідності з коливаннями решітки. Очевидно, вона повинна бути зв'язана з величиною зміщення (1.55). Відомо, що для акустичних коливань при $q \rightarrow 0$ всі атоми в елементарній комірці коливаються синфазно, тобто вектор $e_{kj}(q)$ від номера атома в елементарній комірці k не залежить. Тому вектор $e_j(q)$ для довгохвильових акустичних хвиль є одиничним згідно (1.44). Тоді для зміщення (1.55) можна записати:

$$\boldsymbol{Q}_{AK}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q}} \sum_{j=1}^{3} \left[\boldsymbol{e}_{j}(\boldsymbol{q}) \left\{ b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) \right\} \right], \quad (1.56)$$

де $e_j(q)$ - одиничний вектор поляризації.

Оскільки при довгохвильових акустичних коливаннях елементарна комірка майже не деформується (коливається тільки центр мас), то енергія взаємодії

електрона не може бути пропорційна самому зміщенню, а повинна бути лінійною функцією від перших похідних зміщення $Q_{AK}(r)$ по координатам:

$$\widehat{H}'_{AK} = E_{AK} \operatorname{div} [\boldsymbol{Q}_{AK}(\boldsymbol{r})], \qquad (1.57)$$

що називається потенціалом деформації, а коефіцієнт пропорційності E_{AK} - константою потенціалу деформації, що підлягає визначенню з експерименту. Значення E_{AK} для електронів та дірок, взагалі кажучи, є різним, так як, краї зон при деформації зміщуються по різному.

Підставляючи (1.56) в (1.57), отримаємо:

$$\widehat{H}'_{AK} = \frac{i E_{AK}}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q}} \sum_{j=1}^{3} \left[\left(\boldsymbol{q} \ \boldsymbol{e}_{j} \right) \left\{ b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \ \boldsymbol{q} \ \boldsymbol{r}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \ \boldsymbol{q} \ \boldsymbol{r}) \right\} \right]. \quad (1.58)$$

Звідси видно, що в ізотропному випадку електрон взаємодіє тільки з поздовжніми довгохвильовими акустичними фононами ($q \mid \mid e_i$).

Матричний елемент збурення \hat{H}'_{AK} в цьому випадку можна представити у виді:

$$\left\langle \mathbf{k}' N_{\mathbf{q}\,j} \right| \hat{H}_{AK}' \left| \mathbf{k} N_{\mathbf{q}\,j} \right\rangle = \frac{i \, E_{AK}}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=1}^{3} (\mathbf{q} \, \mathbf{e}_{j}) / \langle \mathbf{k}' | \exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{r}) / \mathbf{k} \rangle \langle N_{\mathbf{q}\,j}' | b_{j}(\mathbf{q}) / N_{\mathbf{q}\,j} \rangle - \langle \mathbf{k}' | \exp(-i \, \mathbf{q} \, \mathbf{r}) / \mathbf{k} \rangle \langle N_{\mathbf{q}\,j}' | b_{j}^{*}(\mathbf{q}) / N_{\mathbf{q}\,j} \rangle / , \qquad (1.59)$$

де $N_{q j}$ - сукупність 3 N s осциляторних квантових чисел.

Матричний елемент відносно квантових станів електрона обчислюється на основі плоских хвиль і дає:

$$\langle \mathbf{k}' / exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{r}) / \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}} .$$
 (1.60)

Зауважимо, що в (1.60) інтегрування ведеться по всьому об'єму кристалу, тобто припускається, що електрон взаємодіє одночасно зі всім кристалом (принцип далекодії).

Для обчислення матричних елементів відносно нормальних координат решітки використовуються рекурентні співвідношення для осциляторних функцій:

$$\left(X_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}} + \frac{\hbar}{M\omega_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})}\frac{\partial}{\partial X_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}}\right)\varphi_{N_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}}\left(X_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}\right) = \sqrt{\frac{2\,\hbar}{M\omega_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})}N_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}}\varphi_{N_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}-\boldsymbol{l}}\left(X_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}\right)\;;\quad(1.61)$$

$$\left(X_{q\,j} - \frac{\hbar}{M\omega_{j}(q)}\frac{\partial}{\partial X_{q\,j}}\right)\varphi_{N_{q\,j}}\left(X_{q\,j}\right) = \sqrt{\frac{2\,\hbar}{M\omega_{j}(q)}}\left(N_{q\,j} + I\right)\varphi_{N_{q\,j}+I}\left(X_{q\,j}\right).$$
 (1.62)

Використовуючи ці співвідношення, а також умову ортонормованості для осциляторних функцій, отримаємо для ймовірності переходу електрона зі стану *k* в стан *k'* завдяки взаємодії з акустичним фононом наступний вираз:

$$W_{AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{\pi E_{AK}^{2} q^{2}}{N M \omega(q)} \Big[N_{\boldsymbol{q}} \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar\omega(q)) \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + \\ + \left(N_{\boldsymbol{q}} + 1\right) \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar\omega(q)) \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \Big]$$
(1.63)

де $\omega(q)$ - частота поздовжніх акустичних фононів.

Перший доданок в (1.63) є ймовірність переходу $k \to k'$ за рахунок поглинання фонона, другий – за рахунок випромінювання фонона; δ - функції та δ - символи, що входять в (1.63), виражають закон збереження енергії та квазіімпульсу електрона відповідно:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}'} = \varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar \omega \left(q \right), \ \mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \ . \tag{1.64}$$

Видно, що в загальному випадку розсіяння на акустичних фононах має непружний характер. Оцінка ступеню непружності зіткнення дає для цього випадку співвідношення [9] :

$$\frac{\hbar \,\omega\left(q\right)}{\bar{\varepsilon}_{k}} = \frac{\hbar \,v_{0} \,/ k' - k \,/}{\bar{\varepsilon}_{k}} \approx \frac{v_{0} \,\sqrt{m^{*} k_{B} T}}{k_{B} T} = \sqrt{\frac{T_{0}}{T}} << 1 , \qquad (1.65)$$

де $T_0 = m^* v_0^2 / k_B$, v_0 - швидкість звуку в кристалі.

Прийнявши до уваги, що $m^* \approx 10^{-31} \kappa c$, $v_0 \approx 3 \times 10^3 \, m/c$, отримаємо $T_0 \approx 1 \, K$. Таким чином, вже при $T >> T_0 \approx 1 K$ енергія фонона є знехтувано мала в порівнянні з енергією носія заряду, тобто, розсіяння є майже пружним. Прийнявши до уваги (1.65) функцію Планка можна представити у виді:

$$N_q + l \approx N_q \approx \frac{k_B T}{\hbar \,\omega(q)} = \frac{k_B T}{\hbar \,v_0 \,q}.$$
(1.66)

Оскільки розсіяння електрона на акустичному фононі є практично пружним, то в (1.63) в аргументах δ - функцій можна знехтувати енергією фонона, тоді, враховуючи (1.66), для ймовірності розсіяння отримаємо вираз:

$$W_{AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{M} \frac{E_{AK}^{2}}{\hbar v_{0}^{2}} k_{B}T \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) \,. \tag{1.67}$$

Однак, розглянута модель розсіяння носія заряду на акустичному фононі має суттєвий недолік – вона є далекодіюча (див. зауваження до виразу (1.60)). В ній припускається, що носій взаємодіє одночасно зі всім кристалом. Таке припущення суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу.

1.2.7. Розсіяння носіїв заряду на неполярних оптичних фононах

Сполуки $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з структурою цинкової обманки мають елементарну комірку, в якій знаходиться два атоми. Відомо, що при довгохвильових ($q \rightarrow 0$) оптичних коливаннях атоми в елементарній комірці коливаються майже протифазно, так що центр мас залишається нерухомим. Тому деформація кристалу, і відповідно зміщення країв зон, тобто, енергія взаємодії з носієм заряду, буде пропорційна зміщенню будь-якого з атомів в елементарній комірці. Тоді оператор взаємодії носіїв заряду з оптичними коливаннями можна представити у вигляді [10]:

$$\widehat{H}'_{H\Pi O} = \sum_{j=4}^{3s} A_j \, \boldsymbol{Q}_j \quad , \tag{1.68}$$

де Q_j - зміщення, що відповідає *j*-ій гілці коливань; A_j - деякий постійний вектор, що залежить від номера гілки коливань та характеризує зонну структуру носіїв заряду в кристалічній решітці.

Для кубічних кристалів вектор A_i має вид:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{E}_{H\Pi O} \, \boldsymbol{b}_{\boldsymbol{g}} \,\,, \tag{1.69}$$

де $E_{H\Pi O}$ - константа оптичного потенціалу деформації; $\boldsymbol{b}_{g} = \frac{\pi}{a_{0}}\boldsymbol{g}$ - вектор зворотної гратк; \boldsymbol{g} - одиничний вектор зворотної решітки.

Приймаючи до уваги (1.68) та (1.69), для гамільтоніана деформаційної взаємодії електронів з довгохвильовими оптичними коливаннями кристалу отримаємо:

$$\widehat{H}'_{H\Pi O} = \frac{\pi}{a_0} \frac{E_{H\Pi O}}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\left(\boldsymbol{g} \, \boldsymbol{e}_j \right) \left\{ b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) \right\} \right]. \quad (1.70)$$

Розрахунок ймовірності переходу $k \to k'$ проводиться аналогічно до випадку розсіяння на акустичних фононах (див. вирази (1.59) – 1.62)). Зауважимо, що тут при обчисленні матричного елемента переходу знову припускається, що носій заряду взаємодіє з всім кристалом (принцип далекодії).

В результаті для ймовірності переходу $k \to k'$, обумовленого розсіянням на неполярних оптичних фононах, отримаємо вираз:

$$W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{\pi E_{H\Pi O}^{2}}{N M \omega(q)} \left(\frac{\pi}{a_{0}}\right)^{2} (\boldsymbol{g} \, \boldsymbol{e})^{2} \left[N_{\boldsymbol{q}} \, \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar\omega(\boldsymbol{q})) \delta_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + (1.71) + (N_{\boldsymbol{q}} + 1) \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar\omega(\boldsymbol{q})) \delta_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}}\right]$$

Якщо не враховувати дисперсії оптичних фононів, тобто, згідно (1.47), при $q \rightarrow 0$ вважати, що

$$\omega(q) = \omega_0 , \qquad (1.72)$$

то вираз під знаком суми в (1.71) не залежатиме від хвильового вектора фонона q, крім того, врахуємо, що (g e) = 1. Тоді отримаємо остаточний вираз:

$$W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{\pi E_{H\Pi O}^{2}}{N M \omega_{0}} \left(\frac{\pi}{a_{0}}\right)^{2} \left[N_{0} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar \omega_{0}) + (N_{0} + l) \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar \omega_{0})\right], \qquad (1.73)$$

де $N_0 = \left\{ exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_BT}\right) - I \right\}^{-1}$ - число оптичних фононів з граничною частотою

 ω_0 при температурі T.

Як видно, розсіяння носіїв заряду на неполярних оптичних фононах має суттєво непружний характер. Тому, в загальному випадку тут не можна застосувати метод часу релаксації. Однак, з (1.73) видно, що ймовірність переходу $W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$ є парною функцією \boldsymbol{k}' , тобто, $W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}')$. Це дозволяє ввести час релаксації при непружному розсіянні і в цьому випадку:

$$\frac{1}{\tau_{H\Pi O}} = \frac{V \,\omega_0}{6 \,\pi^2} \frac{N_0}{f_0(\varepsilon)} \Big[f_0(\varepsilon + \hbar \,\omega_0) exp \bigg(\frac{\hbar \,\omega_0}{k_B T} \bigg) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3 (\varepsilon + \hbar \,\omega_0) + \theta(\varepsilon - \hbar \,\omega_0) \times \times f_0(\varepsilon - \hbar \,\omega_0) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} k^3 (\varepsilon - \hbar \,\omega_0) \Big],$$
(1.74)

де $\theta(x)$ - ступенева функція Хевісайда: $\theta(x) = 0$ при $x \le 0$, $\theta(x) = 1$ при x > 0; $f_0(\varepsilon)$ - функція Фермі-Дірака; $k(\varepsilon)$ - закон дисперсії носіїв заряду, що визначається з (1.2).

Однак, розглянута вище модель розсіяння носія заряду на неполярному оптичному фононі має то й же недолік, що і модель розсіяння носія заряду на акустичному фононі – вона є далекодіюча, що суперечить спеціальній теорії відносності.

1.2.8. Розсіяння носіїв заряду на полярних оптичних фононах

В гетерополярних кристалах (сполуки $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$) при оптичних коливаннях решітки виникає електрична поляризація, яка викликає додаткову взаємодію цих коливань з носіями заряду. Цей механізм, який називається розсіянням на полярних оптичних фононах, в вищеназваних кристалах є більш
суттєвим, ніж розсіяння на акустичному та на оптичному деформаційному потенціалі.

При довгохвильових оптичних коливаннях різнойменні іони елементарної комірки, зміщуючись в протилежні сторони, спричиняють поляризацію гратки. Ця поляризація розповсюджується по кристалу і утворює поляризаційну хвилю. Вектор поляризації, що виникає при цьому в точці *r* має вид [21]:

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{1}{16 \,\pi^2} \,\frac{N \,M_0 \,\omega^2(q)}{V \,\varepsilon_0 \,\kappa^*}\right)^{1/2} \left(\boldsymbol{Q}_1 - \boldsymbol{Q}_2\right)\,, \tag{1.75}$$

де
$$M_0 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$
 - приведена маса елементарної комірки; $\frac{1}{\kappa^*} = \frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_0}$, κ_∞ , κ_0 - високочастотна та статична діелектричні проникності кристалу відповідно.

У випадку довгих хвиль ($q \rightarrow 0$) зміщення атомів дається виразом (1.55), тоді (1.75) можна представити у виді:

$$P(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{16 \pi^2} \frac{M_0 \omega^2(q)}{V \varepsilon_0 \kappa^*}\right)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{j=4,5,6} [e_{1j}(\mathbf{q}) - e_{2j}(\mathbf{q})] [b_j(\mathbf{q}) \exp(i \mathbf{q} \mathbf{r}) + b_j^*(\mathbf{q}) \exp(-i \mathbf{q} \mathbf{r})].$$
(1.76)

У довгохвильовому наближенні $(q \rightarrow 0)$, згідно (1.44), вектор $e_j(q)$ є дійсний. Тоді з (1.45) отримаємо

$$M_{1} \boldsymbol{e}_{1j}^{2} + M_{2} \boldsymbol{e}_{2j}^{2} = M_{1} + M_{2} . \qquad (1.77)$$

З іншої сторони, умова нерухомості центру мас елементарної комірки при довгохвильових оптичних коливаннях дає:

$$M_{1} e_{1j} + M_{2} e_{2j} = 0 . (1.78)$$

3 останніх двох рівнянь знаходимо:

$$\boldsymbol{e}_{1\,j} = \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{1/2} \boldsymbol{e}_j \ , \ \boldsymbol{e}_{2\,j} = \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^{1/2} \boldsymbol{e}_j \ , \tag{1.79}$$

де e_j - одиничний вектор, що визначає напрямок зміщення при коливаннях даної гілки нормальних коливань.

3 врахуванням (1.79) вираз (1.76) приймає вид:

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{1}{16 \pi^2} \frac{M \omega^2(\boldsymbol{q})}{V \varepsilon_0 \kappa^*}\right)^{1/2} \sum_{\boldsymbol{q}} \sum_{j=4,5,6} \boldsymbol{e}_j \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r})\right]$$
(1.80)

Вектор поляризації P(r) еквівалентний наявності зв'язаного заряду з густиною $\rho_g = -div P(r)$, що відповідає скалярному потенціалу φ , який задовольняє рівнянню Пуассона:

$$\Delta \varphi = -4 \pi \rho_g = 4 \pi \operatorname{div} \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) . \qquad (1.81)$$

Підставляючи (1.80) в (1.81), знаходимо потенціал φ і, отже, енергію збурення $\hat{H}'_{\Pi O} = \pm e \, \varphi$, зв'язану з поляризаційними коливаннями решітки:

$$\widehat{H}'_{\Pi O} = \pm i e \left(\frac{M \omega^2(q)}{V \varepsilon_0 \kappa^*} \right)^{1/2} \sum_{\boldsymbol{q}} \sum_{j=4,5,6} \frac{1}{q^2} \left(\boldsymbol{e}_j \, \boldsymbol{q} \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) \right].$$

$$(1.82)$$

З цього виразу видно, що носії заряду взаємодіють лише з поздовжніми оптичними коливаннями, для яких $e_j //q$ і $(e_j q) = q$. Тому в сумі по *j* залишається лише один доданок.

Розрахунок ймовірності переходу $k \to k'$ проводиться аналогічно до випадку розсіяння на акустичних та неполярних оптичних фононах. Зауважимо, що тут при обчисленні матричного елемента переходу знову припускається, що носій заряду взаємодіє з всім кристалом (принцип далекодії). При цьому отримаємо:

$$W_{\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{\pi e^2}{V \varepsilon_0 \kappa^*} \frac{\omega(\boldsymbol{q})}{\boldsymbol{q}^2} \left[N_{\boldsymbol{q}} \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar\omega(\boldsymbol{q})) \delta_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k} + \boldsymbol{q}} + \left(N_{\boldsymbol{q}} + 1 \right) \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar\omega(\boldsymbol{q})) \delta_{\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k} - \boldsymbol{q}} \right].$$
(1.83)

Якщо не враховувати дисперсії оптичних фононів $\omega(q) = \omega_0$, сумування по q в (1.83) дає остаточний вираз для ймовірності переходу при розсіянні на полярних оптичних фононах:

$$W_{\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \frac{\pi e^2}{V \varepsilon_0 \kappa^*} \frac{\omega_0}{(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})^2} \left[N_0 \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar \omega_0) + (N_0 + 1) \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar \omega_0) \right].$$
(1.84)

Видно, що цей тип розсіяння має суттєво непружний характер і в загальному випадку не можна ввести час релаксації при розсіянні на полярних оптичних коливаннях.

Однак, розглянута модель розсіяння на полярних оптичних фононах має наступні недоліки:

1). Вона є далекодіюча, в ній припускається, що носій взаємодіє одночасно зі всім кристалом. Таке припущення суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу.

2). В цій моделі використовується макроскопічний параметр - діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах.

1.2.9. Розсіяння носіїв заряду на акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля

Якщо в кристалах $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ з частково іонним зв'язком відсутній центр симетрії, то в них при розповсюдженні акустичної хвилі, окрім деформаційного потенціалу, може виникати додатковий потенціал електричної природи – п'єзоелектричний потенціал, що спричиняє розсіяння носіїв заряду. Цей тип розсіяння був вперше розглянутий в роботі [24].

В ідеальному діелектрику (решітка без вільних носіїв заряду) індукція електричного поля рівна нулю. Тоді, з (1.31) маємо:

$$\boldsymbol{D} = \kappa \, \varepsilon_0 \, \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} = \kappa \, \varepsilon_0 \, \boldsymbol{E} + \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{0} \,. \tag{1.85}$$

3 іншого боку, відомо, що $E = -grad \varphi$. Використовуючи це рівняння, а також (1.85), отримаємо:

$$div \mathbf{E} = -\frac{1}{\kappa \varepsilon_0} div \left(\mathbf{e} \cdot \mathbf{S} \right) = -\Delta \varphi \quad . \tag{1.86}$$

Це рівняння дозволяє визначити потенціал φ і, відповідно, енергію взаємодії носія заряду з п'єзоакустичними коливаннями решітки:

$$\hat{H}'_{\Pi AK} = -e\,\varphi \ . \tag{1.87}$$

Тоді вираз для гамільтоніана взаємодії має вид:

$$\widehat{H}'_{\Pi AK} = -\frac{e \, e_{\alpha \, \mu \nu}}{2\varepsilon_0 \, \kappa \sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q}} \sum_{j=1}^{3} \left[\frac{q_\nu \, e_{j \, \mu} + q_\mu \, e_{j \, \nu}}{q_\alpha} \left\{ b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) - \right. \right]$$

$$-b_{j}^{*}(\boldsymbol{q})\exp(-i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{r})\Big\}\Big].$$
(1.88)

77

Як видно, потенціал взаємодії є сильно анізотропним. Якщо ж ввести деяку п'єзоакустичну константу $E_{\Pi AK}$, усереднену по кутам, а також припустити, що швидкості поздовжніх та поперечних акустичних хвиль майже однакова - $v_{//} \approx v_{\perp} = v_0$, то вираз (1.88) прийме простий вид [9]:

$$\widehat{H}'_{\Pi AK} = -\frac{e E_{\Pi AK}}{4 \pi \varepsilon_0 \kappa \sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\left\{ b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) - b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{r}) \right\} \right].$$
(1.89)

Розрахунок ймовірності переходу $k \to k'$ проводиться аналогічно до випадку розсіяння на акустичних фононах. Зауважимо, що тут при обчисленні матричного елемента переходу знову припускається, що носій заряду взаємодіє з всім кристалом (принцип далекодії). При цьому отримаємо:

$$W_{\Pi AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{e^2 E_{\Pi AK}^{2}}{16 \pi \varepsilon_0^{2} \kappa^{*2} N M} \frac{1}{\omega(q)} \left[N_{\boldsymbol{q}} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \hbar\omega(q)) \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} + (1.90) + (N_{\boldsymbol{q}} + 1) \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \hbar\omega(q)) \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}} \right].$$

В цьому випадку непружністю розсіяння можна знехтувати і прийняти до уваги, що $N_q + l \approx N_q \approx \frac{\hbar \omega(q)}{k_B T}$; $\omega(q) = v_0 q$, то після сумування по q, згідно закону збереження імпульсу, отримаємо:

$$W_{\Pi AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{e^2 E_{\Pi AK}^2 k_B T}{8 \pi \varepsilon_0^2 \kappa^2 N M v_0^2 \hbar} \frac{1}{(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})^2} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}). \qquad (1.91)$$

Однак, розглянута модель розсіяння на п'єзоакустичних фононах має наступні недоліки:

1). Вона є далекодіюча, в ній припускається, що носій взаємодіє одночасно зі всім кристалом. Таке припущення суперечить спеціальній теорії відносності, згідно якої носій взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу.

2). В цій моделі використовується макроскопічний параметр - діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах.

3). В цій моделі не розглядається взаємодія носіїв заряду з оптичною гілкою п'єзоелектричних коливань кристалічної решітки.

1.3. Опис явищ перенесення на основі кінетичного рівняння Больцмана

Для обчислення густини струму j та потоку теплової енергії wнеобхідно знати нерівноважну функцію розподілу f(k, r, t) носіїв заряду. В загальному випадку, зміна f(k, r, t) з часом відбувається завдяки наступним фізичним процесам: 1) дифузії, що зв'язана з градієнтом температури та концентрації носіїв заряду і приводить до зміни залежності нерівноважної функції розподілу від координати r; 2) прискоренню зовнішніми полями, що приводить до зміни хвильового вектора k носія заряду; 3) розсіяння носія заряду на фононах або дефектах решітки, що приводить до зміни хвильового вектора k носія заряду. Сумарна дія цих факторів рівна зміні функції розподілу за одиницю часу [9,10,21]:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{\partial u\phi} + \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{no\pi} + \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{posc}.$$
 (1.92)

Перший доданок визначається з виразу:

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{\partial u\phi} = -\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k})\nabla_{\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t), \qquad (1.93)$$

де $v(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k})$ - швидкість носія заряду.

Другий доданок визначається з виразу:

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{non} = -\frac{1}{\hbar} \boldsymbol{F} \nabla_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t), \qquad (1.94)$$

де **F** - сила Лоренца, що діє на заряд q у зовнішньому електричному **E** та магнітному **B** полях і має наступний вид:

$$\boldsymbol{F} = q \, \boldsymbol{E} + q \left[\, \boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) \times \boldsymbol{B} \, \right] \,. \tag{1.95}$$

Третій доданок визначається як різниця чисел носіїв заряду, що приходять або відходять зі стану k в одиничному об'ємі кристалу :

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{posc} = \frac{1}{4\pi^3} \int \{W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}',t)[1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)] - W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)[1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}',t)]\}d\boldsymbol{k}'$$
(1.96)

Тоді кінетичне рівняння Больцмана має наступний вид:

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t} = -\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k})\nabla_{\boldsymbol{r}}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t) - \frac{1}{\hbar}(\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{E} + \boldsymbol{q}\,[\,\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k})\times\boldsymbol{B}\,])\nabla_{\boldsymbol{k}}\,f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t) + \\
+ \frac{1}{4\,\pi^{3}}\int\{W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}',t)[1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)] - W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)[1-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k}',t)]\}d\boldsymbol{k}'.$$
(1.97)

Для стаціонарного випадку $\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) / \partial t = 0$ маємо:

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) \nabla_{\boldsymbol{r}} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) + \frac{1}{\hbar} (\boldsymbol{q} \boldsymbol{E} + \boldsymbol{q} [\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) \times \boldsymbol{B}]) \nabla_{\boldsymbol{k}} f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) =$$

$$= \frac{1}{4 \pi^{3}} \int \{ W(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t) [1 - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t)] - W(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}, t) [1 - f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}', t)] \} d\boldsymbol{k}'.$$
(1.98)

Рівняння (1.98) є інтегро-диференціальним рівнянням і його розв'язок в загальному виді невідомий. Найбільш поширеним наближеними методами розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана є метод часу релаксації та варіаційний метод.

1.3.1. Розв'язок кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації

В цьому випадку розв'язок кінетичного рівняння представляється у виді:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) , \qquad (1.99)$$

де $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \equiv f_0(\varepsilon(\mathbf{k}))$ - рівноважна функція Ферм-Дірака для електронів або дірок; $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ - нерівноважний доданок, який пропорційний електричному полю та градієнту температури.

Також припускається, що відхилення від рівноваги є малим:

$$f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \ll f_0(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$$
 (1.100)

Підставляючи (1.99) в (1.96) і використовуючи (1.99), а також приймаючи до уваги принцип детальної рівноваги

$$W(\mathbf{k}',\mathbf{k})f_0(\mathbf{r},\mathbf{k}',t)[1 - f_0(\mathbf{r},\mathbf{k},t)] = W(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_0(\mathbf{r},\mathbf{k},t)[1 - f_0(\mathbf{r},\mathbf{k}',t)], \quad (1.101)$$

отримаємо:

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\partial t}\right]_{posc} = -\frac{f_I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t)}{\tau(\boldsymbol{k})} , \qquad (1.102)$$

де введено позначення

$$\frac{1}{\tau(\mathbf{k})} = \frac{1}{4\pi^2} \int W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[\frac{1 - f_0(\varepsilon')}{1 - f_0(\varepsilon)} - \frac{f_0(\varepsilon)}{f_0(\varepsilon')} \frac{f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t)}{f_1(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)} \right].$$
(1.103)

Величина $\tau(k)$ носить назву часу релаксації. Для випадку ізотропного закону дисперсії носіїв заряду та пружного розсіяння носіїв на дефектах гратки вираз для $\tau(k)$ спрощується і приймає вид:

$$\frac{1}{\tau(\boldsymbol{k})} = \frac{1}{4 \pi^2} \int W(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \left[1 - \frac{\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{k}'}{k^2} \right] d \boldsymbol{k}' . \qquad (1.104)$$

Використовуючи $\tau(k)$, можна визначити нерівноважний додаток функції розподілу [9]:

$$f_{I}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{k},t) = -\tau(\boldsymbol{k}) \frac{\partial f_{0}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{\Phi}(\varepsilon) , \qquad (1.105)$$

де $\Phi(\varepsilon)$ - узагальнена сила збурення, що визначається з виразу:

$$\Phi(\varepsilon) = \frac{1}{1+\nu^2} \left\{ \Phi_0(\varepsilon) + \frac{e \,\tau(\mathbf{k})}{m^*} \left[\mathbf{B} \times \Phi_0(\varepsilon) \right] + \left[\frac{e \,\tau(\mathbf{k})}{m^*} \right]^2 \mathbf{B} \left(\mathbf{B} \cdot \Phi_0(\varepsilon) \right) \right\} ; \quad (1.106)$$

де
$$\Phi_0(\varepsilon) = q \mathbf{E} - \nabla_r F - \frac{\varepsilon - F}{T} \nabla_r T$$
; F – рівень Фермі; $v = \frac{e B \tau(\mathbf{k})}{m}$

Розглянутий метод часу релаксації має наступні недоліки:

1). Цей метод можна застосовувати лише при пружних механізмах розсіяння. Однак, в ряді напівпровідників $A^{II}B^{VI}$ переважаючим механізмом розсіяння є розсіяння носіїв заряду на полярних оптичних фононах, яке є суттєво

непружним. Тому застосування методу часу релаксації в даному випадку є з самого початку некоректним.

2). В цьому методі використовується лінеаризоване, тобто, наближене кінетичне рівняння Больцмана, отримане на основі припущення (1.100). Однак, залишається невідомим наскільки таке припущення є вірним, наскільки реальна функція розподілу відрізняється від функції, розрахованої з виразу (1.106).

1.3.2. Розв'язок кінетичного рівняння Больцмана варіаційним методом

Варіаційний метод розв'язку рівняння Больцмана можна застосовувати у випадку, коли мають місце непружні механізми розсіяння [25]. При цьому може відбуватися переходи носіїв заряду з зона провідності у валентну зону і навпаки. Тому виникає система зв'язаних між собою кінетичних рівнянь для двох сортів носіїв – електронів та важких дірок [26,27]. Функція розподілу шукається у виді:

$$f_i(\mathbf{k}) = f_{0i}(\mathbf{k}) + a_i(\varepsilon) \Phi_i(\mathbf{k}), \qquad (1.107)$$

де $a_i(\varepsilon) = \frac{\partial f_{0i}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}$; i = 1,2.

Система лінеаризованих кінетичних рівнянь записується у вигляді:

$$\sum_{j=1}^{2} \hat{L}_{ij} \boldsymbol{\Phi}_{j}(\boldsymbol{k}) = X_{i}, \qquad (1.108)$$

де

$$\hat{L}_{ij} = \sum_{\nu} \hat{L}_{\nu ij}$$
 (*v* - тип механізму прозсіяння); (1.109)

$$\widehat{L}_{vij} \Phi_j(\mathbf{k}) = \frac{1}{k_B T} \int W_{vij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{0i}(\mathbf{k}) \Big[1 - f_{0j}(\mathbf{k}) \Big] \Big[\Phi_j(\mathbf{k}') - \Phi_j(\mathbf{k}) \Big] d\mathbf{k}' ; \quad (1.110)$$

$$X_{i} = a_{i}(\varepsilon) \left[e \mathbf{E} - \nabla F + \frac{\varepsilon - F}{T} (-\nabla T) \right] \mathbf{v}_{i} - a_{i}(\varepsilon) \frac{e}{\hbar} \left[\mathbf{v}_{i} \times \mathbf{B} \right] \frac{\partial \Phi_{i}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} . \quad (1.111)$$

Інтегральний оператор \hat{L}_{ij} є самоспряженим та знакопостійним [25], що забезпечує справедливість Н-теореми Больцмана. Згідно [28] поряд з шуканою функцією $\Phi(\mathbf{k})$ вводиться додаткова функція $\Psi(\mathbf{k})$ така, що

$$\boldsymbol{\Phi}_{-H}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{\Psi}_{H}(\boldsymbol{k}) \,. \tag{1.112}$$

Далі застосовують варіаційний принцип Швінгера до функціонала:

$$\int \Psi_i(\boldsymbol{k}) \widehat{R}_{ij} \Phi_j(\boldsymbol{k}) d\boldsymbol{k} - \int a_i(\varepsilon) \left[e \, \boldsymbol{E} - \nabla F + \frac{\varepsilon - F}{T} \left(-\nabla T \right) \right] v_i \left[\Psi_j(\boldsymbol{k}) + \Phi_i(\boldsymbol{k}) \right] d\boldsymbol{k} , \quad (1.113)$$

де $\hat{R} \Phi_i(\mathbf{k}) = \hat{L} \Phi_i(\mathbf{k}) + \hat{M} \Phi_i(\mathbf{k})$, \hat{M} - оператор магнітного поля (другий доданок в правій частині (1.111)).

Це приводить до системи рівнянь Ейлера для пробних функцій $\Phi_i(k)$

$$\sum_{j=I}^{2} \widehat{R}_{ij} \boldsymbol{\Phi}_{j} (\boldsymbol{k}) = X_{i} , \qquad (1.114)$$

що еквівалентна системі кінетичних рівнянь, та системи рівнянь для функцій $\Psi_i(k)$

$$\sum_{j=1}^{2} \widetilde{\widehat{R}}_{ij} \Psi_{j}(\boldsymbol{k}) = X_{i} , \qquad (1.115)$$

де $\tilde{\vec{R}}_{i\,j}$ - лінійний інтегральний оператор, транспонований до оператора $\hat{R}_{i\,j}$.

Пробні функції $\Phi_i(\mathbf{k})$ та $\Psi_i(\mathbf{k})$ вибирають у виді ряду по енергіях:

$$\boldsymbol{\Phi}_{i}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\beta=1}^{3} \sum_{n=0}^{\infty} C_{ik}^{\beta} k_{\beta} \varepsilon^{n} ; \boldsymbol{\Psi}_{i}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\beta=1}^{3} \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{C}_{ik}^{\beta} k_{\beta} \varepsilon^{n} , \qquad (1.116)$$

де $C_{ik}^{\ \beta}$ та $\tilde{C}_{ik}^{\ \beta}$ - варіаційні параметри.

Підставляючи (1.116) в (1.113) та використовуючи умову екстремальності функціонала, отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь для $C_{ik}^{\ \beta}$ та $\tilde{C}_{ik}^{\ \beta}$. Записуючи вираз для густини електричного струму

$$J_i = \int e \, a_i(\varepsilon) v_i \, \Phi_i(\mathbf{k}) \, d \, \mathbf{k} \tag{1.117}$$

можна визначити компоненти тензора провідності у виді ряду по параметрам $C_{ik}^{\ \beta}$.

Однак, варіаційний метод має наступні недоліки:

1). В цьому методі використовується лінеаризоване, тобто, наближене кінетичне рівняння Больцмана, отримане на основі припущення (1.100). Однак, залишається невідомим, наскільки таке припущення є вірним, наскільки реальна функція розподілу відрізняється від функції, розрахованої з виразу (1.116).

2). В цьому методі важко визначити число членів ряду для оцінки точності отриманого рішення.

3). Необхідно вдало вибрати пробні функції у виді двох-трьох членів для отримання результату з достатньою точністю.

РОЗДІЛ 2

Близькодіючі моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної решітки сполук **А^{II}B^{VI} та А^{III}B^V**

Розглянуті у першому розділі моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної решітки мають наступні спільні недоліки:

1) вони є далекодіючі, тобто, припускається, що носій взаємодіє з достатньо віддаленими областями кристалу (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 спеціальній теорії відносності, яка надійно підтверджена експериментально, згідно якої носій заряду взаємодіє тільки з сусідніми областями кристалу (принцип близькодії);

2) в цих моделях використовується макроскопічний параметр - діелектрична проникність - який не має сенсу в мікроскопічних процесах. Застосування цього параметру у вищеописаних моделях розсіяння є суперечливим: розглянуті моделі є мікроскопічні, тому вони повинні описувати макроскопічні властивості кристалу, з іншого боку, в цих моделях з самого початку вводиться макроскопічний параметр, а потім проводиться опис мікроскопічних і, відповідно, макроскопічних процесів.

У цьому розділі будуть розглянуті моделі розсіяння носіїв заряду на дефектах кристалічної решітки, в яких будуть відсутні вищевказані недоліки. По-перше, в якості області, з якою взаємодіє носій заряду, буде вибиратися область кристалу, об'єм якої не перевищує об'єму однієї елементарної комірки. Такий вибір області взаємодії обумовлений тим, що елементарна комірка є найменшою структурною одиницею кристалу, з якою взаємодіє носій. Подруге, буде припускатися, що потенціал взаємодії дефекту з носієм заряду не залежить від діелектричної проникності кристалу, тобто, буде покладено, що діелектрична проникність рівна одиниці $\kappa = 1$.

2.1. Потенціал іонізованої домішки

Позитивно або негативно заряджений іон домішки створює в кристалічній решітці напівпровідника кулонівське поле з потенціалом :

$$\varphi(r) = \pm \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_i e}{r} , \qquad (2.1)$$

де Z_i – кратність іонізації домішки і також враховано, що діелектрична проникність $\kappa = 1$.

Потенціальна енергія взаємодії носія заряду з полем домішки має вид :

$$U(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z_i e^2}{r} .$$
(2.2)

Приймаючи до уваги принцип близькодії припускається, що величина r змінюється в межах від 0 до a_0 , тобто, $r = \gamma_{III} a_0$, де γ_{III} ($0 < \gamma_{III} \le 1$) – підгоночний параметр, який вибирається таким чином, щоб узгодити теорію та експеримент. Якщо верхня межа параметра γ_{III} рівна одиниці, то вся розглянута теорія залишається в рамках першого наближення теорії збурень, тобто, в даному підході відсутня математична некоректність, характерна для далекодіючої теорії (див. зауваження до розділу 1.2.2).

Слід також відзначити, що такий спосіб обмеження області дії потенціалу домішки обумовлений тим, що на теперішній час точний вид потенціальної енергії носія заряду в кристалічній решітці залишається невідомим.

Приймемо, що хвильова функція носія заряду має вид плоскої хвилі, нормованої на одиницю об'єму (наближення ефективної маси):

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}) \ . \tag{2.3}$$

87

Матричний елемент для переходу носія заряду з стану k в стан k' під дією потенціальної енергії U(r) визначається з виразу:

$$\langle \mathbf{k}'/U(\mathbf{r})/\mathbf{k}' \rangle = \frac{Z_i e^2}{4 \pi \varepsilon_0 V} \int \frac{1}{r} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.4)$$

де q=k-k'.

Для обчислення інтегралу в (2.4) введемо полярну систему координат, при цьому направимо вісь "Z" вздовж вектора q. Тоді θ і φ будуть сферичними координатами вектора r:

$$\langle \mathbf{k}'/U(\mathbf{r})/\mathbf{k}' \rangle = \frac{Z_i e^2}{4 \pi \varepsilon_0 V} \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{r} exp(i q r \cos \theta) \sin \theta r^2 d r d\theta d\phi = = \frac{Z_i e^2}{4 \pi \varepsilon_0 V} \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} exp(i q r \cos \theta) \sin \theta r d r d\theta d\phi ,$$

$$(2.5)$$

де $R = \gamma_{I\!\!\!\!/} a_0$ - радіус дії близькодіючого потенціалу.

Інтегрування по кутовим змінним θ і φ дає $\frac{4\pi \sin qr}{q}$, а інтегрування по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$I(q) = \int_{0}^{R} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \exp(i q r \cos \theta) \sin \theta r dr d\theta d\phi = \frac{4 \pi (1 - \cos qR)}{q^2} \quad . \quad (2.6)$$

Попередній розрахунок показує, що хвильовий вектор носія заряду k (i, відповідно, вектор q) міняються в межах від 0 до $10^9 \, {}_{M}{}^{-1}$ при зміні енергії



ності видно, що в межах зміни величини хвильового вектора носія *k* виконується умова:

$$I(q) = I(0) = 2 \pi R^2 .$$
 (2.7)

З врахуванням цього матричний елемент переходу приймає вид :

$$\langle \boldsymbol{k}' / \boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}) / \boldsymbol{k}' \rangle = \frac{Z_i \ e^2 \ a_0^2 \ \gamma_{I \square}^2}{2 \ V \ \varepsilon_0} \ . \tag{2.8}$$

Використовуючи цей вираз, для ймовірності переходу носія з стану k в стан k' за рахунок розсіяння на іонізованій домішці отримаємо наступний вираз [29-35,208,329]:

$$W_{II}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} N \left| \langle \boldsymbol{k}' / U(\boldsymbol{r}) / \boldsymbol{k}' \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) =$$

де N - загальна кількість іонізованих домішок у кристалі; N_i - концентрація іонізованих домішок.

Необхідно зауважити, що сильна степенева залежність підгоночного параметра $\gamma_{I\!\!\mathcal{I}\!\!\mathcal{I}}$ (параметр входить у вираз (2.9) у четвертій степені) різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.9) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок, тому що при його виведенні не конкретизувався тип носія заряду.

2.2. Потенціал нейтральної домішки

При описі процесу розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі нейтральної домішки будемо виходити з моделі Ерджинсоя [16], згідно якої час релаксації (випадок пружного розсіяння) визначається з виразу:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{20 N_{H\!\Pi} 4\pi\varepsilon_0 \hbar^3}{m^{*2} e^2} , \qquad (2.10)$$

де $N_{H\!Z}$ - концентрація нейтральних домішок; m^* - ефективна маса носія заряду; у виразі (2.10) враховано, що діелектрична проникність $\kappa = 1$, тим самим, виключається використання макроскопічного параметра в мікроскопічній моделі.

Якщо виходити з виразу, що зв'язує час релаксації та ймовірність переходу

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2V}{\left(2\pi\right)^3} \int W(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \left(1 - \cos\theta\right) d\boldsymbol{k}' , \qquad (2.11)$$

де θ - кут між векторами k та k', то з (2.11) отримаємо вираз для ймовірності переходу при розсіяння носія заряду на нейтральній домішці:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{20 \,\pi^2 a_B \, N_{H\!\mathcal{I}} \,\hbar^3}{V \,m^{*2} k'} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) , \qquad (2.12)$$

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

Зробимо наступне припущення щодо радіусу дії поля нейтральної домішки: припустимо, що радіус дії поля нейтральної домішки рівний наближено половині величини сталої решітки. Таке припущення можна обґрунтувати тим, що поле нейтральної має радіус дії менший, ніж поле зарядженої домішки, для якої верхня межа радіусу дії була прийнята рівна сталій решітці (див. попередній розділ). В моделі Ерджинсоя радіус дії поля нейтральної домішки складав величину радіуса Бора a_B (випадок розсіяння на нейтральноў домішки складав величину радіуса Бора a_B (випадок розсіяння на нейтральноў датомі водню). Для розглянути в даній дисертаційній роботі сполуках $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$ величина половина сталої решітки складає ~ 3 A, що дорівнює наближено $5a_B$. Отже, зробивши заміну $a_B \rightarrow 5 a_B$ в (2.12), отримаємо вираз для ймовірності переходу при розсіяння носія заряду на близькодіючому потенціалі нейтральної домішки [36-42]:

$$W_{H\!/\!1}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{100 \,\pi^2 a_B \,N_{H\!/\!1} \,\hbar^3}{V \,m^{*2} k'} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) \,. \tag{2.13}$$

Якщо прийняти до уваги, що $m^* = \hbar^2 k'(\varepsilon') \frac{\partial k'(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'}$, то для електронів зони провідності, що мають непараболічний закон дисперсії, отримаємо:

$$W_{H\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{100 \,\pi^2 a_B \, N_{H\mathcal{I}}}{V \,\hbar \, k'^3(\varepsilon') \left[\frac{\partial \,k'(\varepsilon')}{\partial \,\varepsilon'}\right]^2} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) \,. \tag{2.14}$$

Для важких дірок валентної зони, що мають параболічний закон дисперсії

$$k(\varepsilon) = \left(\frac{2 m_{hh}}{\hbar^2}\right)^{l/2} \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{l/2} , \qquad (2.15)$$

m_{hh} - ефективна маса важких дірок, отримаємо наступний вираз для ймовірності розсіяння:

$$W_{H\!\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{100 \,\pi^2 a_B \,\hbar^4 N_{H\!\mathcal{I}}}{\sqrt{2} \,V \,m_{hh}^{5/2} \left(-\varepsilon' - \varepsilon_g\right)^{l/2}} \,\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) \,. \tag{2.16}$$

Необхідно відзначити, що в (2.14) та (2.16) за початок відліку енергії прийнято дно зони провідності.

2.3. Потенціал центру статичної деформації

Електричний потенціал статичної деформації є подібний до потенціалу точкового диполя. Згідно виразу (1.39) він має наступний вид:

$$\varphi\left(\mathbf{r}\right) = \frac{9 e_{14} b_0^3}{\kappa \varepsilon_0} \frac{x y z}{r^5}.$$
(2.17)

З метою уникнення недоліків, характерних для далекодіючих моделей, зробимо наступні припущення: 2). Приймемо, що діелектрична проникність кристалу к рівна одиниці.

3). Так як і в роботі [18] приймемо, що потенціал дефекту статичної деформації не залежить від напрямку в просторі, а залежить лише від відстані до центру дефекту, тобто, є сферично-симетричним.

З врахуванням цих припущень близькодіючий потенціал дефекту статичної деформації має вид:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{9 e_{14} a_0^3}{\varepsilon_0} \frac{1}{r^2} , \qquad (2.18)$$

Відповідно потенціальна енергія носія заряду в полі дефекту визначається з виразу:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{9 e e_{14} a_0^3}{\varepsilon_0} \frac{1}{r^2} .$$
 (2.19)

Приймемо, що хвильова функція носія заряду має вид плоскої хвилі, нормованої на одиницю об'єму (наближення ефективної маси):

$$\psi_{k}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\,\mathbf{k}\,\mathbf{r}) \,. \tag{2.20}$$

Матричний елемент для переходу носія заряду з стану k в стан k' під дією потенціальної енергії U(r) (2.19) визначається з виразу:

$$\langle \boldsymbol{k}' / \boldsymbol{U}(\boldsymbol{r}) / \boldsymbol{k}' \rangle = \frac{9 \, e \, e_{14} \, a_0^3}{\varepsilon_0 \, V} \int \frac{1}{r^2} \exp(i \, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}) d \, \boldsymbol{r} \quad , \tag{2.21}$$

де
$$q = k - k'$$

Для обчислення інтегралу в (2.21) введемо полярну систему координат, при цьому направимо вісь "Z" вздовж вектора q. Тоді θ і φ будуть сферичними координатами вектора r:

$$\langle \mathbf{k}'/U(\mathbf{r})/\mathbf{k}' \rangle = \frac{9 e e_{14} a_0^3}{\varepsilon_0 V} \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{r^2} exp(i q r \cos \theta) \sin \theta r^2 d r d\theta d\phi =$$

$$= \frac{9 e e_{14} a_0^3}{\varepsilon_0 V} \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} exp(i q r \cos \theta) \sin \theta d r d\theta d\phi ,$$

$$(2.22)$$

де $R \approx 10^{-10} \, \text{м}$ - радіус дії близькодіючого потенціалу.

Інтегрування по кутовим змінним θ і φ дає $\frac{4 \pi \sin qr}{qr}$, а інтегрування по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$I(qR) = \int_{0}^{R} \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} exp(i q r \cos \theta) \sin \theta dr d\theta d\phi = \frac{4 \pi Si(qR)}{q}, \quad (2.23)$$

де Si(x) - інтегральний синус, що визначається з виразу:

$$Si(x) = \int_{0}^{x} \frac{\sin z}{z} dz$$
 (2.24)

Попередній розрахунок показує, що хвильовий вектор носія заряду k (i, відповідно, вектор q) міняються в межах від 0 до $10^9 \, M^{-1}$ при зміні енергії носія від 0 до $10 \, k_B T$ (що відповідає енергії ~ 99 % загальної кількості носіїв заряду) в інтервалі температур $4.2 - 300 \, K$. З представленої на рис. 2.2 залеж-



Рис. 2.2. Залежність функції Si(q R) від q = |k - k'|.

ності видно, що в межах зміни величини хвильового вектора носія k та при $R \approx 10^{-10} \, \text{м}$ виконується умова:

$$Si(qR) = C \approx 0.1 . \tag{2.25}$$

З врахуванням цього матричний елемент переходу приймає вид :

$$\langle \boldsymbol{k}'/\boldsymbol{U}(\boldsymbol{r})/\boldsymbol{k}' \rangle = \frac{2^2 \beta^2 \pi C e e_{14} a_0^{-3}}{V \varepsilon_0} \frac{1}{q} . \qquad (2.26)$$

Використовуючи цей вираз, для ймовірності переходу носія з стану *k* в стан *k'* за рахунок розсіяння на потенціалі статичної деформації отримаємо наступний вираз [43-49]:

$$W_{C\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} N \left| \langle \boldsymbol{k}' / U(\boldsymbol{r}) / \boldsymbol{k}' \rangle \right|^2 \delta \left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}} \right) =$$

$$=\frac{2^{5}3^{4}\pi^{3}C^{2}e^{2}e_{I4}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{I}}}{V\varepsilon_{0}^{2}\hbar}\frac{1}{q^{2}}\delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}}\right).$$
 (2.27)

де *N* - загальна кількість центрів статичної деформації у кристалі; *N*_{*C*Д} - концентрація центрів статичної деформації.

Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.27) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок, тому що при його виведенні не конкретизувався тип носія заряду.

2.4. Потенціал взаємодії носіїв заряду з акустичним фононом

Запишемо потенціальну енергію взаємодії носія заряду з акустичним фононом у вигляді [50,51]:

$$\widehat{H}' = -\mathbf{Q}' \cdot \nabla V_0 + S_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} = \widehat{H}'_1 + \widehat{H}'_2 \quad (\alpha, \beta = x, y, z) , \qquad (2.28)$$

де V_0 - періодичне поле недеформованого кристалу; $\mathbf{Q}' = \frac{1}{2}(\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2)$; \mathbf{Q}_1 , \mathbf{Q}_2 - зміщення атомів елементарної комірки; $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial Q_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right]$ -

макроскопічний тензор деформації; $V_{\alpha\beta} = V_{\beta\alpha}$ - симетрична частина коефіцієнта при першій похідній в розкладі в ряд \hat{H}' по Q_i (i = 1, 2); у виразі (2.28) та нижче використовується прийняте в тензорному аналізі сумування по індексам, що повторюються.

Відомо, що при акустичних коливаннях зміщення атомів елементарної комірки структури цинкової обманки однакове, а вектор поляризації кристалічних коливань о(q, j) є дійсним і одиничним [10]:

$$\boldsymbol{Q}_{1} = \boldsymbol{Q}_{2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2M\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q},j) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right], (2.29)$$

де $M = x M_{A1} + (1 - x) M_{A2} + M_B$ - маса елементарної комірки твердого розчину $Al_x A2_{1-x} B$ (Al, A2 – елементи другої групи; B- елемент шостої групи); $b_j(q)$ і $b_j^*(q)$ - оператори анігіляції та народження фононів j – ої гілки коливань з хвильовим вектором q ; $a_n = i (n_2 + n_3) \frac{a_0}{2} + j (n_1 + n_3) \frac{a_0}{2} + k (n_1 + n_2) \frac{a_0}{2}$, ($n_1, n_2, n_3 = 1, 2...$), i, j, k – одиничні вектори вздовж головних осей кристалу з структурою цинкової обманки.

Слід зауважити, що вектори зміщення атомів (2.29) є функціями від дискретних змінних $Q = Q(n_1, n_2, n_3) = Q_1 = Q_2$. Такий вибір функціональної залежності вектора зміщення обумовлений тим, що надалі при застосуванні принципу близькодії до процесу розсіяння носія заряду (тобто, до розсіяння носія на одній елементарній комірці) дискретність кристалічної решітки відіграє важливу роль. Тому вектор зміщення вибирається у виді (2.29), а не використовуються вирази (1.55) та (1.56), які справедливі для наближення континуума.

З врахуванням (2.29) вираз для \hat{H}'_1 буде мати вид:

$$\widehat{H}'_{I} = -\sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \nabla V_{0} \cdot \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q},j) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right].$$
(2.30)

Для визначення гамільтоніану \hat{H}'_2 необхідно визначити компоненти макроскопічного тензора деформації, які визначаються через похідні $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x_{\beta}}$. Враховуючи те, що компоненти вектора зміщення Q_{α} є функціями дискретних змінних $(n_1; n_2; n_3)$, замінимо частинну похідну компоненти вектора Q по координаті x наступним виразом:

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x} \rightarrow \frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3}) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2}+1,n_{3}) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1) - Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x}.$$
(2.31)

Як видно з виразу для a_n (див. (2.29)) мінімальне значення Δx для структури цинкової обманки рівне $\frac{a_0}{2}$. Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1+1,n_2,n_3) - Q_{\alpha}(n_1,n_2,n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=.$$
(2.32)
$$=exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\right]-1\right\}$$

Враховуючи, що мають місце співвідношення

$$a_0 q_y \ll 1$$
; $a_0 q_z \ll 1$, (2.33)

розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx 1 + i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z).$$
(2.34)

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1 + 1, n_2, n_3) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.35)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1+1,n_2,n_3) - Q_{\alpha}(n_1,n_2,n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$
(2.36)
$$=exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\right]-1\right\}.$$

Враховуючи (2.33), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx 1-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)$$
(2.37)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1+1,n_2,n_3) - Q_{\alpha}(n_1,n_2,n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$
(2.38)

Використовуючи (2.35) та (2.38), отримаємо вираз :

$$\frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \sum_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{j}} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})}\right]^{l/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{j})i\left(\boldsymbol{q}_{y}+\boldsymbol{q}_{z}\right) \times \left[b_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})\exp(i\boldsymbol{q},\boldsymbol{a}_{n})-b_{\boldsymbol{j}}^{*}(\boldsymbol{q})\exp(-i\boldsymbol{q},\boldsymbol{a}_{n})\right].$$
(2.39)

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2 + 1, n_3) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$

$$=exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}$$

$$(2.40)$$

Враховуючи співвідношення (2.33), а також

$$a_0 q_x \ll 1$$
, (2.41)

розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx l+i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z) . \qquad (2.42)$$

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2 + 1, n_3) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.43)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2 + 1, n_3) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$
(2.44)
$$=exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}.$$

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx 1 - i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)$$
(2.45)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2 + 1, n_3) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z}) \exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$
(2.46)

Використовуючи (2.43) та (2.46), отримаємо вираз :

100

$$\frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2}+1,n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \sum_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{j}} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{j})i \ (\boldsymbol{q}_{x}+\boldsymbol{q}_{z}) \times \\ \times \left[b_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})exp(i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n}) - b_{\boldsymbol{j}}^{*}(\boldsymbol{q})exp(-i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n}) \right].$$
(2.47)

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3 + 1) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$

$$=exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\right]-1\right\}.$$

$$(2.48)$$

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)\right] \approx l+i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y).$$
(2.49)

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3 + 1) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.50)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3 + 1) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3+1)+q_y(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_2)\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3)+q_z(n_1+n_2)\right]\right\}=$$
(2.51)
$$=exp\left\{-i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3)+q_z(n_1+n_2)\right]\right\}\left\{exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)\right]-1\right\}.$$

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)\right] \approx 1 - i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)$$
(2.52)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.29) у виразі $Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3 + 1) - Q_{\alpha}(n_1, n_2, n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left(-iqa_{n}\right).$$
(2.53)

Використовуючи (2.50) та (2.53), отримаємо вираз :

$$\frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1)-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \sum_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{j}} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})}\right]^{1/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},\boldsymbol{j})i \left(q_{x}+q_{y}\right) \times \left[b_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})\exp(i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n})-b_{\boldsymbol{j}}^{*}(\boldsymbol{q})\exp(-i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n})\right].$$

$$\times \left[b_{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{q})\exp(i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n})-b_{\boldsymbol{j}}^{*}(\boldsymbol{q})\exp(-i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n})\right].$$
(2.54)

Використовуючи (2.39), (2.47) та (2.54), на основі співвідношення (2.31) отримаємо вираз для частинної похідної компоненти вектора Q по координаті

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},j) 2 i \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.55)

Для знаходження частинних похідних компонентів вектора *Q* по координатах *у* та *z* зробимо підстановки, аналогічні до (2.31) :

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial y} \rightarrow \frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta y} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2}+1,n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta y} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1)-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta y};$$

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial z} \rightarrow \frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta z} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1)-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta z}.$$
(2.56)
$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial y} \rightarrow \frac{Q_{\alpha}(n_{1}+1,n_{2},n_{3})-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta z} + \frac{Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3}+1)-Q_{\alpha}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta z}.$$

З виразу для a_n (див. (2.29)) видно, що мінімальне значення Δy та Δz для структури цинкової обманки рівне $\frac{a_0}{2}$. Тому процедура визначення похідних $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial y}$ та $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial z}$ така ж сама, як і для $\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x}$. Тоді отримаємо остаточні вирази для частинних похідних компонентів вектора Q по координатах y та z:

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial y} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},j) 2 i \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.58)

$$\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial z} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},j) 2 i \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.59)

З виразів (2.55), (2.58) та (2.59) можна визначити компоненти макроскопічного тензора деформації:

$$S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial Q_{\alpha}}{\partial x_{\beta}} + \frac{\partial Q_{\beta}}{\partial x_{\alpha}} \right] = i \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_{\alpha}(\boldsymbol{q},j) + \xi_{\beta}(\boldsymbol{q},j) \right] \times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n}) \right].$$
(2.60)

3 врахуванням (2.60) вираз для гамільтоніана \hat{H}'_2 буде мати вид:

$$\widehat{H}'_{2} = i \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, j) + \xi_{\beta}(\boldsymbol{q}, j) \right] V_{\alpha\beta} \times \\
\times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right],$$
(2.61)

а гамільтоніан взаємодії носія заряду з акустичним фононом визначатиметься з виразу:

$$\widehat{H}' = -\sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \nabla V_0 \cdot o(\boldsymbol{q},j) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right] + i \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_\alpha(\boldsymbol{q},j) + \xi_\beta(\boldsymbol{q},j) \right] V_{\alpha\beta} \left(q_x + q_y + q_z \right) \times$$

$$\times \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.62)

Для обчислення матричного елементу переходу вибираємо хвильову функцію системи "носій заряду + акустичний фонон" у виді:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{\boldsymbol{k} \ j_z} \ \exp(i\,\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{r}\,)\,\Phi(\,x_1, x_2 \dots x_n\,)\,, \tag{2.63}$$

де $\Phi(x_1, x_2...x_n)$ - хвильова функція системи незалежних гармонічний осциляторів, що залежить від чисел заповнення $x_1, x_2...x_n$; $u_{k j_z}$ - амплітуди Блоха, виражені через функції Лютінгера-Кона.

Необхідно зауважити, що в подальшому при розрахунку матричних елементів зміна координат носія заряду буде розглядатися лише в межах однієї елементарної комірки, тим самим, гамільтоніан взаємодії (2.62) стає близькодіючим.

Матричний елемент переходу для гамільтоніана \hat{H}'_1 , обчислений на основі функцій (2.63), має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{1} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{\Omega} exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}^{\prime}) \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} \times \\ \times \frac{\partial V_{0}}{\partial x^{\alpha}} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, j) u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} \int \Phi^{*}(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) [b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) + \\ + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n})] \Phi(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n};$$

$$(2.64)$$

Враховуючи тотожність

$$\frac{\partial V_0}{\partial x^{\alpha}} \equiv \frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} \hat{H}_0 , \qquad (2.65)$$

для інтеграла по координатам в (2.64) отримаємо:

$$\begin{aligned} \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) \int_{\Omega} \exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} \frac{\partial V_{0}}{\partial x^{\alpha}} u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} = \\ &= \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) \int_{\Omega} \exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} \frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} \hat{H}_{0} u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} = \\ &= \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) \int_{\Omega} \exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} \frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} E_{0} u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} = \\ &= \xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) E_{0} \int_{\Omega} \exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} \frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} , \end{aligned}$$

де E_0 - власне значення незбуреного гамільтоніана.

Згідно [50,51] останній інтеграл в (2.66) рівний нулю.

Матричний елемент переходу для гамільтоніана \hat{H}'_2 , обчислений на основі функцій (2.63), має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{2} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{i}{V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{\Omega} exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}^{\prime}) \cdot \boldsymbol{r}] u_{\boldsymbol{k}}^{*} j_{z} V_{\alpha\beta} \times \\ \times \left[\xi_{\alpha}(\boldsymbol{q}, j) + \xi_{\beta}(\boldsymbol{q}, j) \right] (q_{x} + q_{y} + q_{z}) u_{\boldsymbol{k}} j_{z} d\boldsymbol{r} \int \Phi^{*}(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) \times \\ \times \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right] \Phi(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n} .$$

$$(2.67)$$

Для розрахунку інтеграла по квантовим числам гармонічних осциляторів використаємо співвідношення для однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) акустичних мод:

$$\int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) b_j(q) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n = \sqrt{N_{q j}};$$

$$\int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) b_j^*(q) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n = \sqrt{N_{q j} + 1}.$$
 (2.68)

Прийнявши до уваги (1.65) та (1.66), отримаємо для цих інтегралів

$$\sqrt{N_{q\,j}} \approx \sqrt{N_{q\,j} + l} \approx \left[\frac{k_B T}{\hbar \,\omega_j(q)}\right]^{l/2} = \left[\frac{k_B T}{\hbar \,v_j \,q}\right]^{l/2}, \qquad (2.69)$$

де v_j - поздовжня та поперечні швидкості звуку в кристалі.

Тоді інтеграл по квантовим числам гармонічних осциляторів для однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) акустичних мод визначається з виразу:

$$\int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right] \times \\ \times \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n = \left[\frac{k_B T}{\hbar \, v_j \, \boldsymbol{q}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ -\exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \end{cases}$$
(2.70)

Інтеграл по координатам в (2.67) представимо у виді:

$$I(q) = i \int_{\Omega} exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] u_{\mathbf{k} j_{z}}^{*} V_{\alpha\beta} [\xi_{\alpha}(\mathbf{q}, j) + \xi_{\beta}(\mathbf{q}, j)] (q_{x} + q_{y} + q_{z}) u_{\mathbf{k} j_{z}} d\mathbf{r} =$$

= $i E_{AK} q \frac{a_{0}^{3}}{4} = i I_{0} \frac{a_{0}^{3}}{4}$, (2.71)

де $\Omega = \frac{a_0^{3}}{4}$ - об'єм елементарної комірки; E_{AK} - деякий ефективний потенціал деформації.

Величина E_{AK} для електронів зони провідності визначається на основі амплітуд Блоха $u_{k \ j_z}$, представлених в [52,53]:

$$u_{k\,l/2} = \left(iaS - \frac{b - c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{+}}{k}R_{-} + \frac{b + c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{-}}{k}R_{+} + c\frac{k_{z}}{k}Z\right)\binom{l}{0} - \frac{b - c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{-}}{k}R_{-} + \frac{b - c\sqrt{2}}{k}\frac{k_{-}}{k}R_{-} + \frac{b - c\sqrt{2}}{k}\frac{k_{-}}{k}R$$

$$-b\left(\frac{k_{z}}{k}R_{+}-\frac{k_{+}}{k}\frac{Z}{\sqrt{2}}\right)\binom{0}{l};$$

$$u_{k\,l/2} = \left(iaS + \frac{b+c\,\sqrt{2}}{2}\frac{k_{+}}{k}R_{-} - \frac{b-c\,\sqrt{2}}{2}\frac{k_{-}}{k}R_{+} + c\,\frac{k_{z}}{k}Z\right)\binom{0}{l} + (2.72)$$

$$+b\left(\frac{k_{z}}{k}R_{-} - \frac{k_{-}}{k}\frac{Z}{\sqrt{2}}\right)\binom{1}{0},$$

де X, Y, Z - амплітуди Люттінгера-Кона; $k_{\pm} = k_x \pm k_y$; $R_{\pm} = (X \pm i Y)/\sqrt{2}$; $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ та $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ - спінори Паулі .

Коефіцієнти а, b, с в (2.72) визначаються з виразів:

$$a^{2} = \frac{1}{D} \left(\Delta + \frac{3}{2} \varepsilon' \right) \left(\Delta + \varepsilon' \right) \varepsilon'; b^{2} = \frac{\Delta^{2}}{3D} \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right); c^{2} = \frac{2}{3D} \left(\Delta + \frac{3}{2} \varepsilon' \right) \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right);$$

$$D = \left(\Delta + \frac{3}{2} \varepsilon' \right) \left(\Delta + \varepsilon' \right) \varepsilon' + \left(\Delta + \varepsilon' \right)^{2} \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right) + \frac{1}{2} \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right) \varepsilon'^{2},$$

$$(2.73)$$

де $\varepsilon', \Delta, \varepsilon_g$ визначаються з (1.2).

Інтегрування в (2.71) на основі функцій (2.72) дає шість величин *I*₀ для LO та TO мод, а також для переходів між спіновими станами [53]:

$$\begin{aligned} \left|I_{0,1/2,1/2}^{LO}\right|^{2} &= q^{2} \left\{a^{2}C + c^{2}l + b^{2}m + \left(\frac{b^{2}}{2} - c^{2}\right)(l - m) - e_{3}^{2}\left[2b^{2}m + 2c^{2}l + \left(\frac{b^{2}}{2} - c^{2}\right)(3l - 3m - 4n)\right] + 2e_{3}^{4}\left(\frac{b^{2}}{2} - c^{2}\right)(l - m - 2n)\right\}^{2}; \\ \left|I_{0,1/2,-1/2}^{LO}(q)\right|^{2} &= \frac{q^{4}}{k^{2}}\left(1 - e_{3}^{2}\right) \left\{\left[\left(\frac{b^{2}}{2} - \frac{bc}{\sqrt{2}}\right)m - \frac{bc}{\sqrt{2}}l\right]^{2} + \frac{1}{2}\left(1 - e_{3}^{2}\right)\left[\left(\frac{b^{2}}{2} - \frac{bc}{\sqrt{2}}\right)m - \frac{bc}{\sqrt{2}}l\right]^{2}\right\} \right\} \end{aligned}$$
$$-\frac{bc}{\sqrt{2}}l\left[\left(\frac{b^{2}}{2}+\frac{bc}{\sqrt{2}}\right)(l-m-2n)+\frac{l}{8}\left(l-e_{3}^{2}\right)\left(\frac{b^{2}}{2}+\frac{bc}{\sqrt{2}}\right)(l-m-2n)^{2}\right]\right];$$

$$\left|I_{0,1/2,1/2}^{TO(1)}(q)\right|^{2}=\frac{q^{6}}{4k^{4}}\left(l-e_{3}^{2}\right)\left(\frac{b^{2}}{2}+\frac{bc}{\sqrt{2}}\right)^{2}n^{2};$$

$$\left|I_{0,1/2,-1/2}^{TO(1)}(q)\right|^{2}=\frac{q^{4}}{8k^{2}}\left(l-e_{3}^{2}\right)^{2}\left(\frac{b^{2}}{2}+\frac{bc}{\sqrt{2}}\right)^{2}\left[(l-m)^{2}+4n^{2}\right];$$

$$\left|I_{0,1/2,-1/2}^{TO(2)}(q)\right|^{2}=\frac{q^{4}}{4k^{2}}\left(l-e_{3}^{2}\right)\left(l-2e_{3}^{2}\right)^{2}\left(c^{2}-\frac{b}{2}\right)^{2}\left(l-m-2n\right)^{2};$$

$$\left|I_{0,1/2,-1/2}^{TO(2)}(q)\right|^{2}=\frac{q^{6}}{32k^{4}}\left(l-e_{3}^{2}\right)^{2}\left(\frac{b^{2}}{2}+\frac{bc}{\sqrt{2}}\right)^{2}\left(l-m-2n\right)^{2},$$

де l, m, n - деформаційні потенціали рівнів Γ_8 та Γ_7 ; C деформаційний потенціал рівня Γ_6 (величини l, m, n, C визначаються з експерименту); $e_3^2 = \frac{1 + \cos 9}{2} = \frac{q^2}{4k}; \frac{q^2}{k^2} = 2(1 - \cos 9), 9$ - кут між векторами k та k'.

Для оцінки величини ефективного потенціалу деформації E_{AK} для електронів підставимо в (2.74) середні значення коефіцієнтів *a*, *b*, *c* та *cos* 9 :

$$\overline{a} = \overline{b} = \overline{c} = 0.5; \ \cos \vartheta = 0 \ . \tag{2.75}$$

Серед шести величин (2.74) вибираємо найбільше і прирівнюємо коефіцієнт при q до E_{AK} .

Величина *E*_{*AK*} для важких дірок валентної зони визначається на основі ефективного акустичного потенціалу деформації, запровадженого в роботі [54]:

$$E_{AK} = \frac{C_l / C_t + 2}{6 C_l / C_t} \left[a^2 + \frac{C_l}{Ct} \left(b^2 + \frac{d^2}{2} \right) \right], \qquad (2.76)$$

де деформаційні потенціали для важких дірок валентної зони *a,b,d* означені в роботі [55]; величини C_l та C_t визначаються з виразів:

$$C_{l} = (3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/5; \quad C_{t} = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5; \quad (2.77)$$

*C*₁₁, *C*₁₂, *C*₄₄ – пружні константи.

Визначивши таким чином ефективний потенціал деформації *E*_{AK}, з (2.67) на основі (2.70) отримаємо:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / H_{2}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{i \, a_{0}^{3} \, E_{AK}}{4 \, V} \left[\frac{k_{B} T}{2 \, N \, M} \right]^{\frac{1}{2}} \sum_{\boldsymbol{q} \, j} \frac{1}{v_{j}} \times \begin{cases} exp(i \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \\ -exp(-i \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \end{cases}$$
(2.78)

Для обчислення суми по q в (2.78) зробимо наступне спрощення враховуючи квазінеперевний характер зміни величини q, перейдемо від сумування до інтегрування по q:

$$\sum_{q j} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \dots dq_x dq_y dq_z \quad .$$
(2.79)

Далі замінюємо інтегрування по кубу з ребром $\frac{2\pi}{a_0}$ інтегруванням по сфері з ефективним радіусом $\frac{\pi}{a_0}$, перейшовши при цьому від декартових координат до сферичних:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \int_{-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_0} \int_{0}^{2\pi/a_0} \dots \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \int_{0}^{\pi/a_0} \dots \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{0}^{2\pi/a_0} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{V}{(2\pi)^3}$$

Тоді для доданка суми в матричному елементі (2.78), що містить $exp(i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}\,j} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{v_j} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/a_0} \exp(i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_n\,)\,q^2 \sin\theta\,dq\,d\theta\,d\phi\,\,.$$
(2.81)

Направимо вісь "Z" вздовж вектора a_n , тоді вираз для інтеграла прийме вид:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{v_j} I(a_n)_{AK} = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{v_j} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_0} \int_{0}^{\pi/a_0} \exp(iqa_n \cdot \cos\vartheta) q^2 \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \, . \quad (2.82)$$

Інтегрування по кутовим змінним θ і φ дає $\frac{4 \pi q \sin q a_n}{a_n}$, а інтегрування

по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$I(a_n)_{AK} = 4 \pi \frac{\sin Qa_n - Qa_n \cos Qa_n}{a_n^{3}} , \qquad (2.83)$$

де
$$Q = \frac{\pi}{a_0}$$
.

Аналогічний вираз отримаємо і для доданка суми в матричному елементі (2.78), що містить $exp(-i q a_n)$.

З представленої на рис. 2.3 залежності видно, що в межах дії потенціалу взаємодії ($a_n \sim 10^{-10} \, m$) виконується умова:



Рис. 2.3. Залежність функції $\frac{I(a_n)_{AK}}{I(0)_{AK}}$ від a_n .

$$I(a_n)_{AK} = I(0)_{AK} = \frac{4}{3}\pi Q^3 = \frac{4}{3}\frac{\pi^4}{a_0^3}.$$
 (2.84)

Тоді для однієї поздовжньої (LO) коливальної моди в матричному елементі (2.78) отримаємо вираз:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / H_{2}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle_{LO} = \frac{i \pi E_{AK}}{24 v_{LO}} \left[\frac{k_{B}T}{2N M} \right]^{\frac{1}{2}} \times \begin{pmatrix} l \\ l \end{pmatrix}, \qquad (2.85)$$

де матриця $\begin{pmatrix} l \\ l \end{pmatrix}$ означає, що даному матричному елементу відповідає два матричних елемента: один для множника $exp(i q a_n)$, другий - $exp(-i q a_n)$.

Аналогічно для двох поперечних (ТО) коливальних мод отримаємо:

$$\langle x'_{q}, \mathbf{k}' | H'_{2} | x_{q}, \mathbf{k} \rangle_{TO} = \frac{i \, 2 \, \pi \, E_{AK}}{24 \, v_{TO}} \left[\frac{k_{B} T}{2N \, M} \right]^{\frac{1}{2}} \times \begin{pmatrix} l \\ l \end{pmatrix}.$$
 (2.86)

Остаточний вираз для матричного елементу переходу має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / H_{2}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{i \pi E_{AK}}{24 v_{TO}} \left[\frac{k_{B}T}{2N M} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$
(2.87)

З врахуванням цього ймовірність переходу носія заряду при взаємодії з акустичним фононом визначається з виразу [29-35,208]:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{AK} = 2\left[\frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle x_{\boldsymbol{q}}',\boldsymbol{k}'/H_{2}'/x_{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{k} \rangle_{+} \right|^{2} + \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle x_{\boldsymbol{q}}',\boldsymbol{k}'/H_{2}'/x_{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{k} \rangle_{-} \right|^{2} \right] \times \\ \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon) = \frac{\pi^{3}k_{B}T E_{AK}^{2}}{144 N M \hbar} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon),$$

$$(2.88)$$

де $\langle x'_{q}, k' / H'_{2} / x_{q}, k \rangle_{\pm}$ - матричні елементи, що відповідають множникам exp(*i q a_n*) та exp(-*i q a_n*) у виразі (2.78), а також враховано переходи з переворотом спіна (множник 2 перед квадратними дужками) і пружний характер розсіяння носія на акустичному фононі.

Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.88) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок з підстановкою відповідного значення ефективного потенціалу деформації E_{AK} .

2.5. Потенціал взаємодії носіїв заряду з неполярним оптичним фононом

Запишемо потенціальну енергію взаємодії носія заряду з неполярним оптичним фононом у виді [56]:

$$H'_{H\Pi O} = \boldsymbol{Q} \cdot \boldsymbol{W}^{0}(\boldsymbol{r}) \quad , \tag{2.89}$$

де $W^0(\mathbf{r})$ - оптичний деформаційний потенціал, який є періодичною функцією з періодом, рівним періоду кристалічної решітки; $Q = Q_1 - Q_2$, $Q_s(s = 1, 2)$ - зміщення атомів елементарної комірки.

Відомо, що при оптичних коливаннях центр маси елементарної комірки майже не зміщується. Тоді для векторів поляризації $\xi_s(\mathbf{q}, j)$ (s = 1,2) виконуються співвідношення [10]:

$$M_{x} \xi_{1}(\mathbf{q}, j)^{2} + M_{B} \xi_{2}(\mathbf{q}, j)^{2} = M ; M_{x} \xi_{1}(\mathbf{q}, j) + M_{B} \xi_{2}(\mathbf{q}, j) = 0, \quad (2.90)$$

де $M_x = x M_{Al} + (l - x) M_{A2};$ $M = x M_{Al} + (l - x) M_{A2} + M_B$ - маса елементарної комірки твердого розчину $Al_x A2_{l-x} B$ (A1, A2 – елементи другої групи; B- елемент шостої групи).

Звідси отримаємо:

$$\xi_{1}(\mathbf{q}, j) = \left(\frac{M_{B}}{M_{x}}\right)^{1/2} \xi(\mathbf{q}, j); \ \xi_{2}(\mathbf{q}, j) = -\left(\frac{M_{x}}{M_{B}}\right)^{1/2} \xi(\mathbf{q}, j), \ (2.91)$$

де $\xi(\mathbf{q}, j)$ - одиничний вектор, що визначає напрямок зміщення атома M_x при коливання решітки.

Тоді для різниці цих двох векторів поляризації можна записати:

$$\xi_{1}(\mathbf{q}, j) - \xi_{2}(\mathbf{q}, j) = \frac{M_{x} + M_{B}}{\sqrt{M_{x} M_{B}}} \xi(\mathbf{q}, j) = \frac{M}{\sqrt{M_{x} M_{B}}} \xi(\mathbf{q}, j) .$$
(2.92)

Враховуючи це співвідношення, для вектора $Q = Q_1 - Q_2$ отримаємо вираз:

$$\boldsymbol{Q} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \xi(\boldsymbol{q},j) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right] . (2.93)$$

Остаточний вираз для потенціальної енергії взаємодії носія заряду з неполярним оптичним фононом матиме вид:

$$H'_{H\Pi O} = \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q},j) \cdot \boldsymbol{W}^0(\boldsymbol{r}) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.94)

Зауважимо, що надалі зміна координат носія заряду буде розглядатися тільки в межах однієї елементарної комірки, тобто, гамільтоніан (2.94) стає близькодіючим.

Для обчислення матричного елементу переходу вибираємо хвильову функцію системи "носій заряду + неполярний оптичний фонон" у виді:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n), \qquad (2.95)$$

де $\Phi(x_1, x_2...x_n)$ - хвильова функція системи незалежних гармонічний осциляторів, що залежить від чисел заповнення $x_1, x_2...x_n$.

Матричний елемент переходу для гамільтоніана $\hat{H}'_{H\Pi O}$, обчислений на основі функцій (2.95), має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{H\Pi O}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N \omega_{j}(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ \times \int_{\Omega} exp[i(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}^{\prime}) \cdot \boldsymbol{r}] \xi(\boldsymbol{q}, j) \cdot \boldsymbol{W}^{0}(\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r} \int \Phi^{*}(x_{1}, x_{2}...x_{n}) \times \\ \times \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i\boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i\boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right] \Phi(x_{1}, x_{2}...x_{n}) dx_{1} dx_{2}...dx_{n} .$$

$$(2.96)$$

Інтеграл по координатам носія заряду в (2.96) представимо у виді:

$$\int_{\Omega} exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] \,\xi(\mathbf{q}, j) \cdot \mathbf{W}^{0}(\mathbf{r}) \,d\mathbf{r} = \frac{a_{0}^{2}}{4} \frac{a_{0}}{\Omega} \int_{\Omega} exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] \times \\ \times \xi(\mathbf{q}, j) \cdot \mathbf{W}^{0}(\mathbf{r}) \,d\mathbf{r} = \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} , \qquad (2.97)$$

де $\Omega = \frac{a_0^3}{4}$ - об'єм елементарної комірки; $E_{H\Pi O}$ - деякий ефективний потенціал деформації.

Оцінка величини ефективного потенціалу деформації $E_{H\Pi O}$ для електронів зони провідності проводиться на основі результатів роботи [56], згідно якої інтеграл по елементарній комірці від функції $\xi(q, j) \cdot W^{0}(r)$ означався на амплітудах Блоха (2.72):

$$I_{j_z j'_z} = \frac{a_0}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k j'_z}^* \xi(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) \cdot \boldsymbol{W}^0(\boldsymbol{r}) u_{k j_z} d\boldsymbol{r} . \qquad (2.98)$$

Використання функцій Блоха для обчислення (2.98) дає наступні вирази для так званих констант оптичного потенціалу деформації:

$$d_{0} = \frac{a_{0}}{\Omega} \int_{\Omega} X W_{y}^{0}(\mathbf{r}) Z d\mathbf{r};$$

$$d_{I} = \frac{a_{0}}{\Omega} \int_{\Omega} S W_{x}^{0}(\mathbf{r}) X d\mathbf{r}.$$
(2.99)

Оцінка цих констант, проведена в роботі [56], показує, що виконується умова :

$$d_0 >> d_1$$
 . (2.100)

Враховуючи, що точний вид функції $W^0(r)$ невідомий, приймалося, що для електронів зони провідності величина $E_{H\Pi O}$ рівна найбільшому із значень констант оптичного потенціалу деформації:

$$E_{H\Pi O} = d_0 \quad . \tag{2.101}$$

Величина $E_{H\Pi O}$ для важких дірок валентної зони визначається на основі ефективного оптичного потенціалу деформації, запровадженого в роботах [57-59]:

$$E_{H\Pi O} = \frac{M_x + M_B}{2(M_x M_{Te})^{1/2}} \left[\frac{C_t \left(\frac{C_l}{C_t} + 2\right)}{2\rho \omega_{LO}^2 a_0^2} \right]^{1/2} d_0 , \qquad (2.102)$$

1/2

де ρ - густина кристалу; $\omega_{LO} = \omega(0)$ частота поздовжніх оптичних коливань при $q \to 0$; C_l , C_t визначаються з виразів (2.77).

Визначивши таким чином ефективний потенціал деформації $E_{H\Pi O}$ з (2.96) на основі (2.101) та (2.102) отримаємо:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \hat{H}_{H\Pi O} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N \omega_{j}(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} \times \\ \times \int \Phi^{*}(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \right] \times$$

$$\times \Phi(x_{1}, x_{2} \dots x_{n}) dx_{1} dx_{2} \dots dx_{n} .$$

$$(2.103)$$

Для розрахунку інтеграла по квантовим числам гармонічних осциляторів використаємо співвідношення (2.68) для поглинання та випромінювання фононів відповідно:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \widehat{H}_{H\Pi O} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N \, \omega_{j}(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} \times \\ \times \begin{cases} \sqrt{N_{\boldsymbol{q}\,j}} \, \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \\ \sqrt{N_{\boldsymbol{q}\,j} + 1} \, \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \end{cases} .$$

$$(2.104)$$

Якщо врахувати наявність однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) коливальних мод, то матричний елемент переходу буде мати вид:

$$\langle x_{q}^{\prime}, \mathbf{k}^{\prime} / \hat{H}_{H\Pi O} / x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{V} \sum_{q} \left[\frac{\hbar}{2N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} \times \\ \left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{N_{q \, LO}}{\omega_{LO}}} \exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, LO} + 1}{\omega_{LO}}} \exp(-i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, TOI}}{\omega_{TOI}}} \exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \exp(-i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, TO2}}{\omega_{TO2}}} \exp(i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q \, TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \exp(-i \, \mathbf{q} \, \mathbf{a}_{n}), \end{array}$$

$$(2.105)$$

де ω_{LO} , ω_{TO1} , ω_{TO2} значення частот оптичних коливань, що відповідають залежностям $\omega_j(q)$ (j=4,5,6) при $q \to 0$.

Для обчислення суми по q в (2.105) зробимо наступне спрощення враховуючи квазінеперевний характер зміни величини q, перейдемо від сумування до інтегрування по q:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \dots dq_{x} dq_{y} dq_{z} \quad .$$
(2.106)

Далі замінюємо інтегрування по кубу з ребром $\frac{2\pi}{a_0}$ інтегруванням по сфері з

ефективним радіусом $\frac{\pi}{a_0}$, перейшовши при цьому від декартових координат

до сферичних:

$$\frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} dq_{x} dq_{y} dq_{z} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \int_{0}^{2\pi/a_{0}} dq \, d\theta \, d\phi \qquad (2.107)$$

Тоді для доданків суми в матричному елементі (2.105), що містять $exp(i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\begin{split} \sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow & \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{0}^{2\pi \pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}) q^{2} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \times \\ & \times \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases} , (2.108) \end{split}$$

а для доданків суми в матричному елементі (2.105), що містять $exp(-i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}) q^{2} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\phi \times \\ \times \frac{a_{0}^{2}}{4} E_{H\Pi O} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}} LO + I}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}} TOI + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}} TOI + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}} TO2 + I}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.109)

Для обчислення інтегралу в (2.108) направимо вісь "Z" вздовж вектора a_n , тоді вираз для інтеграла прийме вид:

$$I(a_n) = \int_{0}^{2\pi \pi} \int_{0}^{\pi/a_0} \int_{0}^{0} exp(iqa_n \cdot \cos \vartheta) q^2 \sin \theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \,.$$
(2.110)

Інтегрування по кутовим змінним θ і φ дає $\frac{4 \pi q \sin q a_n}{a_n}$, а інтегрування

по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$I(a_n) = 4 \pi \frac{\sin Qa_n - Qa_n \cos Qa_n}{a_n^{3}} , \qquad (2.111)$$

де $Q = \frac{\pi}{a_0}$.

Аналогічний вираз отримаємо і при обчисленні інтеграла в (2.109). Вираз (2.111) еквівалентний виразу (2.83) і характеризується залежністю $I(a_n)$, представленою на рис. 2.3. З цієї залежності видно, що в межах дії потенціалу взаємодії ($a_n \sim 10^{-10} \, m$) виконується умова:

$$I(a_n) = I(0) = \frac{4}{3}\pi Q^3 = \frac{4}{3}\frac{\pi^4}{a_0^3}.$$
 (2.112)

121

;

Тоді для сум в (2.108) та (2.109) отримаємо наступні вирази:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{24} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\pi}{a_{0}} E_{H\Pi O} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q\,LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q\,TO1}}{\omega_{TO1}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q\,TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases} ; \qquad (2.113)$$

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{24} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{l}{2}} \frac{\pi}{a_{0}} E_{HIIO} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q\,LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q\,TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q\,TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.114)

На основі цих співвідношень отримаємо остаточний вираз для матричного елемента:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{H\Pi O} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\pi}{24 a_{0}} E_{H\Pi O} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \ LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \ TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \ TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \ TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$

$$\langle x_{q}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{H\Pi O} / x_{q}, \boldsymbol{k} \rangle = \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{\pi}{24 a_{0}} E_{H\Pi O} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q \ LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.115)

Припустимо, що частоти двох поперечних коливальних мод TO1 та TO2 однакові:

$$\omega_{TO1} = \omega_{TO2} = \omega_{TO} \,. \tag{2.116}$$

З врахуванням цього ймовірність переходу носія заряду при взаємодії з неполярним оптичним фононом визначається з виразу [29-35,208]:

$$\begin{split} W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{H\Pi O} &= 2 \bigg[\frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{LO+} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + \frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{TO1+} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon \\ &- \hbar \omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{TO2+} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{LO-} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) + \\ &+ \frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{TO1-} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} \big| W_{TO2-} \big|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \bigg] =$$
(2.117)
$$&= \frac{\pi^3 E_{H\Pi O}}{288 a_0^{-2} N} \frac{M}{M_x M_B} \bigg\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \big[N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \big] \bigg\} \\ &+ \frac{2}{\omega_{TO}} \big[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \big] \bigg\} , \end{split}$$

де $W_{LO\pm}$; $W_{TO\pm}$ - відповідні матричні елементи (2.115) для поздовжньої та поперечної мод і для процесів поглинання та випромінювання фононів, а також враховано переходи з переворотом спіна (множник 2 перед квадратними дужками). Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.117) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок з підстановкою відповідного значення ефективного потенціалу деформації E_{HIIO} .

2.6. Потенціал взаємодії носіїв заряду з полярним оптичним фононом

Оптичні коливання кристалічної решітки напівпровідникових сполук А^ПВ^{VI} супроводжуються коливаннями дипольного моменту елементарної комірки. Зміна дипольного моменту елементарної комірки, що містить два атоми, визначається з виразу:

$$\boldsymbol{d} = e\left(\boldsymbol{Q}_1 - \boldsymbol{Q}_2\right) = e\,\boldsymbol{Q}\,. \tag{2.118}$$

Приймаючи до уваги вирази (2.91) – (2.93), для величини *d* отримаємо співвідношення:

$$\boldsymbol{d} = e \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q},j) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right] . (2.119)$$

Зміна дипольного моменту елементарної комірки супроводжується зміною вектора поляризації елементарної комірки, що визначається виразом:

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

$$(2.120)$$

Слід зауважити, що вектор поляризації (2.120) є функцією від дискретних змінних $P = P(n_1, n_2, n_3)$. Такий вибір функціональної залежності вектора поляризації обумовлений тим, що надалі при застосуванні принципу близькодії до процесу розсіяння носія заряду (тобто, до розсіяння носія на одній елементарній комірці) дискретність кристалічної решітки відіграє важливу роль.

Як відомо з електростатики [60], наявність поляризації $P(n_1, n_2, n_3)$ означає, що в кристалічній решітці існує зв'язаний заряд з об'ємною густиною, яка визначається наступним чином:

$$\rho = - \operatorname{div} \boldsymbol{P}(n_1, n_2, n_3) . \tag{2.121}$$

Для визначення густини зв'язаного заряду необхідно визначити похідні вектора поляризації по координатах $\frac{\partial P_{\alpha}}{\partial x_{\alpha}} (\alpha = x, y, z)$. Враховуючи те, що компоненти вектора поляризації $P(n_1, n_2, n_3)$ є функціями дискретних змінних $(n_1; n_2; n_3)$, замінимо частинну похідну компоненти вектора поляризації по координаті *х* наступним виразом:

$$\frac{\partial P_x}{\partial x} \rightarrow \frac{P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x} + \frac{P_x(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_x(n_1, n_2, n_3)}{\Delta x},$$
(2.122)

де $\Delta x = \frac{a_0}{2}$ для структури цинкової обманки.

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_2+1)\right]\right\} - exp\left\{i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_2+1)\right]\right\} = exp\left\{i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_3+1)\right]\right\}$$

$$= exp\left\{ i\frac{a_{0}}{2} \left[q_{x}(n_{2} + n_{3}) + q_{y}(n_{1} + n_{3}) + q_{z}(n_{1} + n_{2}) \right] \right\} \times \left\{ exp\left[i\frac{a_{0}}{2} (q_{y} + q_{z}) \right] - 1 \right\}$$
(2.123)

Враховуючи співвідношення (2.33) розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx l+i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z).$$
(2.124)

125

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.125)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}\left(q_{y}+q_{z}\right)\right]-1\right\}.$$
(2.126)

Враховуючи (2.33), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx 1-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)$$
(2.127)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1 + 1, n_2, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left(-iqa_{n}\right).$$
(2.128)

Використовуючи (2.125) та (2.128), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{x}(n_{1}+1,n_{2},n_{3})-P_{x}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \frac{4 e}{a_{0}^{3}} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_{j}(q)} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{l/2} \xi_{x}(q,j)i \times (2.130) \times (q_{y}+q_{z}) \left[b_{j}(q) exp(i q a_{n}) - b_{j}^{*}(q) exp(-i q a_{n}) \right].$$

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}.$$
(2.131)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx l+i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z) . \qquad (2.132)$$

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.133)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1,n_2+1,n_3) - P_x(n_1,n_2,n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}.$$
(2.134)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx 1 - i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)$$
(2.135)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_x(n_1, n_2, n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z}) \exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$
(2.136)

Використовуючи (2.133) та (2.136), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{x}(n_{1},n_{2}+1,n_{3})-P_{x}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \frac{4 e}{a_{0}^{3}} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_{j}(q)} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{l/2} \xi_{x}(q,j) i \times (q_{x}+q_{z}) \left[b_{j}(q) exp(i q a_{n}) - b_{j}^{*}(q) exp(-i q a_{n}) \right].$$
(2.137)

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1,n_2,n_3+1) - P_x(n_1,n_2,n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\right]-1\right\}.$$
(2.138)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)\right] \approx 1+i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y).$$
(2.139)

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_x(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.140)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1,n_2,n_3+1) - P_x(n_1,n_2,n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}--exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}\left(q_{x}+q_{y}\right)\right]-1\right\}.$$
(2.141)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)\right] \approx l - i\frac{a_0}{2}(q_x+q_y)$$
(2.142)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.120) у виразі $P_x(n_1,n_2,n_3+1) - P_x(n_1,n_2,n_3)$:

$$-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left(-iqa_{n}\right).$$
(2.143)

Використовуючи (2.140) та (2.143), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{x}(n_{1},n_{2},n_{3}+1)-P_{x}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = \frac{4e}{a_{0}^{3}}\sum_{q,j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_{j}(q)}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\right]^{1/2}\xi_{x}(q,j)i\times (2.144)\times(q_{x}+q_{y})\left[b_{j}(q)\exp(iqa_{n})-b_{j}^{*}(q)\exp(-iqa_{n})\right].$$

Використовуючи (2.130), (2.137) та (2.144), на основі співвідношення (2.122) отримаємо вираз для частинної похідної компоненти вектора **Р** по координаті *x*:

$$\frac{\partial P_x}{\partial x} = \frac{8 e}{a_0^{-3}} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \xi_x(\boldsymbol{q}, j) i \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.145)

Так як мінімальне значення Δy та Δz для структури цинкової обманки рівне $\frac{a_0}{2}$, то процедура визначення похідних $\frac{\partial P_y}{\partial y}$ та $\frac{\partial P_z}{\partial z}$ така ж сама, як і для $\frac{\partial P_x}{\partial x}$. Тоді отримаємо остаточні вирази для частинних похідних компонентів вектора **P** по координатах *у* та *z*:

$$\frac{\partial P_{y}}{\partial y} = \frac{8 e}{a_{0}^{3}} \sum_{\boldsymbol{q} j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{1/2} \xi_{y}(\boldsymbol{q}, j) i \left(q_{x} + q_{y} + q_{z}\right) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n})\right].$$
(2.146)

$$\frac{\partial P_z}{\partial z} = \frac{8 e}{a_0^{-3}} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \xi_z(\boldsymbol{q}, j) i \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^*(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.147)

Густина зв'язаного заряду визначається з співвідношення:

$$\rho = -\frac{8ie}{a_0^{3}} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} \left[\xi_x(\boldsymbol{q},j) + \xi_y(\boldsymbol{q},j) + \xi_z(\boldsymbol{q},j) \right] \times \\ \times \left(q_x + q_y + q_z \right) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.148)

Приймемо до уваги, що вектор $\boldsymbol{\xi}(\boldsymbol{q}, j)$ є одиничним і його компоненти, а також компоненти вектора \boldsymbol{q} , задовольняють умові:

LO- мода:

$$\xi_x(\boldsymbol{q}, j) = 1; \xi_y(\boldsymbol{q}, j) = \xi_z(\boldsymbol{q}, j) = 0;$$

 $q_x = q; q_y = q_z = 0.$
(2.149)

ТО- мода:

$$\begin{aligned} \xi_{x}(\boldsymbol{q}, j) &= 0; \ \xi_{y}(\boldsymbol{q}, j) = 1; \ \xi_{z}(\boldsymbol{q}, j) = 0; \\ q_{x} &= q; \ q_{y} = q_{z} = 0. \\ \xi_{x}(\boldsymbol{q}, j) &= 0; \ \xi_{y}(\boldsymbol{q}, j) = 0; \ \xi_{z}(\boldsymbol{q}, j) = 1; \\ q_{x} &= q; \ q_{y} = q_{z} = 0. \end{aligned}$$
(2.150)

Тоді для густини зв'язаного заряду отримаємо:

$$\rho = -\frac{8ie}{a_0^{3}} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} q \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) - b_j^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right]. (2.151)$$

Зауважимо, що густина заряду не залежить від координат в межах елементарної комірки $\rho = const$. Зв'язаний заряд створює електричне поле, потенціал якого φ визначається з рівняння Пуассона:

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = \frac{8ie}{a_0^{-3}\varepsilon_0} \sum_{q \ j} \left[\frac{\hbar}{2N\omega_j(q)} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} q \times$$

$$\times \left[b_j(q) \exp(i \ q \ a_n) - b_j^{*}(q) \exp(-i \ q \ a_n) \right].$$
(2.150)

Для розв'язку рівняння Пуассона зробимо наступні спрощення:

Замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії:

$$R = \gamma_{\Pi O} a_0 , \qquad (2.151)$$

де γ_{ПО} - підгоночний параметр, який підбирається таким чином, щоб узгодити теорію та експеримент.



Рис. 2.4. Елементарна комірка структури цинкової обманки. Довжина діагоналі $AB = \sqrt{3} a_0$.

Накладемо обмеження на радіус взаємодії: величина цього радіуса міняється в межах від нуля до половини більшої діагоналі елементарної комірки (див. рис. 2.4), тобто, для $\gamma_{\Pi O}$ виконується умова:

$$0 < \gamma_{\Pi O} \le \frac{\sqrt{3}}{2} . \tag{2.152}$$

З математики відомо [61], що так званий потенціал об'ємних мас

$$\varphi(x, y, z) = \iiint_T \left(\frac{\rho}{4\pi\varepsilon_0}\right) \frac{d\zeta \ d\zeta \ d\eta}{\sqrt{\left(\zeta - x\right)^2 + \left(\zeta - y\right)^2 + \left(\eta - z\right)^2}} , \qquad (2.153)$$

де *T* - об'єм сфери радіуса *R*, задовольняє рівнянню Пуассона $\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$.

Так як густина зв'язаного заряду є постійною всередині сфери, то потенціал буде мати сферичну симетрію.

Перейдемо в (2.153) до сферичних координат:

$$\varphi(r) = \frac{\rho}{4 \pi \varepsilon_0} \int_0^R r'^2 dr' \int_0^2 d\phi' \int_0^\pi \frac{\sin \theta' d\theta'}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2 r r' \cos \theta'}}.$$
 (2.154)

Введемо нову змінну R' замість 9, виходячи з виразу:

$$R'^{2} = r^{2} + r'^{2} - 2rr'\cos\theta', \qquad (2.155)$$

і врахуємо, що

$$R' dR' = r r' \sin \theta \ d\theta \ . \tag{2.156}$$

Тоді отримаємо:

$$\varphi(r) = \frac{1}{2r} \frac{\rho}{\varepsilon_0} \int_0^R r' dr' \int_{|r-r'|}^{|r+r'|} \frac{dR'}{2r} = \frac{1}{2r} \frac{\rho}{\varepsilon_0} \int_0^R r' \left(\left| r+r' \right| - \left| r-r' \right| \right) dr'. \quad (2.157)$$

Для випадку $0 < r \le R$ останній інтеграл в (2.157) буде мати вид:

$$\varphi(r) = \frac{1}{2r} \frac{\rho}{\varepsilon_0} \left[\int_0^r r' \left(r + r' - r + r' \right) dr' + \int_r^R r' \left(r + r' + r - r' \right) dr' \right] =$$

$$= \frac{\rho}{2\varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right).$$
(2.158)

Звідси отримаємо енергію взаємодії носія заряду з полярними оптичними коливаннями кристалічної решітки:

$$H'_{\Pi O} = e\varphi = -\frac{4ie^2}{a_0^3 \varepsilon_0} (R^2 - \frac{r^2}{3}) \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2N \omega_j(q)} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} q \times \\ \times \left[b_j(q) exp(iq a_n) - b_j^*(q) exp(-iq a_n) \right].$$
(2.159)

Слід зауважити, що гамільтоніан (2.159) є близькодіючим, так як в ньому приймається до уваги взаємодія носія заряду з полем дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки.

Для обчислення матричного елементу переходу вибираємо хвильову функцію системи "носій заряду + полярний оптичний фонон" у виді:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{k} \mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n), \qquad (2.160)$$

де $\Phi(x_1, x_2...x_n)$ - хвильова функція системи незалежних гармонічний осциляторів, що залежить від чисел заповнення $x_1, x_2...x_n$.

Матричний елемент переходу для гамільтоніана $\hat{H}'_{\Pi O}$, обчислений на основі функцій (2.160), має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \hat{H}'_{\Pi O} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = -\frac{4 \, i \, e^2}{a_0^{-3} \varepsilon_0 \, V} \int exp[i \, \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{r}] \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) d\boldsymbol{r} \times \\ \times \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2 \, N \, \omega_j(\boldsymbol{q}\,)} \frac{M}{M_x M_B} \right]^{1/2} q \int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n\,) \left[b_j(\boldsymbol{q}) exp(i \, \boldsymbol{q}\, \boldsymbol{a}_n) - (2.161) \right] \\ - b_j^*(\boldsymbol{q}) exp(-i \, \boldsymbol{q}\, \boldsymbol{a}_n) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n\,) dx_1 dx_2 \dots dx_n \,, \, \boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'.$$

Інтегрування по координатам носія заряду проводиться в межах сфери радіуса *R*. Перейдемо до сферичних координат, направивши вісь "Z" вздовж вектора *q*:

$$I(q)_{\Pi O} = \int exp[i \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}] \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) d\mathbf{r} = \int_0^R \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} exp(i q r \cos \theta) \times \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi \, .$$

$$(2.162)$$

Інтегрування по кутовим змінним θ і φ дає $4\pi \frac{\sin qr}{r} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right)$, а

інтегрування по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$I(q)_{\Pi O} = \frac{8}{3} \pi \frac{3 \sin qR - 3 q R \cos qR - q^3 R^3 \cos qR}{q^5} .$$
(2.163)

Попередній розрахунок показує, що хвильовий вектор носія заряду k (i, відповідно, вектор q) міняються в межах від 0 до $10^9 \, M^{-1}$ при зміні енергії носія від 0 до $10 \, k_B T$ (що відповідає енергії ~ 99 % загальної кількості носіїв заряду) в інтервалі температур $4.2 - 300 \, K$. З представленої на рис. 2.5 залеж-



ності видно, що в межах зміни величини хвильового вектора носія *k* виконується умова:

$$I(q)_{\Pi O} \approx I(0)_{\Pi O} = \frac{16}{15} \pi R^5 = \frac{16}{15} \pi a_0^5 \gamma_{\Pi O}^5 . \qquad (2.164)$$

Для розрахунку інтеграла по квантовим числам гармонічних осциляторів в (2.161) використаємо співвідношення (2.68) для поглинання та випромінювання фононів відповідно:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \widehat{H}_{\Pi O}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = - \frac{64\pi \, i \, e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{\Pi O}^{5}}{15 \, \varepsilon_{0} \, V} \sum_{\boldsymbol{q} \, j} \left[\frac{\hbar}{2 \, N \, \omega_{j}(\boldsymbol{q})} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \boldsymbol{q} \times \\ \times \begin{cases} \sqrt{N_{\boldsymbol{q} \, j}} \, \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \\ \sqrt{N_{\boldsymbol{q} \, j} + 1} \, \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_{n}) \end{cases}$$

$$(2.165)$$

Якщо врахувати наявність однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) коливальних мод, то матричний елемент переходу буде мати вид:

$$\langle x_{q}^{\prime}, \mathbf{k}^{\prime} / \hat{H}_{IIO}^{\prime} / x_{q}, \mathbf{k} \rangle = - \frac{64\pi i e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{IIO}^{5}}{15 \varepsilon_{0} V} \sum_{q} \left[\frac{\hbar}{2 N \omega_{j}(q)} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} q \times \\ \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q LO}}{\omega_{LO}}} exp(i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q LO} + 1}{\omega_{LO}}} exp(i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI}}{\omega_{TOI}}} exp(-i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} exp(-i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} exp(i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} exp(i q a_{n}) \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} exp(-i q a_{n}), \end{cases}$$
(2.166)

Для обчислення суми по q в (2.166) зробимо наступне спрощення враховуючи квазінеперевний характер зміни величини q, перейдемо від сумування до інтегрування по q:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \dots dq_{x} dq_{y} dq_{z} \quad .$$
(2.167)

Далі замінюємо інтегрування по кубу з ребром $\frac{2\pi}{a_0}$ інтегруванням по сфері з ефективним радіусом $\frac{\pi}{a_0}$, перейшовши при цьому від декартових координат

до сферичних:

$$\frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} dq_{x} dq_{y} dq_{z} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \int_{0}^{2\pi/a_{0}} dq \, d\theta \, d\phi \qquad (2.168)$$

Тоді для доданків суми в матричному елементі (2.166), що містять $exp(i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar}{2N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{1/2} \times \\ \times \int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \exp(i\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_{n}) q^{3} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\phi \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \end{cases}, \quad (2.169)$$

а для доданків суми в матричному елементі (2.166), що містять $exp(-i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar}{2N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \right]^{1/2} \times \\ \times \int_{0}^{2\pi \pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \exp(-i\boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) q^{3} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \end{cases}$$
(2.170)

Для обчислення інтегралу в (2.169) направимо вісь "Z" вздовж вектора a_n , тоді вираз для інтеграла прийме вид:

$$F(a_n)_{\Pi O} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/a_0} \int_0^{\pi/a_0} exp(i q a_n \cos \vartheta) q^3 \sin \theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \, . \qquad (2.171)$$

Інтегрування по кутовим змінним heta і φ дає $4 \pi \frac{q^2 \sin q a_n}{a_n}$, а

інтегрування по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$F(a_n)_{\Pi O} = 4 \pi \frac{2 \cos Q a_n + 2 Q a_n \sin Q a_n - Q^2 a_n^2 \cos Q a_n - 2}{a_n^4} , \qquad (2.172)$$

де $Q = \frac{\pi}{a_0}$.

Аналогічний вираз отримаємо і при обчисленні інтеграла в (2.170).

З представленої на рис. 2.6 залежності видно, що в межах дії потенціалу взаємодії ($a_n \sim 10^{-10} \, m$) виконується умова:



Рис. 2.6. Залежність функції $\frac{F(a_n)_{\Pi O}}{F(0)_{\Pi O}}$ від a_n .

$$F(a_n)_{\Pi O} \approx F(0)_{\Pi O} = \pi Q^4 = \frac{\pi^5}{a_0^4} .$$
 (2.173)

Тоді для сум в (2.169) та (2.170) отримаємо наступні вирази:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{\pi^{2} V}{8 a_{0}^{4}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q \ LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.174)

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{\pi^{2} V}{8 a_{0}^{4}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q LO} + I}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + I}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.175)

На основі цих співвідношень отримаємо остаточний вираз для матричного елемента:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} / \hat{H}_{\Pi O}^{\prime} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = -\frac{8\pi^{3} i e^{2} \gamma_{\Pi O}^{5}}{15 \varepsilon_{0} a_{0}^{2}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} IO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases}; (2.176)$$

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \hat{H}'_{\Pi O} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = -\frac{8\pi^{3} i e^{2} \gamma_{\Pi O}^{5}}{15 \varepsilon_{0} a_{0}^{2}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.177)

Приймаючи до уваги співвідношення (2.116), ймовірність переходу носія заряду при взаємодії з полярним оптичним фононом визначається з виразу [62-72]:

$$\begin{split} W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{\Pi O} &= \left[\frac{2\pi}{\hbar} |W_{LO+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TOI+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon \\ &- \hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TO2+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{LO-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) + \\ &+ \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TOI-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TO2-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] = (2.178) \\ &= \frac{64\pi^7 \gamma_{\Pi O}}{225 \varepsilon_0^2 a_0^4 N} \frac{M}{M_x M_B} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}, \end{split}$$

де $W_{LO\pm}$; $W_{TO\pm}$ - відповідні матричні елементи (2.176) та (2.177) для поздовжньої та поперечної мод і для процесів поглинання та випромінювання фононів.

Необхідно зауважити, що сильна степенева залежність підгоночного параметра $\gamma_{\Pi O}$ (параметр входить у вираз (2.178) у десятій степені) різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.178) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок.

2.7. Розсіяння носіїв заряду на близькодіючому потенціалі п'єзоелектричних коливань гратки

В ідеальному діелектрику (решітка без вільних носіїв заряду) індукція електричного поля рівна нулю. Тоді, приймаючи до уваги те, що в мікроскопічних моделях розсіяння діелектрична проникність кристалу $\kappa = 1$, отримаємо :

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \ \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \ \boldsymbol{E} + \boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{0} \ . \tag{2.179}$$

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

В 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 рівна нулю. Тоді для компонент вектора поляризації $P_i = e_{ikl} S_{kl} (i, k, l = 1, 2, 3)$ (використовується прийняте в тензорній алгебрі сумування по індексам, що двічі повторюються !) можна отримати:

$$P_{1} = e_{123} S_{23} + e_{132} S_{32} = 2 e_{14} S_{23};$$

$$P_{2} = e_{213} S_{13} + e_{231} S_{31} = 2 e_{14} S_{13};$$

$$P_{3} = e_{312} S_{12} + e_{321} S_{21} = 2 e_{14} S_{12}.$$
(2.180)

Використовуючи вираз (2.60) для макроскопічного тензора деформації, отримаємо відповідні вирази для компонент вектора поляризації:

$$P_{I} = 2 i e_{I4} \sum_{\boldsymbol{q} j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_{2}(\boldsymbol{q}, j) + \xi_{3}(\boldsymbol{q}, j) \right] \times \\ \times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) - b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right];$$

$$(2.181)$$

$$P_{2} = 2 i e_{14} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_{1}(q, j) + \xi_{3}(q, j) \right] \times$$

$$\times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(q) exp(i q a_{n}) - b_{j}^{*}(q) exp(-i q a_{n}) \right];$$

$$P_{3} = 2 i e_{14} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_{1}(q, j) + \xi_{2}(q, j) \right] \times$$

$$\times \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right) \left[b_{j}(q) exp(i q a_{n}) - b_{j}^{*}(q) exp(-i q a_{n}) \right].$$
(2.182)
$$(2.183)$$

3 іншого боку, маємо

$$E = -grad \ \varphi \ , \quad div \ E = \frac{\rho}{\varepsilon_0} = -\frac{div \ P}{\varepsilon_0} \ .$$
 (2.184)

Звідси отримаємо рівняння Пуассона для потенціалу взаємодії:

$$\Delta \varphi = \frac{\operatorname{div} \mathbf{P}}{\varepsilon_0} \ . \tag{2.185}$$

Враховуючи те, що компоненти вектора поляризації $P(n_1, n_2, n_3)$ є функціями дискретних змінних $(n_1; n_2; n_3)$, замінимо частинну похідну компоненти вектора поляризації по координаті *х* наступним виразом:

$$\frac{\partial P_{1}}{\partial x} \rightarrow \frac{P_{1}(n_{1}+1,n_{2},n_{3}) - P_{1}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{P_{1}(n_{1},n_{2}+1,n_{3}) - P_{1}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} + \frac{P_{1}(n_{1},n_{2},n_{3}+1) - P_{1}(n_{1},n_{2},n_{3})}{\Delta x} ,$$
(2.186)

де $\Delta x = \frac{a_0}{2}$ для структури цинкової обманки.

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_l + 1, n_2, n_3) - P_l(n_l, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}==exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\right]-1\right\}$$

$$(2.187)$$

Враховуючи співвідношення (2.33) розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx 1 + i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z) . \qquad (2.188)$$

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_l + l, n_2, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} = (2.189)$$
$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})exp(iqa_{n}).$$

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_l + 1, n_2, n_3) - P_l(n_l, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$-exp\left\{-i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3+1)+q_z(n_1+n_2+1)\right]\right\}+\\+exp\left\{-i\frac{a_0}{2}\left[q_x(n_2+n_3)+q_y(n_1+n_3)+q_z(n_1+n_2)\right]\right\}=$$
$$= exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} \times \left\{1-exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\right]\right\}.$$
(2.190)

Враховуючи (2.33), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)\right] \approx 1-i\frac{a_0}{2}(q_y+q_z)$$
(2.191)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^{*}(\boldsymbol{q})$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_l + l, n_2, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{y}+q_{z})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$
(2.192)

Використовуючи (2.189) та (2.192), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{I}(n_{I}+1,n_{2},n_{3})-P_{I}(n_{I},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = -2e_{I4}\sum_{q,j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(q)}\right]^{1/2} \left[\xi_{2}(q,j)+\xi_{3}(q,j)\right] \left(q_{x}+q_{y}+q_{z}\right) \left(q_{y}+q_{z}\right) \left[b_{j}(q)\exp(iqa_{n})+b_{j}^{*}(q)\exp(-iqa_{n})\right].$$
(2.193)

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_0}{2}[q_x(n_2+n_3+1)+q_y(n_1+n_3)+q_z(n_1+n_2+1)]\right\}$$

$$-exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$

$$=exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times.$$

$$\times\left\{exp\left[i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}.$$
(2.194)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд:

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx l+i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)$$
 (2.195)

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2 + l, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.196)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2 + 1, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$-exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2}+1)\right]\right\}++exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==-exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\right]-1\right\}.$$
(2.197)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)\right] \approx 1 - i\frac{a_0}{2}(q_x+q_z)$$
(2.198)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2 + l, n_3) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z}) \exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\} = (2.199)$$
$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{z})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$

Використовуючи (2.194) та (2.197), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{I}(n_{I},n_{2}+1,n_{3})-P_{I}(n_{I},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = -2e_{I4}\sum_{q,j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(q)}\right]^{1/2} \left[\xi_{2}(q,j)+\xi_{3}(q,j)\right] \left(q_{x}+q_{y}+q_{z}\right) \left(q_{x}+q_{z}\right) \left[b_{j}(q)\exp(iqa_{n})+b_{j}^{*}(q)\exp(-iqa_{n})\right].$$
(2.200)

Коефіцієнт при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_l(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}--exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}=$$
(2.201)
$$=exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times$$

$$\times \left\{ exp\left[i\frac{a_0}{2} (q_x + q_y) \right] - 1 \right\}.$$

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[i\frac{a_0}{2}(q_x + q_y)\right] \approx l + i\frac{a_0}{2}(q_x + q_y).$$
(2.202)

Тоді отримаємо остаточний вираз для коефіцієнта при $b_j(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp\left\{i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}).$$
(2.203)

Коефіцієнт при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_l(n_1, n_2, n_3)$ буде мати наступний вираз:

$$-exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3}+1)+q_{y}(n_{1}+n_{3}+1)+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}++exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}==-exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}\left[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})\right]\right\}\times\times\left\{exp\left[-i\frac{a_{0}}{2}\left(q_{x}+q_{y}\right)\right]-1\right\}.$$
(2.204)

Враховуючи співвідношення (2.33) та (2.41), розкладемо експоненту в ряд

$$exp\left[-i\frac{a_0}{2}(q_x + q_y)\right] \approx l - i\frac{a_0}{2}(q_x + q_y)$$
(2.205)

і отримаємо вираз для коефіцієнта при $b_j^*(q)$ у квадратних дужках співвідношення (2.181) у виразі $P_l(n_1, n_2, n_3 + 1) - P_l(n_1, n_2, n_3)$:

$$i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left\{-i\frac{a_{0}}{2}[q_{x}(n_{2}+n_{3})+q_{y}(n_{1}+n_{3})+q_{z}(n_{1}+n_{2})]\right\} =$$

$$=i\frac{a_{0}}{2}(q_{x}+q_{y})\exp\left(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_{n}\right).$$
(2.206)

Використовуючи (2.201) та (2.204), отримаємо вираз :

$$\frac{P_{I}(n_{I},n_{2},n_{3}+1)-P_{I}(n_{I},n_{2},n_{3})}{\Delta x} = -2e_{I4}\sum_{q\,j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(q)}\right]^{1/2} \left[\xi_{2}(q,j)+ \xi_{3}(q,j)\right] \left(q_{x}+q_{y}+q_{z}\right) \left(q_{x}+q_{y}\right) \left[b_{j}(q)\exp(i\,q\,a_{n})+b_{j}^{*}(q)\exp(-i\,q\,a_{n})\right].$$
(2.207)

Використовуючи (2.193), (2.200) та (2.207), на основі співвідношення (2.186) отримаємо вираз для частинної похідної компоненти вектора **Р** по координаті *x*:

$$\frac{\partial P_{I}}{\partial x} \rightarrow -4e_{I4} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_{j}(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_{2}(\boldsymbol{q}, j) + \xi_{3}(\boldsymbol{q}, j) \right] \left(q_{x} + q_{y} + q_{z} \right)^{2} \times \\ \times \left[b_{j}(\boldsymbol{q}) \exp(i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) + b_{j}^{*}(\boldsymbol{q}) \exp(-i \boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) \right].$$
(2.208)

Так як мінімальне значення Δy та Δz для структури цинкової обманки рівне $\frac{a_0}{2}$, то процедура визначення похідних $\frac{\partial P_y}{\partial y}$ та $\frac{\partial P_z}{\partial z}$ така ж сама, як і

для $\frac{\partial P_x}{\partial x}$. Тоді отримаємо остаточні вирази для частинних похідних компонентів вектора **P** по координатах *у* та *z*:

$$\frac{\partial P_2}{\partial y} \rightarrow -4e_{14} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_1(q,j) + \xi_3(q,j) \right] \left(q_x + q_y + q_z \right)^2 \times (2.209) \\ \times \left[b_j(q) \exp(i q a_n) + b_j^*(q) \exp(-i q a_n) \right]. \\ \frac{\partial P_2}{\partial z} \rightarrow -4e_{14} \sum_{q j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_1(q,j) + \xi_2(q,j) \right] \left(q_x + q_y + q_z \right)^2 \times (2.210) \\ \times \left[b_j(q) \exp(i q a_n) + b_j^*(q) \exp(-i q a_n) \right].$$

Густина зв'язаного заряду визначається із співвідношення:

$$\rho = -div \mathbf{P} = 8e_{14} \sum_{\mathbf{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\mathbf{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_1(\mathbf{q},j) + \xi_2(\mathbf{q},j) + \xi_3(\mathbf{q},j) \right] \times \\ \times \left(q_x + q_y + q_z \right)^2 \left[b_j(\mathbf{q}) exp(i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_n) + b_j^*(\mathbf{q}) exp(-i\mathbf{q}\,\mathbf{a}_n) \right].$$
(2.211)

Зауважимо, що густина заряду не залежить від координат в межах елементарної комірки $\rho = const$. Зв'язаний заряд створює електричне поле, потенціал якого φ визначається з рівняння Пуассона:

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} = -\frac{8e_{14}}{\varepsilon_0} \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_1(\boldsymbol{q},j) + \xi_2(\boldsymbol{q},j) + \xi_3(\boldsymbol{q},j) \right] \times \\ \times \left(q_x + q_y + q_z \right)^2 \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \right].$$
(2.212)

Для розв'язку рівняння Пуассона зробимо наступні спрощення:

Замінимо елементарну комірку сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії:

$$R = \gamma_{\Pi E} a_0 , \qquad (2.213)$$

151

де $\gamma_{\Pi E}$ - підгоночний параметр, який підбирається таким чином, щоб узгодити теорію та експеримент.

Накладемо обмеження на радіус взаємодії: величина цього радіуса міняється в межах від нуля до половини більшої діагоналі елементарної комірки (див. рис. 2.4), тобто, для $\gamma_{\Pi E}$ виконується умова:

$$0 < \gamma_{\Pi E} \le \frac{\sqrt{3}}{2} . \tag{2.214}$$

Розв'язок рівняння Пуассона (2.212) проводиться тим же методом, що і для випадку розсіяння носія заряду на полярному оптичному фононі (див. співвідношення (2.153)- (2.158)), який дає:

$$\varphi(r) = \frac{\rho}{2\varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right). \tag{2.215}$$

1/0

Звідси отримаємо енергію взаємодії носія заряду з п'єзоелектричними коливаннями кристалічної решітки:

$$H'_{\Pi E} = e\varphi = \frac{4e_{14}e}{\varepsilon_0} \left(R^2 - \frac{r^2}{3} \right) \sum_{q,j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(q)} \right]^{1/2} \left[\xi_1(q,j) + \xi_2(q,j) + \xi_2(q,j) + \xi_3(q,j) \right] \left(q_x + q_y + q_z \right)^2 \left[b_j(q) \exp(i q a_n) + b_j^*(q) \exp(-i q a_n) \right].$$
(2.216)

Слід зауважити, що гамільтоніан (2.216) є близькодіючим, так як в ньому приймається до уваги взаємодія носія заряду з полем дефекту тільки в межах однієї елементарної комірки.

Для обчислення матричного елементу переходу вибираємо хвильову функцію системи "носій заряду + п'єзоелектричний фонон" у виді:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \mathbf{k} \mathbf{r}) \Phi(x_1, x_2 \dots x_n), \qquad (2.217)$$

де $\Phi(x_1, x_2...x_n)$ - хвильова функція системи незалежних гармонічний осциляторів, що залежить від чисел заповнення $x_1, x_2...x_n$.

Матричний елемент переходу для гамільтоніана \hat{H}'_{IIE} , обчислений на основі функцій (2.217), має вид:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \hat{H}_{\Pi E}' / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{4e_{14}e}{\varepsilon_0 V} \int exp[i\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}] \left(R^2 - \frac{r^2}{3}\right) d\boldsymbol{r} \times \\ \times \sum_{\boldsymbol{q},j} \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_j(\boldsymbol{q})}\right]^{1/2} \left[\xi_1(\boldsymbol{q},j) + \xi_2(\boldsymbol{q},j) + \xi_3(\boldsymbol{q},j)\right] \left(q_x + q_y + q_z\right)^2 \times \quad (2.218) \\ \times \int \Phi^*(x_1, x_2 \dots x_n) \left[b_j(\boldsymbol{q}) \exp(i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_n) + b_j^*(\boldsymbol{q}) \exp(-i\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_n)\right] \times \\ \times \Phi(x_1, x_2 \dots x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad , \qquad \boldsymbol{q} = \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}' \,.$$

Інтегрування по координатам носія заряду проводиться в межах сфери радіуса *R*. Обчислення цього інтегралу проводиться тим же методом, що і для випадку розсіяння носія заряду на полярному оптичному фононі (див. співвідношення (2.162)- (2.164)), який дає:

$$I(q)_{\Pi E} \approx I(0)_{\Pi E} = \frac{16}{15} \pi R^5 = \frac{16}{15} \pi a_0^5 \gamma_{\Pi E}^5 . \qquad (2.219)$$

Для розрахунку інтеграла по квантовим числам гармонічних осциляторів в (2.218) використаємо співвідношення (2.68) для поглинання та випромінювання фононів відповідно:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}^{\prime}, \boldsymbol{k}^{\prime} | \hat{H}_{\Pi E}^{\prime} | x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{64\pi \, e_{14} e \, a_0^{-5} \gamma_{\Pi E}^{-5}}{15 \, \varepsilon_0 \, V} \sum_{\boldsymbol{q}, j} \left[\frac{\hbar}{2NM \omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left[\xi_l(\boldsymbol{q}, j) + \frac{1}{2NM \omega_j(\boldsymbol{q})} \right]^{1/2} \left$$

$$+ \xi_2(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) + \xi_3(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{j}) \Big[(q_x + q_y + q_z)^2 \times \begin{cases} \sqrt{N_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}}} \, \exp(\boldsymbol{i}\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{N_{\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{j}} + 1} \, \exp(\boldsymbol{-}\,\boldsymbol{i}\,\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{a}_n) \end{cases}$$
(2.220)

Подальший розрахунок цього матричного елемента необхідно провести окремо для акустичної та оптичної гілок коливань кристалічної решітки.

2.7.1. Потенціал взаємодії носіїв заряду з акустичними коливаннями п'єзоелектричного поля

При розрахунку матричного елемента (2.220) для акустичної гілки коливань кристалічної решітки приймемо до уваги практично пружний характер розсіяння носія заряду (див. співвідношення (1.65) та (1.66)), а також вираз (1.46). Тоді матричний елемент для однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) коливальних мод прийме вид:

$$\langle x_{q}', \mathbf{k}' | \hat{H}_{\Pi E}' | x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{64\pi \, e_{14} e \, a_{0}^{5} \gamma_{\Pi E}^{-5}}{15 \, \varepsilon_{0} \, V} \sum_{q} \left[\frac{k_{B} T}{2NM} \right]^{1/2} [\xi_{1}(q, j) + \xi_{2}(q, j) + \xi_{2}(q, j) + \xi_{2}(q, j) + \xi_{3}(q, j)] \frac{(q_{x} + q_{y} + q_{z})^{2}}{q} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}} \right) \times \begin{cases} exp(i \, q \, a_{n}) \\ exp(-i \, q \, a_{n}) \end{cases}$$

$$(2.221)$$

Якщо врахувати, що вектор o(q, j) є одиничний і задовольняє умовам (2.149) та (2.150), то з (2.221) отримаємо:

$$\langle x_{\boldsymbol{q}}', \boldsymbol{k}' / \hat{H}'_{\Pi E} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{64\pi \ e_{14} e \ a_0^{-5} \gamma_{\Pi E}^{-5}}{15 \ \varepsilon_0 \ V} \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\frac{k_B T}{2NM} \right]^{1/2} \times \left\{ \begin{array}{c} x_{\boldsymbol{q}} \\ 2NM \end{array} \right\}^{1/2} \times \left\{ \begin{array}{c} x_{\boldsymbol{q}} \\ y_{\boldsymbol{L}0} \\ y_{\boldsymbol{L}0} \end{array} \right\} \times \left\{ \begin{array}{c} exp(i \ \boldsymbol{q} \ \boldsymbol{a}_n) \\ exp(-i \ \boldsymbol{q} \ \boldsymbol{a}_n) \end{array} \right\}^{1/2} \right\}$$
(2.222)

Для обчислення суми по q в (2.222) зробимо наступне спрощення враховуючи квазінеперевний характер зміни величини q, перейдемо від сумування до інтегрування по q:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \dots dq_{x} dq_{y} dq_{z} \quad .$$
(2.223)

Далі замінюємо інтегрування по кубу з ребром $\frac{2\pi}{a_0}$ інтегруванням по сфері з ефективним радіусом $\frac{\pi}{a_0}$, перейшовши при цьому від декартових координат до сферициих:

до сферичних:

$$\frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} dq_{x} dq_{y} dq_{z} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \int_{0}^{2\pi} ...q^{2} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\phi \qquad (2.224)$$

Тоді для доданків суми в матричному елементі (2.222), що містять $exp(i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{k_{B}T}{2NM} \right]^{1/2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}} \right) \times$$

$$\times \int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \exp(i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}) q^{3} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi ,$$
(2.225)

а для доданків суми в матричному елементі (2.222), що містять $exp(-i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{k_{B}T}{2NM}\right]^{1/2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right) \times$$

$$\times \int_{0}^{2\pi \pi} \int_{0}^{\pi/a_0} \sup_{\phi} (-i \mathbf{q} \mathbf{a}_n) q^3 \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\phi \quad .$$
(2.226)

Обчислення інтегралів в (2.225) та (2.226) проводиться тим же методом, що і для випадку розсіяння носія заряду на полярному оптичному фононі (див. співвідношення (2.171)- (2.173)), який дає:

$$F(a_n)_{\Pi AK} \approx F(0)_{\Pi AK} = \pi Q^4 = \frac{\pi^5}{a_0^4}; Q = \frac{\pi}{a_0}$$
 (2.227)

На основі цього співвідношення отримаємо остаточний вираз для матричного елемента:

$$\langle x_{q}', \mathbf{k}' / \hat{H}_{\Pi E}' / x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{8\pi^{3} e_{14} e \, a_{0} \, \gamma_{\Pi E}^{5}}{15 \, \varepsilon_{0}} \left[\frac{k_{B} T}{2NM} \right]^{1/2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}} \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \,, \, (2.228)$$

де матриця $\begin{pmatrix} l \\ l \end{pmatrix}$ означає, що даному матричному елементу відповідає два матричних елемента: один для множника $exp(i q a_n)$, другий - $exp(-i q a_n)$.

Звідси ймовірність переходу носія заряду при взаємодії з п'єзоакустичним фононом визначається з виразу [29-35,208]:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}')_{\Pi AK} = \frac{2\pi}{\hbar} |W_{+}|^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{-}|^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) =$$

$$= \frac{128\pi^{7} e_{14}^{2} e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{\Pi E}^{10} k_{B} T}{225 \varepsilon_{0}^{2} \hbar N M} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \qquad (2.229)$$

де W_+ ; W_- - матричні елементи, що відповідають множникам $exp(i q a_n)$ та $exp(-i q a_n)$ у (2.228), а також враховано пружний характер розсіяння носія заряду. Необхідно зауважити, що сильна степенева залежність підгоночного параметра $\gamma_{\Pi E}$ (параметр входить у вираз (2.229) у десятій степені) різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.229) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок.

2.7.2. Потенціал взаємодії носіїв заряду з оптичними коливаннями п'єзоелектричного поля

При розрахунку матричного елемента (2.220) для оптичної гілки коливань кристалічної решітки необхідно проводити розрахунок компонентів макроскопічного тензора деформації на основі вектора зміщення атомів елементарної комірки $Q = Q_1 - Q_2$. Якщо врахувати співвідношення (2.92), то у матричному елементі (2.220) необхідно зробити заміну:

$$o(\boldsymbol{q}, j) \rightarrow \frac{M}{\sqrt{M_x M_B}} o(\boldsymbol{q}, j)$$
 (2.230)

Тоді отримаємо:

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

$$(2.231)$$

Якщо врахувати наявність однієї поздовжньої (LO) та двох поперечних (TO) коливальних мод, а також властивості вектора $\xi(q, j)$ (див. (2.149)-(2.150)), то матричний елемент переходу буде мати вид:

$$\langle x'_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k}' / \hat{H}'_{\Pi O \Pi} / x_{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{k} \rangle = \frac{64\pi \, e_{14} e \, a_0^{-5} \gamma_{\Pi E}^{-5}}{15 \, \varepsilon_0 \, V} \times$$

$$\left\{ \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, LO}}{\omega_{LO}}} \, exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, LO} + I}{\omega_{LO}}} \, exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI}}{\omega_{TOI}}} \, exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \, exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \, exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \, exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \, exp(i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q} \, TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \, exp(-i \, \boldsymbol{q} \, \boldsymbol{a}_n) \end{cases}$$

$$(2.232)$$

Для обчислення суми по *q* в (2.232) зробимо наступне спрощення враховуючи квазінеперевний характер зміни величини *q*, перейдемо від сумування до інтегрування по *q*:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \dots dq_{x} dq_{y} dq_{z} \quad .$$
(2.233)

Далі замінюємо інтегрування по кубу з ребром $\frac{2\pi}{a_0}$ інтегруванням по сфері з ефективним радіусом $\frac{\pi}{a_0}$, перейшовши при цьому від декартових координат до сферичних:

$$\frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} \int_{-\pi/a_{0}}^{\pi/a_{0}} dq_{x} dq_{y} dq_{z} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \int_{0}^{2\pi n/a_{0}} dq \, d\theta \, d\phi \qquad (2.234)$$

Тоді для доданків суми в матричному елементі (2.232), що містять $exp(i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{1/2} \times \\ \times \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} \exp(i\boldsymbol{q} \boldsymbol{a}_{n}) q^{4} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI}}{\omega_{TOI}}} \end{cases} , \qquad (2.235)$$

а для доданків суми в матричному елементі (2.232), що містять $exp(-i q a_n)$, отримаємо вираз:

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^{3}} \left[\frac{\hbar M}{2NM_{x}M_{B}} \right]^{1/2} \times \\ \times \int_{0}^{2\pi \pi} \int_{0}^{\pi/a_{0}} exp(-i\boldsymbol{q}\boldsymbol{a}_{n}) q^{4} \sin\theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{\boldsymbol{q}TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.236)

Для обчислення інтегралу в (2.235) направимо вісь "Z" вздовж вектора a_n , тоді вираз для інтеграла прийме вид:

$$F(a_n)_{\Pi O \Pi} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/a_0} \int_0^{\theta} exp(i q a_n \cos \theta) q^4 \sin \theta \, dq \, d\theta \, d\varphi \, . \qquad (2.237)$$

Інтегрування по кутовим змінним heta і φ дає $4 \pi rac{q^3 \sin q a_n}{a_n}$, а

інтегрування по радіальній змінній дає наступний вираз для інтеграла:

$$F(a_n)_{\Pi O\Pi} = \frac{\pi}{a_n^5} \left(-4Q^3 a_n^3 \cos Q a_n + 12Q^2 a_n^2 \sin Q a_n + 24Q a_n \cos Q a_n - \frac{\pi}{a_n^5} - 24 \sin Q a_n \right), \quad (2.238)$$

де $Q = \frac{\pi}{a_0}$.

Аналогічний вираз отримаємо і при обчисленні інтеграла в (2.236).

З представленої на рис. 2.7 залежності видно, що в межах дії потенціалу взаємодії ($a_n \sim 10^{-10} \, m$) виконується умова:



Рис. 2.7. Залежність функції $\frac{F(a_n)_{\Pi O \Pi}}{F(0)_{\Pi O \Pi}}$ від a_n .

Тоді для сум в (2.235) та (2.236) отримаємо наступні вирази:

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{\pi^{3} V}{10 a_{0}^{5}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q \ LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TOI}}{\omega_{TOI}}}; \\ \sqrt{\frac{N_{q \ TO2}}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.240)

$$\sum_{q} \dots \rightarrow \frac{\pi^{3} V}{10 a_{0}^{5}} \left[\frac{\hbar}{2 N} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \right]^{1/2} \times \begin{cases} \sqrt{\frac{N_{q LO} + 1}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + 1}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + 1}{\omega_{TO2}}} \end{cases}$$
(2.241)

На основі цих співвідношень отримаємо остаточний вираз для матричного елемента:

$$\langle x_{q}^{\prime}, \mathbf{k}^{\prime} / \hat{H}_{\Pi O \Pi}^{\prime} / x_{q}, \mathbf{k} \rangle = \frac{32\pi^{4} e_{I4} e \gamma_{\Pi E}^{5}}{75 \varepsilon_{0}} \times \left\{ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{N_{q LO}}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q LO} + I}{\omega_{LO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q IO} + I}{\omega_{IO}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI}}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TOI} + I}{\omega_{TOI}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + I}{\omega_{TO2}}} \\ \sqrt{\frac{N_{q TO2} + I}{\omega_{TO2}}} \end{array} \right.$$
(2.242)

Приймаючи до уваги співвідношення (2.116), ймовірність переходу носія заряду при взаємодії з п'єзооптичним фононом визначається з виразу [29-35,208]:

$$\begin{split} W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')_{\Pi O\Pi} &= \left[\frac{2\pi}{\hbar} |W_{LO+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TOI+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon \\ &-\hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TO2+}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{LO-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) + \\ &+ \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TOI-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) + \frac{2\pi}{\hbar} |W_{TO2-}|^2 \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] = (2.243) \\ &= \frac{32^2 \pi^9 \gamma_{\Pi E}}{75^2 \varepsilon_0^2 N} \frac{e^2 e_{I4}^2}{M_x M_B} \frac{M}{M_x M_B} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon \\ &- \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \right\}, \end{split}$$

де $W_{LO\pm}$; $W_{TO\pm}$ - відповідні матричні елементи (2.242) для поздовжньої та поперечної мод і для процесів поглинання та випромінювання фононів.

Необхідно зауважити, що сильна степенева залежність підгоночного параметра $\gamma_{\Pi E}$ (параметр входить у вираз (2.243) у десятій степені) різко обмежує можливість вибору його чисельного значення. Слід відзначити, що вираз для ймовірності переходу (2.243) може бути використаний як для електронів, так і для важких дірок.

Висновки до розділу 2

- Врахування близькодії при розсіянні носія заряду на іонізованій домішці вводить обмеження на характерний радіус кулонівської взаємодії розмірами кристалічної комірки a₀, тобто, допускає представлення r = γ_{IД}a₀, де підгіннний параметр γ_{IД} змінюється в межах [0,1]. В цьому випадку ймовірність розсіювання носія заряду на іонізованій домішці у k -просторі в наближенні ефективної маси демонструє сильну степеневу залежність від γ_{IД} (~ γ_{IД}⁴), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.
- 2. Врахування у кристалі принципу близькодії при розсіянні носія заряду на нейтральній домішці можливе при обмеженні характерного радіусу їх взаємодії половиною сталої гратки. Показано, що моделювання такої взаємодії в рамках моделі Ерджинсоя дозволяє отримати перенормований вираз для ймовірності розсіяння носія заряду на потенціалі нейтральної домішки, що суттєво (у 5 разів) завищує ефективний радіус Бора.
- 3. Моделювання на основі принципу близькодії процесу взаємодії носія заряду з центром статичної деформації виконано видозміною потенціалу взаємодії $U \sim b_0 r^{-2} (b_0 - величина, яка зв'язана з розміром дефекту). Зроблено$ $припущення, що величина <math>b_0$ рівна постійній решітки, тобто, сферичносиметричне поле центру статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки. Це дозволило в рамках наближення ефективної маси визначити вираз для ймовірності переходу носія заряду з стану k в стан k'під час розсіяння на близькодіючому потенціалі центру статичної деформації.
- 4. Врахування принципу близькодії в описі взаємодії носія заряду з акустичним фононом в кристалі зумовлює необхідність вибору вихідного гамільтоніана взаємодії у вигляді функції дискретних змінних. З врахуванням дискретності кристалічної решітки розроблено методику розрахунку компонентів тензора деформації. Представлено обчислення величин ефективного акустичного потенціалу деформації Е_{AK} для електронів та дірок. Роз-

роблено методику інтегрування за величиною хвильового вектора фонона в межах зони Бриллюена, що дозволило розрахувати ймовірності переходу носія заряду з стану k в стан k' під час розсіяння на близькодіючому потенціалі акустичного фонона з врахуванням пружного характеру розсіяння.

- 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. В наближенні ефективної маси здійснено обчислення величин ефективного оптичного потенціалу деформації E_{HIIO} для електронів та дірок. Обґрунтовано методику інтегрування за величиною хвильового вектора фонона в межах зони Бриллюена, що дозволило розрахувати ймовірності переходу носія заряду з стану k в стан k' під час розсіяння на близькодіючому потенціалі неполярного оптичного фонона, де враховано непружний характер розсіяння та розсіяння з переворотом спіна.
- 6. 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. Розроблено методику розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, що відповідає вектору поляризації елементарної комірки. Представлено метод розв'язання рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{IIO} a_0 (0 < \gamma_{IIO} \le \sqrt{3}/2)$. Для обчислення матричного елементу переходу носія заряду з стану k в стан k' розроблено: а) спосіб інтегрування за координатами електрона та проведено оцінку отриманого виразу для хвильового вектора носія заряду k в межах $0 \div 10^9 \ m^{-1}$; б) спосіб інтегрування за хвильовим вектором фонона та проведено оцінку отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії ($\sim 10^{-10} \ m$). Визначено вираз для ймовірності переходу носія заряду при розсіяння на близькодіючому потенціалі полярного оптичного фонона, де враховано

непружний характер розсіяння. Встановлено, що ймовірність переходу при даному типі взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від підгінного параметра $\gamma_{\Pi O}$ (~ $\gamma_{\Pi O}^{10}$), що різко обмежує можливість вибору його чисельного значення.

7. Врахування принципу близькодії в разі описі процесу розсіяння носія заряду на акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля визначає вид виразу для макроскопічного вектора поляризації, що виражається через компоненти тензора деформації та п'єзоелектричного тензора, та є функцією дискретних змінних. Представлено методику розрахунку об'ємної густини зв'язаного заряду, який відповідає макроскопічному вектору поляризації. Запропоновано метод розв'язання рівняння Пуассона для потенціалу зв'язаного заряду, що включає заміну елементарної комірки сферою з ефективним радіусом, який визначає радіус дій потенціалу взаємодії $R = \gamma_{\Pi E}$ $a_0 (0 < \gamma_{\Pi E} \le \sqrt{3}/2)$. В рамках наближення ефективної маси представлено: а) спосіб інтегрування за координатами електрона та проведено оцінку отриманого виразу для хвильовий вектор носія заряду k в межах $0 \div$ 10⁹ м⁻¹; б) спосіб інтегрування за хвильови вектором фонона та проведено оцінку отриманого виразу в межах дії потенціалу взаємодії (~10⁻¹⁰ м). Визначено вираз для ймовірності переходу носія заряду під час розсіяння на близькодіючому потенціалі акустичних коливань п'єзоелектричного поля з врахуванням пружного характеру розсіяння, а також вираз для ймовірності переходу носія заряду при розсіяння на близькодіючому потенціалі оптичних коливань п'єзоелектричного поля, де враховано непружний характер розсіяння Встановлено, що ймовірність переходу при даних типах взаємодії демонструє сильну степеневу залежність від підгоночного $\gamma_{\Pi E}$ (~ $\gamma_{\Pi E}^{10}$), що різко обмежує можливість вибору його параметра чисельного значення.

РОЗДІЛ З

Розв'язок стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії

Розглянуті у першому розділі методи розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана мають спільний недолік – в цих методах використовується лінеаризоване, тобто, наближене кінетичне рівняння Больцмана, отримане на основі припущення малого відхилення функції розподілу від рівноважного значення (див. (1.100)). Однак, залишається невідомим, наскільки таке припущення є вірним, наскільки реальна функція розподілу відрізняється від функції, розрахованої на основі цих методів. В цьому розділі буде запропоновано метод побудови розв'язку, який буде справедливий для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.

3.1. Побудова розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії

Припустимо, що перенос заряду здійснюється двома типами носіїв (електронами та важкими дірками, які будуть означатися латинськими індексами), закон дисперсії яких є ізотропний. Розглянемо стаціонарне рівняння Больцмана для однорідного напівпровідника, що знаходиться в ізотермічних умовах, коли магнітне поле напрямлене вздовж осі "Z" $B = \{0, 0, B\}$, а електричне поле має компоненти $E = \{E_1, E_2, 0\}$:

$$\mathbf{v}_{a} \frac{\partial f_{a}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} + \frac{e_{a}\mathbf{E} + e_{a}\left[\mathbf{v}_{a} \times \mathbf{B}\right]}{\hbar} \frac{\partial f_{a}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \int \{W_{a}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{a}(\mathbf{k}') \times \left[1 - f_{a}(\mathbf{k})\right] - W_{a}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{a}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{a}(\mathbf{k}')\right] \} d\mathbf{k}' , \qquad (3.1)$$

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 виді:

$$f_{a}(\boldsymbol{k}) = f_{0a}(\boldsymbol{k}) - \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon); \ a = 1, 2 , \qquad (3.2)$$

де $f_{0a}(\mathbf{k})$ - рівноважна функція Фермі-Дірака відповідно для електронів та важких дірок:

$$f_{01}(\mathbf{k}) = \frac{1}{exp\left[\frac{\varepsilon(\mathbf{k}) - F}{k_BT}\right] + 1}, \quad f_{02}(\mathbf{k}) = \frac{1}{exp\left[\frac{F - \varepsilon(\mathbf{k})}{k_BT}\right] + 1}, \quad F - \text{рівень Фермі;} \quad (3.3)$$

 $\Phi_a(\varepsilon)$ - невідомі функції.

Підставимо (3.2) в (3.1). Тоді для першого доданку в лівій частині рівняння (3.1) для електронної та діркової компонент маємо:

$$\mathbf{v}_{a}\frac{\partial f_{a}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{v}_{a}\left\{\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left[\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)\right]\right\} = -\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\mathbf{v}_{a}\left(\frac{\partial F}{\partial \mathbf{r}} + \frac{E - F}{T}\frac{\partial T}{\partial \varepsilon}\right) - \mathbf{v}_{a}\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \Phi_{a}(\varepsilon)}{\partial \mathbf{r}} - \mathbf{v}_{a}\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\left[\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\right].$$
(3.4)

Враховуючи однорідність напівпровідника та ізотермічні умови спостереження, вираз $v_a \frac{\partial f_a(k)}{\partial r}$ рівний нулю.

Для другого доданку в лівій частині рівняння (3.1) для електронної та діркової компонент маємо:

$$\frac{e_{a}\boldsymbol{E} + e_{a}\left[\boldsymbol{v}_{a} \times \boldsymbol{B}\right]}{\hbar} \left\{ \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \left[\frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \boldsymbol{\Phi}_{1}(\varepsilon) \right] \right\} = \frac{e_{a}\boldsymbol{E} + e_{a}\left[\boldsymbol{v}_{a} \times \boldsymbol{B}\right]}{\hbar} \times \left[\frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} - \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)}{\partial \boldsymbol{k}} - \boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{k}} \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \right].$$
(3.5)

Враховуючи співвідношення

$$\frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \boldsymbol{k}} = \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \hbar \boldsymbol{v}_{a}; \quad [\boldsymbol{v}_{a} \times \boldsymbol{B}] \boldsymbol{v}_{a} = 0 , \qquad (3.6)$$

отримаємо з (3.5):

$$e_{a}\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{a}\,\frac{\partial\,f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon} - \frac{e_{a}}{\hbar}\frac{\partial\,f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}}\boldsymbol{E} - e_{a}\,\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{a}\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}} - \frac{e_{a}}{\hbar}[\boldsymbol{v}_{a}\times\boldsymbol{B}]\frac{\partial\,f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon)}{\partial\,\varepsilon}.$$
(3.7)

Позначимо інтеграл в правій частині рівняння (3.1) через *I* і підставимо в нього (3.2) :

$$I_{a} = \int \{W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{a}(\mathbf{k}') [1 - f_{a}(\mathbf{k})] - W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{a}(\mathbf{k}) [1 - f_{a}(\mathbf{k}')] \} d\mathbf{k}' = \\ = \int \{W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \left[f_{0a}(\mathbf{k}') - \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \Phi_{a}(\varepsilon') \right] \left[1 - f_{0a}(\mathbf{k}) + \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) \right] - \\ - W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \left[f_{0a}(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) \right] \left[1 - f_{0a}(\mathbf{k}') + \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \Phi_{a}(\varepsilon') \right] \right\} d\mathbf{k}' = \\ = \int \{W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{0a}(\mathbf{k}') [1 - f_{0a}(\mathbf{k})] + W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{0a}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) - \\ - W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) [1 - f_{0a}(\mathbf{k})] \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \Phi_{a}(\varepsilon') - W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \times \\ \times \Phi_{a}(\varepsilon') \Phi_{a}(\varepsilon) - W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{0a}(\mathbf{k}) [1 - f_{0a}(\mathbf{k}')] - W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{0a}(\mathbf{k}) \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \times \\ \times \Phi_{a}(\varepsilon') + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') [1 - f_{0a}(\mathbf{k}')] \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \times \\ \times \Phi_{a}(\varepsilon') + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') [1 - f_{0a}(\mathbf{k}')] \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \times \\ \times \Phi_{a}(\varepsilon') + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') [1 - f_{0a}(\mathbf{k}')] \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \times \\ (3.8)$$

$$\times \frac{\partial f_{0a}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon') \boldsymbol{\Phi}_{a}(\varepsilon) \bigg\} d\boldsymbol{k}' = I_{1} + I_{2} ,$$

де введено позначення:

$$I_{1} = \int \left\{ W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k})f_{0a}(\mathbf{k}')\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) - W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k})[1 - f_{0a}(\mathbf{k})]\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \Phi_{a}(\varepsilon') - W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}')f_{0a}(\mathbf{k})\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'} \Phi_{a}(\varepsilon') + W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}')[1 - f_{0a}(\mathbf{k}')]\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon) \right\} d\mathbf{k}';$$

$$I_{2} = \int \left\{ W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'}\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Phi_{a}(\varepsilon') \Phi_{a}(\varepsilon) - W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k}')}{\partial \varepsilon'}\frac{\partial f_{0a}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \times (3.10) \times \Phi_{a}(\varepsilon') \Phi_{a}(\varepsilon) \right\} d\mathbf{k}' :$$

Необхідно зауважити, що в (3.8) приймався до уваги принцип детальної рівноваги, згідно якого в стані рівноваги число носіїв заряду, що приходять в стан k зі стану k' рівне числу носіїв, що виходять з стану k в стан k' за одиницю часу, тобто, виконується рівність:

$$W_{a}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{0a}(\mathbf{k}') [l - f_{0a}(\mathbf{k})] = W_{a}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{0a}(\mathbf{k}) [l - f_{0a}(\mathbf{k}')] .$$
(3.11)

Для обчислення електронної складової *I*₁ використаємо (3.11) і співвідношення:

$$\frac{\partial f_{01}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{k_B T} f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k})]. \qquad (3.12)$$

Тоді отримаємо:

$$\times f_{01}(\mathbf{k}')[1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon') + W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}')[1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon') - W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k})[1 - f_{01}(\mathbf{k}')][1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = = \frac{1}{k_{B}T} \int \left\{ -W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k})^{2} [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon) + W_{1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}')[1 - f_{01}(\mathbf{k})] \right\} \times \times \Phi_{1}(\varepsilon') - W_{1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k})] f_{01}(\mathbf{k}')^{2} \Phi_{1}(\varepsilon') + W_{1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k})] \times \times f_{01}(\mathbf{k}')^{2} \Phi_{1}(\varepsilon') - W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon) + W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k})^{2} \times \times [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_{1}(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = = \frac{1}{k_{B}T} \int \left\{ W_{1}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}') [1 - f_{01}(\mathbf{k})] \Phi_{1}(\varepsilon') - W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \times \times \Phi_{1}(\varepsilon) \right\} d\mathbf{k}' = = \frac{1}{k_{B}T} \int \left\{ W_{1}(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] [\Phi_{1}(\varepsilon') - \Phi_{1}(\varepsilon)] \right\} d\mathbf{k}'.$$
(3.13)

Для обчислення діркової складової *I*₁ використаємо принцип детальної рівноваги (3.11) і співвідношення:

$$\frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{k_B T} f_{02}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{02}(\boldsymbol{k})]. \qquad (3.14)$$

Тоді отримаємо:

$$I_{1p} = \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon) - W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \times \\ \times f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon') + \\ + W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k})] [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k})^2 [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) - W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \times \\ \times \Phi_2(\varepsilon') + W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k})] f_{02}(\mathbf{k}')^2 \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \times \\ \times f_{02}(\mathbf{k}')^2 \Phi_2(\varepsilon') + W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k})^2 \times \\ \times [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \times [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \times [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ = -\frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ + \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \times \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ + \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\mathbf{k}') + \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ + \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] \Phi_2(\mathbf{k}') + \\ \end{bmatrix} d\mathbf{k}' = \\ + \frac{1}{k_B T} \int \{W_2(\mathbf$$

$$\times \Phi_2(\varepsilon) \} d\mathbf{k}' = = -\frac{1}{k_B T} \int \{ W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] [\Phi_2(\varepsilon') - \Phi_2(\varepsilon)] \} d\mathbf{k}' .$$

Для обчислення електронної складової I_2 використаємо принцип детальної рівноваги (3.11) і співвідношення (3.12):

$$I_{2n} = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}') [1 - f_{01}(\mathbf{k})] [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') - W_1(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}') [1 - f_{01}(\mathbf{k})] [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}') [1 - f_{01}(\mathbf{k})] [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') - W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k})^2 [1 - f_{01}(\mathbf{k}')]^2 \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') \langle f_{01}(\mathbf{k}') [1 - f_{01}(\mathbf{k})] - f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \rangle \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') [f_{01}(\mathbf{k}') - f_{01}(\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) - f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') [f_{01}(\mathbf{k}') - f_{01}(\mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) - f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') [f_{01}(\mathbf{k}') - f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k}) - f_{01}(\mathbf{k}) f_{01}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] \Phi_1(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon') [f_{01}(\mathbf{k}') - f_{01}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' . \quad (3.16)$$

Аналогічні обчислення проводимо для діркової складової I_2 і отримаємо:

$$I_{2p} = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') \} d\mathbf{k}' = \\ = \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') - W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k})^2 [1 - f_{02}(\mathbf{k}')]^2 \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') \} d\mathbf{k}' =$$

$$= \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') \langle f_{02}(\mathbf{k}') [1 - f_{02}(\mathbf{k})] - f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \rangle \} d\mathbf{k}' =$$

$$= \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') [f_{02}(\mathbf{k}') - f_{02}(\mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) - f_{02}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' =$$

$$= \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' =$$

$$= \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') [f_{02}(\mathbf{k}') - f_{02}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}' =$$

Використовуючи (3.7), (3.13) та (3.16), отримаємо стаціонарне рівняння Больцмана для електронів:

$$e_{I}\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{I}\,\frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon} - \frac{e_{I}}{\hbar}\left[\boldsymbol{v}_{I}\times\boldsymbol{B}\right]\frac{\partial\,f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}} - \frac{e_{I}}{\hbar}\frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}}\boldsymbol{E} - e_{I}\,\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{I}\Phi_{I}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}} = \\ = \frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{0I}(\boldsymbol{k})[I-f_{0I}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{I}(\varepsilon')-\Phi_{I}(\varepsilon)]\}d\,\boldsymbol{k}' + \\ + \frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}^{2}T^{2}}\int\{W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{0I}(\boldsymbol{k})[I-f_{0I}(\boldsymbol{k}')]\Phi_{I}(\varepsilon)\Phi_{I}(\varepsilon')[f_{0I}(\boldsymbol{k}')-f_{0I}(\boldsymbol{k})]\}d\boldsymbol{k}' \,.$$

$$(3.18)$$

Аналогічно використовуючи (3.7), (3.15) та (3.17), отримаємо стаціонарне рівняння Больцмана для важких дірок:

$$e_{2}\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{2}\,\frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon} - \frac{e_{2}}{\hbar}\,[\boldsymbol{v}_{2}\times\boldsymbol{B}]\frac{\partial\,f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\Phi_{2}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}} - \frac{e_{2}}{\hbar}\,\frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial\,\varepsilon}\frac{\partial\,\Phi_{2}(\varepsilon)}{\partial\,\boldsymbol{k}}\boldsymbol{E} - e_{2}\,\boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{2}\Phi_{2}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}} = \\ = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{2}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{2}(\varepsilon')-\Phi_{2}(\varepsilon)]\}d\,\boldsymbol{k}' +$$
(3.19)

+
$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B^2 T^2} \int \{W_2(\mathbf{k},\mathbf{k}') f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] \Phi_2(\varepsilon) \Phi_2(\varepsilon') [f_{02}(\mathbf{k}') - f_{02}(\mathbf{k})] \} d\mathbf{k}'.$$

Відзначимо, що рівняння (3.18) та (3.19) відрізняються від відомого рівняння Блоха, яке отримане шляхом лінеаризації стаціонарного рівняння Больцмана, наявністю двох останніх доданків у лівій частині рівнянь та наявністю другого доданку в правій частині рівнянь, який відсутній у випадку пружного розсіяння носіїв.

Будемо шукати невідомі функції $\Phi_a(\varepsilon)$ у виді:

$$\Phi_a(\varepsilon) = \sum_{n,\alpha} C^{\alpha}_{na} \hbar k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n \quad , \qquad (3.20)$$

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.

Подставимо (3.20) в стаціонарне рівняння Больцмана (3.18), помножимо це рівняння на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо обидві його частини по хвильовому вектору.

При інтегруванні першого доданку в лівій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат:

$$\int e_{I} \boldsymbol{E} \, \boldsymbol{v}_{I} \, \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \hbar \, \boldsymbol{k}_{\beta}(\varepsilon) \varepsilon^{m} \, d \, \boldsymbol{k} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} e_{I} \hbar \int (E_{I} v_{II} + E_{2} v_{I2}) \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \boldsymbol{k}_{\beta}(\varepsilon) \times$$

$$\times \varepsilon^{m} \boldsymbol{k}(\varepsilon)^{2} \sin \theta \, d\boldsymbol{k} \, d\theta \, d\phi \, .$$
(3.21)

Врахуємо співвідношення

$$v_{\alpha} = \frac{\hbar k_{\alpha}(\varepsilon)}{m^{*}} = \frac{k_{\alpha}(\varepsilon)}{\hbar k(\varepsilon) \frac{d k(\varepsilon)}{d\varepsilon}}$$
(3.22)

для випадку ізотропного закону дисперсії, а також перейдемо до інтегрування по енергії:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} e_{I}\hbar\int(E_{I}v_{II} + E_{2}v_{I2})\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin9\,dk\,d9\,d\varphi =
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}E_{I}\int\frac{k_{I}(\varepsilon)}{m^{*}}\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin9\,dk\,d9\,d\varphi +
+ \frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}E_{2}\int\frac{k_{2}(\varepsilon)}{m^{*}}\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin9\,dk\,d9\,d\varphi = (3.23)
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}E_{I}\int\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}\varepsilon^{m}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{I}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin9\,d9\,d\varphi +
+ \frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}E_{2}\int\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}\varepsilon^{m}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{I}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin9\,d9\,d\varphi -
+ \frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}E_{2}\int\frac{\partial f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}\varepsilon^{m}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{I}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin9\,d9\,d\varphi .$$

Врахуємо, що в (3.22) для інтеграла по кутовим змінним виконується рівність:

$$\int_{0}^{\pi^{2}\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4}{3}\pi \, k(\varepsilon)^{2} \delta_{\alpha\beta} \,, \qquad (3.24)$$

де $\delta_{\alpha\beta}$ - символи Кронекера.

Тоді для інтеграла від першого доданку в лівій частині рівняння (3.18) отримаємо наступний вираз, який позначимо через $B^m_{\beta 1}$:

$$\int e_{I} \boldsymbol{E} \, \boldsymbol{v}_{I} \, \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \, \hbar \, \boldsymbol{k}_{\beta}(\varepsilon) \, \varepsilon^{m} \, d \, \boldsymbol{k} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{4}{3} \pi \, e_{I} \Big(E_{I} \, \delta_{I\beta} + E_{2} \, \delta_{2\beta} \Big) \times \\ \times \int \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \, \boldsymbol{k}(\varepsilon)^{3} \, \varepsilon^{m} d\varepsilon = B_{\beta I}^{m} \, .$$
(3.25)

Аналогічний вираз отримаємо при інтегруванні першого доданку в лівій частині рівняння (3.19):

$$\int e_2 \boldsymbol{E} \, \boldsymbol{v}_2 \, \frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \hbar \, \boldsymbol{k}_\beta(\varepsilon) \, \varepsilon^m \, d \, \boldsymbol{k} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3} \pi \, e_2 \Big(E_1 \, \delta_{1\beta} + E_2 \, \delta_{2\beta} \Big) \times \\ \times \int \frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial \, \varepsilon} \, \boldsymbol{k}(\varepsilon)^3 \, \varepsilon^m d\varepsilon = B_{\beta \, 2}^m \, .$$
(3.26)

Якщо прийняти початок відліку енергії на дні зони провідності, закон дисперсії для важких дірок матиме вид:

$$k(\varepsilon) = \left(\frac{2 m_{hh}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{1/2}, \qquad (3.27)$$

де m_{hh} - ефективна маса важких дірок.

Тоді величина $B^m_{\beta 2}$ визначатиметься з виразу:

$$B_{\beta 2}^{m} = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{4}{3} \pi e_{2} \Big(E_{1} \delta_{1\beta} + E_{2} \delta_{2\beta} \Big) \Big(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}} \Big)^{1/2} \int \frac{\partial f_{02}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \Big(-\varepsilon - \varepsilon_{g} \Big)^{3/2} \varepsilon^{m} d\varepsilon.$$
(3.28)

Для розрахунку інтеграла від другого доданку в лівій частині рівняння (3.18) необхідно визначити скалярний добуток $[v_1 \times B] \frac{\partial \Phi_1(\varepsilon)}{\partial k}$. Розрахуємо компоненти вектора $\frac{\partial \Phi_1(\varepsilon)}{\partial k}$, прийнявши до уваги запис виразів, що використовується в тензорному аналізі - по індексам, що двічі повторюються, відбувається сумування:

$$\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{\beta}} = \frac{\partial}{\partial k_{\beta}} \left[C_{nI}^{\alpha} \hbar k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} \right] = \hbar C_{nI}^{\alpha} \left[\frac{\partial k_{\alpha}(\varepsilon)}{\partial k_{\beta}} \varepsilon^{n} + \frac{\partial \varepsilon^{n}}{\partial k_{\beta}} k_{\alpha}(\varepsilon) \right] = \\ = \hbar C_{nI}^{\alpha} \left[\delta_{\alpha\beta} \varepsilon^{n} + n \varepsilon^{n-1} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial k_{\beta}} \right].$$
(3.29)

Якщо прийнято до уваги, що

$$k(\varepsilon) = \sqrt{k_1(\varepsilon)^2 + k_2(\varepsilon)^2 + k_3(\varepsilon)^2}; \quad \frac{\partial k(\varepsilon)}{\partial k_\beta} = \frac{k_\beta(\varepsilon)}{k(\varepsilon)}, \quad (3.30)$$

то з (3.29) отримаємо:

$$\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{\beta}} = \hbar C_{nI}^{\alpha} \left[\delta_{\alpha\beta} \varepsilon^{n} + n \varepsilon^{n-1} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \frac{k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)}{k(\varepsilon)} \right].$$
(3.31)

Звідси отримаємо вираз для скалярного добутку $[\boldsymbol{v}_l \times \boldsymbol{B}] \frac{\partial \boldsymbol{\Phi}_l(\varepsilon)}{\partial \boldsymbol{k}}$:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_{1} \times \mathbf{B} \end{bmatrix} \frac{\partial \Phi_{1}(\varepsilon)}{\partial \mathbf{k}} = B \begin{bmatrix} v_{2} \frac{\partial \Phi_{1}(\varepsilon)}{\partial k_{1}} - v_{1} \frac{\partial \Phi_{1}(\varepsilon)}{\partial k_{2}} \end{bmatrix} = \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha} B}{m^{*}} \begin{bmatrix} k_{2}(\varepsilon) \delta_{\alpha 1} \varepsilon^{n} + n k_{2}(\varepsilon) \varepsilon^{n-1} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \frac{k_{\alpha}(\varepsilon) k_{1}(\varepsilon)}{k(\varepsilon)} - k_{1}(\varepsilon) \delta_{\alpha 2} \varepsilon^{n} - n k_{1}(\varepsilon) \varepsilon^{n-1} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \times \\ \times \frac{k_{\alpha}(\varepsilon) k_{2}(\varepsilon)}{k(\varepsilon)} \end{bmatrix} = \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha} B}{m^{*}} \varepsilon^{n} \begin{bmatrix} k_{2}(\varepsilon) \delta_{\alpha 1} - k_{1}(\varepsilon) \delta_{\alpha 2} \end{bmatrix} = \frac{C_{n1}^{\alpha} B}{\hbar k(\varepsilon) \frac{d k(\varepsilon)}{d\varepsilon}} \varepsilon^{n} \times \\ \times \begin{bmatrix} k_{2}(\varepsilon) \delta_{\alpha 1} - k_{1}(\varepsilon) \delta_{\alpha 2} \end{bmatrix}. \tag{3.32}$$

При інтегруванні другого доданку в лівій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат:

$$-e_{I}\hbar\int[\mathbf{v}_{I}\times\mathbf{B}]\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial\mathbf{k}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}d\mathbf{k} = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}C_{n1}^{\alpha}e_{I}B\times$$

$$\times\int\frac{k_{2}(\varepsilon)\delta_{\alpha I}-k_{I}(\varepsilon)\delta_{\alpha 2}}{k(\varepsilon)\frac{d}{d\varepsilon}}\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)^{2}\sin\theta\,dk\,d\theta\,d\varphi\,.$$
(3.33)

Перейдемо від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

176

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}C_{n1}^{\alpha}e_{1}B\int\frac{k_{2}(\varepsilon)\delta_{\alpha 1}-k_{1}(\varepsilon)\delta_{\alpha 2}}{k(\varepsilon)\frac{d\ k(\varepsilon)}{d\varepsilon}}\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial\ \varepsilon}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)^{2}\sin9dkd9\ d\varphi =$$
$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}C_{n1}^{\alpha}e_{1}B\left[\int\frac{\partial\ f_{01}(\mathbf{k})}{\partial\ \varepsilon}k(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}\delta_{\alpha 1}d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\ \pi}k_{2}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin9\ d9\ d\varphi - (3.34)\right]$$
$$-\int\frac{\partial\ f_{01}(\mathbf{k})}{\partial\ \varepsilon}k(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}\delta_{\alpha 2}d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\ \pi}k_{1}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin9\ d9\ d\varphi \right].$$

Враховуючи співвідношення (3.24), для інтеграла від другого доданку в лівій частині рівняння (3.18) отримаємо наступний вираз, в якому коефіцієнт при C_{n1}^{α} позначимо через $-M_{\beta\alpha}^{nm}$:

$$-e_{I}\hbar\int [\mathbf{v}_{I}\times\mathbf{B}]\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\frac{f_{0I}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon}\frac{\partial\Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial\mathbf{k}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}d\mathbf{k} = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{4}{3}\pi C_{nI}^{\alpha}e_{I}B\times$$

$$\times \left[\delta_{\alpha I}\delta_{\beta 2} - \delta_{\alpha 2}\delta_{\beta I}\right]\int\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\frac{f_{0I}(\mathbf{k})}{\varepsilon}k(\varepsilon)^{3}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon = -M_{\beta\alpha I}^{nm}C_{nI}^{\alpha}.$$
(3.35)

Аналогічний вираз отримаємо при інтегруванні другого доданку в лівій частині рівняння (3.19):

$$-e_{2}\hbar \int [\mathbf{v}_{2} \times \mathbf{B}] \frac{\partial f_{02}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \Phi_{2}(\varepsilon)}{\partial \mathbf{k}} k_{\beta}(\varepsilon) \varepsilon^{m} d\mathbf{k} = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{4}{3} \pi C_{n2}^{\alpha} e_{2} B \times \\ \times \left[\delta_{\alpha 1} \delta_{\beta 2} - \delta_{\alpha 2} \delta_{\beta 1} \right] \int \frac{\partial f_{02}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} k(\varepsilon)^{3} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon = -M_{\beta \alpha 2}^{nm} C_{n2}^{\alpha} .$$

$$(3.36.)$$

Якщо прийняти до уваги закон дисперсії важких дірок (3.27), то величина $M^{nm}_{\beta\alpha\,2}$ визначатиметься з виразу:

$$M_{\beta\alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4}{3}\pi e_2 B \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^{3/2} \left[\delta_{\alpha 1}\delta_{\beta 2} - \delta_{\alpha 2}\delta_{\beta 1}\right] \times$$

$$\times \int \frac{\partial f_{02}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon . \qquad (3.37)$$

178

При інтегруванні третього доданку в лівій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат:

$$-e_{I}\int \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial \boldsymbol{k}} \boldsymbol{E} \, k_{\beta}(\varepsilon) \varepsilon^{m} \, d\boldsymbol{k} = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}} e_{I}\int \frac{\partial f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{I}} E_{I} - \frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{2}} E_{2} \right] k_{\beta}(\varepsilon) \varepsilon^{m} k(\varepsilon)^{2} \sin \theta \, d\boldsymbol{k} \, d\theta \, d\varphi \,.$$

$$(3.38)$$

Врахуємо співвідношення (3.31) і перейдемо від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}\int\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon} \left[\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{1}}E_{I}-\frac{\partial \Phi_{I}(\varepsilon)}{\partial k_{2}}E_{2}\right]k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin\theta\,dk\,d\theta\,d\varphi =$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}\hbar C_{n1}^{\alpha}\left\{E_{I}\int\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\delta_{\alpha 1}\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)^{2}\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\pi}k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi +$$

$$+E_{I}\int\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}n\varepsilon^{n+m-1}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)k_{1}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi - \qquad(3.39)$$

$$-E_{2}\int\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}\delta_{\alpha 2}\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)^{2}\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)k_{2}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi -$$

$$-E_{2}\int\frac{\partial f_{01}(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon}n\varepsilon^{n+m-1}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)k_{2}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi .$$

Якщо прийняти до уваги співвідношення:

$$\int_{0}^{2\pi\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 0, \ \beta = 1, 2, 3;$$
(3.40)

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) k_{\gamma}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi = 0 \,, \ \alpha, \beta, \gamma = 1, 2, 3 \,, \quad (3.41)$$

то інтеграл від третього доданку в лівій частині рівняння (3.18) дорівнює нулю. Аналогічне значення отримаємо для інтеграла від третього доданку в лівій частині рівняння (3.19).

При інтегруванні четвертого доданку в лівій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат:

$$-e_{I}\hbar\int \boldsymbol{E}\,\boldsymbol{v}_{I}\boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}\,d\boldsymbol{k} = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{I}\hbar\int(E_{I}v_{II}+E_{2}v_{I2})\times$$

$$\times\boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin\theta\,dk\,d\theta\,d\varphi\,.$$
(3.42)

Приймемо до уваги (3.22) і перейдемо від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{l}\hbar\int(E_{l}v_{ll}+E_{2}v_{l2})\Phi_{l}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0l}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon^{2}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin\theta\,dk\,d\theta\,d\varphi =$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{l}\hbar^{2}\int\left(E_{l}\frac{k_{l}(\varepsilon)}{m^{*}}+E_{2}\frac{k_{2}(\varepsilon)}{m^{*}}\right)\Phi_{l}(\varepsilon)\frac{\partial^{2}f_{0l}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon^{2}}k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2}\sin\theta\,dk\times$$

$$\times d\theta\,d\varphi =$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{l}\hbar C_{nl}^{\alpha}\int\left[E_{l}k_{l}(\varepsilon)+E_{2}k_{2}(\varepsilon)\right]\frac{\partial^{2}f_{0l}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon^{2}}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)\sin\theta\,d\varepsilon\times$$

$$\times d\theta\,d\varphi =$$

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}e_{l}\hbar C_{nl}^{\alpha}\left\{E_{l}\int\frac{\partial^{2}f_{0l}(\mathbf{k})}{\partial\varepsilon^{2}}\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{2\pi\pi}k_{l}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi +$$

$$(3.43)$$

$$+E_{I}\int\frac{\partial^{2}f_{0I}(\boldsymbol{k})}{\partial\varepsilon^{2}}\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{2\pi}\int_{0}^{\pi}k_{I}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\bigg\}.$$

Враховуючи співвідношення (3.41), інтеграл від четвертого доданку в лівій частині рівняння (3.18) дорівнює нулю.

Аналогічне значення отримаємо для інтеграла від четвертого доданку в лівій частині рівняння (3.19).

При інтегруванні правої частини рівняння (3.18) приймемо до уваги, що ймовірність переходу носія $W(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ пропорційна δ -функції Дірака. Якщо прийняти до уваги співвідношення (2.9), (2.14), (2.27), (2.88), (2.117), (2.178), (2.229), (2.243), то в загальному випадку ймовірність переходу носія заряду з стану \mathbf{k} в стан \mathbf{k}' визначається з виразу:

$$W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\,\delta(\,\varepsilon' - \varepsilon - \Delta\,)\,, \qquad (3.44)$$

де W'(k,k') - деяка функція від k та k'; Δ - деяка енергія, яка рівна нулю при пружному механізмі розсіяння.

Для обчислення першого доданку в правій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{0I}(\boldsymbol{k})[1-f_{0I}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon)]\} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{nI}^{\alpha}}{k_{B}T} \int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{0I}(\boldsymbol{k})[1-f_{0I}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] \times \quad (3.45) \\
\times k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon'-\varepsilon-\Delta) \sin \theta' dk' d\theta' d\phi' .$$

Перейдемо в (3.45) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:
$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] [k'_{\alpha}(\varepsilon')\varepsilon'^{n} - k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] k'(\varepsilon')^{2} \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \sin \theta' dk' d\theta' d\phi' = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \{\int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] \times (3.46) \times k'_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon'^{n}k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \sin \theta' dk' d\theta' d\phi' - \int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) \times [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \sin \theta' dk' d\theta' d\phi' = \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \delta(\varepsilon$$

Врахуємо, що величина W'(k,k') є функцією модуля хвильового вектора k та кута \mathscr{G} між векторами k та k' (див. співвідношення (2.9), (2.14), (2.27), (2.88), (2.117), (2.178), (2.229), (2.243)). Тоді, використовуючи властивість δ-функції, для першого інтеграла у правій частині виразу (3.46) можна записати:

$$\int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] k'_{\alpha}(\varepsilon') \varepsilon'^{n} k'(\varepsilon')^{2} \,\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \sin \theta' \,dk' \,d\theta' \,d\varphi' =$$

$$= \int f_{01}(\varepsilon) [1 - f_{01}(\varepsilon')] \varepsilon'^{n} k'(\varepsilon')^{2} \,\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') k'_{\alpha}(\varepsilon) \times \quad (3.47)$$

$$\times \sin \theta' \,d\theta' \,d\varphi' = f_{01}(\varepsilon) [1 - f_{01}(\varepsilon + \Delta)] (\varepsilon + \Delta)^{n} k(\varepsilon + \Delta)^{2} \,\frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} \,W'(\varepsilon),$$

де введено позначення

$$W'(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') k'_{\alpha}(\varepsilon) \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi'.$$
(3.48)

Аналогічно для другого інтеграла у правій частині виразу (3.46) можна записати:

$$-\int W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \sin \theta' dk' d\theta' d\varphi' =$$
$$= -\int f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \times$$

$$\times \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' = -f_{0\,I}(\varepsilon) [I - f_{0\,I}(\varepsilon + \Delta)] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n k (\varepsilon + \Delta)^2 \, \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} \, W''(\varepsilon), \quad (3.49)$$

де введено позначення

$$W''(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W'(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \sin \vartheta' \, d\vartheta' \, d\varphi'.$$
(3.50)

Отже, після інтегрування по *k*' першого доданку в правій частині рівняння (3.18) отримаємо вираз:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \bigg\{ f_{01}(\varepsilon) \big[1 - f_{01}(\varepsilon + \Delta) \big] (\varepsilon + \Delta)^{n} k (\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W'(\varepsilon) - - f_{01}(\varepsilon) \big[1 - f_{01}(\varepsilon + \Delta) \big] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} k (\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W''(\varepsilon) \bigg\}.$$
(3.51)

Помножимо вираз (3.51) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^3}\right]^2 \frac{\hbar^2 C_{n1}^{\alpha}}{k_B T} \int \left\{ f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon + \Delta) \right] (\varepsilon + \Delta)^n k (\varepsilon + \Delta)^2 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W'(\varepsilon) - f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon + \Delta) \right] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n k (\varepsilon + \Delta)^2 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W''(\varepsilon) \right\} k_{\beta}(\varepsilon) \varepsilon^m k(\varepsilon)^2 \times (3.52) \times \sin \theta \, dk \, d\theta \, d\phi \, .$$

Перейдемо в (3.52) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\right]^{2} \frac{\hbar^{2}C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \left\{ \int f_{01}(\varepsilon) \left[I - f_{01}(\varepsilon + \Delta)\right](\varepsilon + \Delta)^{n}k(\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W'(\varepsilon) \times \\ \times k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sin \theta \, d\varepsilon \, d\theta \, d\varphi - \int f_{01}(\varepsilon) \left[I - f_{01}(\varepsilon + \Delta)\right]k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon) \times \\ \times \varepsilon^{n+m}k(\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W''(\varepsilon)k(\varepsilon)^{2} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} \sin \theta \, d\varepsilon \, d\theta \, d\varphi \right\} = \\ = \left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\right]^{2} \frac{\hbar^{2}C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \left\{ \int f_{01}(\varepsilon) \left[I - f_{01}(\varepsilon + \Delta)\right](\varepsilon + \Delta)^{n}k(\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W'(\varepsilon) \times \\ \times \varepsilon^{m}k(\varepsilon)^{2} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi - \int f_{01}(\varepsilon) \left[I - f_{01}(\varepsilon + \Delta)\right]\varepsilon^{n+m} \times \\ \times k(\varepsilon + \Delta)^{2} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W''(\varepsilon)k(\varepsilon)^{2} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \,. \end{cases}$$
(3.53)

В силу співвідношення (3.40) перший інтеграл в (3.53) рівний нулю. Звідси отримаємо остаточний вираз для інтеграла від першого доданку в правій частині рівняння (3.18):

$$-C_{n1}^{\alpha}\left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\right]^{2}\frac{4}{3}\frac{\pi\hbar^{2}}{k_{B}T}\delta_{\alpha\beta}\int f_{01}(\varepsilon)\left[1-f_{01}(\varepsilon+\Delta)\right]\varepsilon^{n+m}k(\varepsilon+\Delta)^{2}\frac{dk(\varepsilon+\Delta)}{d\varepsilon}\times$$

$$\times W''(\varepsilon)k(\varepsilon)^{4}\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon=C_{n1}^{\alpha}K_{\beta\alpha1}^{nm},$$
(3.54)

де $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$ – множники при шуканих невідомих $C^{\alpha}_{n\,l}$.

Аналогічно отримаємо вираз для інтеграла від першого доданку в правій частині рівняння (3.19):

$$C_{n2}^{\alpha} \left[\frac{2V}{(2\pi)^3} \right]^2 \frac{4}{3} \frac{\pi \hbar^2}{k_B T} \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) \left[1 - f_{02}(\varepsilon + \Delta) \right] \varepsilon^{n+m} k(\varepsilon + \Delta)^2 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} \times W''(\varepsilon) k(\varepsilon)^4 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = C_{n2}^{\alpha} K_{\beta \alpha 2}^{nm} , \qquad (3.55)$$

де $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$ – множники при шуканих невідомих $C^{\alpha}_{n\,2}$.

Для обчислення другого доданку в правій частині рівняння (3.18) перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}^{2} T^{2}} \int \{W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] \Phi_{I}(\varepsilon) \Phi_{I}(\varepsilon') [f_{01}(\boldsymbol{k}') - f_{01}(\boldsymbol{k})] \} d\boldsymbol{k}' =
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar^{2} C_{n1}^{\alpha} C_{11}^{\gamma}}{k_{B}^{2} T^{2}} \int W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\gamma}'(\varepsilon') [f_{01}(\boldsymbol{k}') - f_{01}(\boldsymbol{k})] \times (3.56)
\times \varepsilon^{n} \varepsilon'^{i} k'(\varepsilon')^{2} \sin \theta' dk' d\theta' d\phi'.$$

Врахуємо співвідношення (3.44) та перейдемо в (3.56) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar^{2} C_{n1}^{\alpha} C_{i1}^{\gamma}}{k_{B}^{2} T^{2}} \int W_{I}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') f_{0I}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{0I}(\boldsymbol{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\gamma}'(\varepsilon') [f_{0I}(\boldsymbol{k}') - f_{0I}(\boldsymbol{k})] \times \\ \times \varepsilon^{n} \varepsilon'^{i} k'(\varepsilon')^{2} \sin \vartheta' dk' d\vartheta' d\varphi' = \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar^{2} C_{n1}^{\alpha} C_{i1}^{\gamma}}{k_{B}^{2} T^{2}} \int f_{0I}(\varepsilon) [1 - f_{0I}(\varepsilon + \Delta)] \times \\ \times [f_{0I}(\varepsilon + \Delta) - f_{0I}(\varepsilon)] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} \varepsilon'^{i} k'(\varepsilon')^{2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W_{I}'(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \times \\ \times k_{\gamma}'(\varepsilon') \sin \vartheta' d\vartheta' d\varphi' .$$
(3.57)

Приймемо до уваги, що величина W'(k,k') є функцією модуля хвильового вектора k та кута \mathcal{G} між векторами k та k' (див. співвідношення (2.9), (2.14), (2.27), (2.88), (2.117), (2.178), (2.229), (2.243)). Тоді в (3.57) інтеграл по кутовим змінним буде відмінний від нуля тільки для $k'_3(\varepsilon') = k'(\varepsilon')\cos \vartheta$. Звідси отримаємо:

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2 C_{n\,l}^{\alpha} C_{l\,l}^{\gamma}}{k_B^2 T^2} \int f_{0l}(\varepsilon) [l - f_{0l}(\varepsilon + \Delta)] [f_{0l}(\varepsilon + \Delta) - f_{0\,l}(\varepsilon)] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n \varepsilon'^i k' (\varepsilon')^2 \times \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{$$

$$\begin{split} &\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\Delta)\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon'\int_{0}^{2\pi\pi}\int_{0}^{\pi}W'_{l}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')k'_{\gamma}(\varepsilon')\sin\vartheta'\,d\vartheta'\,d\varphi' = \frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar^{2}C_{n1}^{\alpha}C_{i1}^{\beta}}{k_{B}^{2}T^{2}}\times\\ &f_{0I}(\varepsilon)[I-f_{0I}(\varepsilon+\Delta)][f_{0I}(\varepsilon+\Delta)-f_{0I}(\varepsilon)]k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}(\varepsilon+\Delta)^{i}k(\varepsilon+\Delta)^{3}\frac{dk(\varepsilon+\Delta)}{d\varepsilon}\times(3.58)\times W_{I}'''(\varepsilon) \;, \end{split}$$

де введено позначення

$$W_{I}^{\prime\prime\prime}(\varepsilon) = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} W_{I}^{\prime}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}^{\prime}) \cos\theta \sin\theta^{\prime} d\theta^{\prime} d\phi^{\prime}. \qquad (3.59)$$

Помножимо вираз (3.59) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^3}\right]^2 \frac{\hbar^3 C_{n\,l}^{\alpha} C_{i\,l}^3}{k_B^2 T^2} \int f_{0l}(\varepsilon) [1 - f_{0l}(\varepsilon + \Delta)] [f_{0l}(\varepsilon + \Delta) - f_{0l}(\varepsilon)] k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \times \varepsilon^{n+m} (\varepsilon + \Delta)^i k(\varepsilon + \Delta)^3 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W_l'''(\varepsilon) k(\varepsilon)^2 \sin \theta \, dk \, d\theta \, d\phi \,.$$
(3.60)

Перейдемо в (3.52) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\right]^{2} \frac{\hbar^{3}C_{nl}^{\alpha}C_{ll}^{3}}{k_{B}^{2}T^{2}} \int f_{0l}(\varepsilon) [1 - f_{0l}(\varepsilon + \Delta)] [f_{0l}(\varepsilon + \Delta) - f_{0l}(\varepsilon)] \varepsilon^{n+m}(\varepsilon + \Delta)^{i} \times k(\varepsilon + \Delta)^{3} \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W_{l}^{m}(\varepsilon) k(\varepsilon)^{2} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \sin\theta \ d\theta \ d\phi$$

$$(3.61)$$

Приймаючи до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для інтеграла від другого доданку в правій частині рівняння (3.18), при цьому поз-

начимо вираз при добутку $C_{nl}^{\alpha}C_{il}^{\beta}$ через $L_{\alpha\beta l}^{mni}$:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^3}\right]^2 \frac{4}{3} \frac{\pi \hbar^3 C_{n\,I}^{\alpha} C_{i\,I}^3}{k_B^2 T^2} \delta_{\alpha\beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon + \Delta)] [f_{0I}(\varepsilon + \Delta) - f_{0I}(\varepsilon)] \varepsilon^{n+m} \times (3.62) \times (\varepsilon + \Delta)^i k(\varepsilon + \Delta)^3 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W_I'''(\varepsilon) k(\varepsilon)^4 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = C_{n\,I}^{\alpha} C_{i\,I}^3 L_{\alpha\,\beta\,I}^{m\,n\,i}.$$

Аналогічний вираз отримаємо і для інтеграла від другого доданку в правій частині рівняння (3.19), при цьому позначимо вираз при добутку $C_{n\,2}^{\alpha}C_{i\,2}^{3}$ через $L_{\alpha\,\beta\,2}^{m\,n\,i}$:

$$\left[\frac{2V}{(2\pi)^3}\right]^2 \frac{4}{3} \frac{\pi \hbar^3 C_{n2}^{\alpha} C_{i2}^3}{k_B^2 T^2} \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) [I - f_{02}(\varepsilon + \Delta)] [f_{02}(\varepsilon + \Delta) - f_{02}(\varepsilon)] \varepsilon^{n+m} \times (3.63)$$

$$\times (\varepsilon + \Delta)^i k (\varepsilon + \Delta)^3 \frac{dk(\varepsilon + \Delta)}{d\varepsilon} W_1'''(\varepsilon) k (\varepsilon)^4 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = C_{n2}^{\alpha} C_{i2}^3 L_{\alpha\beta2}^{mni}.$$

Слід зробити ряд зауважень щодо величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$: 1). Для випадку пружного розсіяння величина $L_{\alpha \beta a}^{mni} = 0$, а величина $K_{\beta \alpha a}^{nm}$ може бути аналітично виражена через так звані полілогарифмічні функції [73], які означаються наступним чином:

$$poly \log(a, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n^a} .$$
(3.64)

2). Для випадку непружного розсіяння величини $K_{\beta\alpha a}^{nm}$, $L_{\alpha\beta a}^{mni}$, $M_{\beta\alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$ можуть бути визначені з будь-яким заданим ступенем точності. Це обумовлено тим, що підінтегральні функції цих величин мають вид, який представлений на рис. 3.1. Як видно, при достатньо великому відхиленні значення енергії від

краю зони провідності або валентної зони підінтегральна функція прямує до нуля за рахунок експоненціального множника. Тому інтеграли від таких функцій можуть бути обчисленні можуть з будь-яким заданим ступенем точності за допомогою числових методів.



Рис. 3.1. Залежність підінтегральних функцій величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$ від енергії ε .

Величини $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$ обчислювалися методом Ньютона-Котеса з допомогою програми "quanc8" [74] з точністю 10 знаків.

Відзначимо також властивості симетрії величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$, які випливають з їх означення:

$$K_{\beta \alpha a}^{nm} = K_{\alpha \beta a}^{nm}; K_{11a}^{nm} = K_{22a}^{nm} = K_{33a}^{nm}; K_{\beta \alpha a}^{nm} = K_{\beta \alpha a}^{mn};$$

$$L_{\alpha \beta a}^{mni} = L_{\beta \alpha a}^{mni}; L_{11a}^{mni} = L_{22a}^{mni} = L_{33a}^{mni}; L_{\alpha \beta a}^{mni} = L_{\alpha \beta a}^{nmi};$$

$$M_{\beta \alpha a}^{nm} = -M_{\alpha \beta a}^{nm}; M_{\beta \alpha a}^{nm} = M_{\beta \alpha a}^{mn}; M_{3\alpha a}^{nm} = 0.$$
(3.65)

Виходячи з співвідношень (3.25), (3.28), (3.36), (3.37), (3.54), (3.55), (3.62) та (3.63) видно, що в результаті інтегрування рівняння Больцмана (3.18) та

(3.19) зводяться до системи нелінійних алгебраїчних рівнянь відносно величин
 C^α_{na} [75-81] для електронів:

$$C_{n\,l}^{\alpha}K_{\beta\,\alpha\,l}^{m\,n} + C_{i\,l}^{3} C_{n\,l}^{\alpha}L_{\beta\,\alpha\,l}^{m\,n\,i} = B_{\beta\,l}^{m} - C_{n\,l}^{\alpha}M_{\beta\,\alpha\,l}^{m\,n} , \qquad (3.66)$$

та важких дірок:

$$C_{n2}^{\alpha}K_{\beta\alpha}^{mn}{}_{2} + C_{i2}^{3} C_{n2}^{\alpha}L_{\beta\alpha2}^{mni} = B_{\beta2}^{m} - C_{n1}^{\alpha}M_{\beta\alpha2}^{mn} .$$
(3.67)

Для подальшого аналізу перепишемо (3.66) та (3.67) в іншому виді, виділивши β - компоненти рівнянь:

$$\begin{cases} C_{n1}^{1} \left(K_{111}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{111}^{mni} \right) + C_{n1}^{2} M_{121}^{mn} = B_{11}^{m} \\ C_{n1}^{2} \left(K_{221}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{221}^{mni} \right) + C_{n1}^{1} M_{211}^{mn} = B_{21}^{m} \\ C_{n1}^{3} \left(K_{331}^{mn} + C_{i1}^{3} L_{331}^{mni} \right) = 0 \\ C_{n2}^{3} \left(K_{332}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{332}^{mni} \right) = 0 \\ C_{n2}^{2} \left(K_{222}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{222}^{mni} \right) + C_{n2}^{1} M_{212}^{nm} = B_{22}^{m} \\ C_{n2}^{1} \left(K_{112}^{mn} + C_{i2}^{3} L_{222}^{mni} \right) + C_{n2}^{2} M_{121}^{nm} = B_{12}^{m} \end{cases}$$
(3.68)

Звідси видно, що (3.68) 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, в свою чергу, розпадається на систему нелінійних рівнянь другого порядку відносно величин C_{n1}^3 та C_{n2}^3 (3-є та 4-е 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).

Слід також зауважити, що з однієї сторони величини $B^m_{\beta a}$ є лінійними функціями компонентів вектора напруженості електричного поля E_1 та E_2 , а з другої сторони ці величини є 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 зауважимо, величини $M_{\beta \alpha a}^{nm}$ є прямо пропорційні величині індукції магнітного поля **B**.

Систему рівнянь, що входять в 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 складають систему нелінійних алгебраїчних 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 складають дві незалежні системи лінійних рівнянь.

Розглянемо розв'язок рівнянь, що входять в незалежний блок для електронів. Система нелінійних рівнянь для величин C_{n1}^3 (3-е рівняння системи (3.68)) має наступні типи розв'язку:

a)
$$C_{n1}^3 = 0; b) C_{n1}^3 \neq 0$$
 . (3.69)

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

$$J_{\alpha} = -\frac{1}{4\pi^{3}} \int \left(\frac{\partial f_{0I}}{\partial \varepsilon}\right) e_{I} v_{I\alpha} \, \Phi_{I}(\varepsilon) \, d\mathbf{k} = -\frac{1}{3\pi^{2}} e_{I} C_{nI}^{\alpha} \int \left(\frac{\partial f_{0I}}{\partial \varepsilon}\right) k(\varepsilon)^{3} \varepsilon^{n} \, d\varepsilon \quad (3.70)$$

Сформулюємо наступний критерій вибору :

$$J_z = 0$$
 . (3.71)

Цьому критерію задовольняє розв'язок типу а).

Розглянемо випадок *b*). Перепишемо 3-є рівняння системи (3.68) у наступному виді:

де введено позначення

$$a_{mn} = K_{33}^{mn}{}_{1} + C_{i1}^{3} L_{33}^{mni}{}_{1} . aga{3.73}$$

Зауважимо, що в (3.73) для скорочення запису не проводилося розгортання підсумування по індексу "*i*".

Так як $C_{n\,l}^3 \neq 0$, тому детермінант від коефіцієнтів системи лінійних рівнянь дорівнює нулю:

$$\begin{vmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} & \dots & a_{0n} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n0} & a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = 0 , \qquad (3.74)$$

або

$$\begin{vmatrix} K_{33}^{00} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{00i} & K_{331}^{01} + C_{i1}^{3} L_{331}^{01i} & \dots & K_{331}^{0n} + C_{i1}^{3} L_{331}^{0ni} \\ K_{331}^{10} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{10i} & K_{331}^{11} + C_{i1}^{3} L_{331}^{11i} & \dots & K_{331}^{1n} + C_{i1}^{3} L_{331}^{1ni} \\ \dots & \dots \\ K_{331}^{n0} & _{1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{n0i} & K_{331}^{n1} + C_{i1}^{3} L_{331}^{n1i} & \dots & K_{331}^{nn} + C_{i1}^{3} L_{331}^{nni} \end{vmatrix} = 0.$$
(3.75)

З іншої сторони, враховуючи властивості симетрії (3.65) для величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$ та $L_{\alpha \beta a}^{mni}$, видно, що коефіцієнти системи нелінійних рівнянь співпадають з коефіцієнтами при C_{n1}^{l} в першому рівнянні системи (3.68) і з коефіцієнтами при C_{n1}^{2} в другому рівнянні системи (3.68). Якщо припустити, що має місце випадок **B** = 0 (відповідно $M_{12}^{mn} = 0$), то отримаємо систему лінійних рівнянь

$$C_{n\,l}^{l}\left(K_{l\,l\,\,l}^{m\,n} + C_{i\,l}^{3} L_{l\,l\,\,l}^{m\,n\,i}\right) = B_{l\,\,l}^{m} , \qquad (3.76)$$

детермінант якої дорівнює нулю. В цьому випадку система (3.76) має нескінченно багато довільних розв'язків [82], що є фізично беззмістовним, тому розв'язки типу *b*) повинні бути відкинуті.

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

Отже, знаходження нерівноважного доданку функції розподілу для будьякого відхилення від рівноваги зводиться до розв'язку системи лінійних рівнянь

$$C_{n1}^{l} K_{111}^{mn} + C_{n1}^{2} M_{121}^{mn} = B_{11}^{m}$$

$$C_{n1}^{2} K_{221}^{mn} + C_{n1}^{l} M_{211}^{mn} = B_{21}^{m}$$
(3.77)

для електронів та

$$C_{n2}^{2} K_{222}^{mn} + C_{n2}^{1} M_{212}^{nm} = B_{22}^{m}$$

$$C_{n2}^{1} K_{112}^{mn} + C_{n2}^{2} M_{121}^{nm} = B_{12}^{m}$$
(3.78)

для важких дірок.

Для відбору фізичних розв'язків серед розв'язків типу а) необхідно визначити при заданому значенні n = 0, 1, 2 ... компоненти тензора провідності і 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 будуть лінійно залежати від них, а коефіцієнти при величинах E_1 та E_2 будуть рівні відповідним компонентам тензора провідності σ_{11} и σ_{12} для електронів та важких дірок.

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

3.2 Обчислення множників $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,a}$ при коефіцієнтах розкладу в ряд за степенями енергії нерівноважної функції розподілу для різних механізмів розсіяння

Для визначення величин C_{n1}^{1} , C_{n1}^{2} , C_{n2}^{1} , C_{n2}^{2} із систем лінійних рівнянь (3.77) та (3.78) необхідно попередньо визначити величини $K_{\beta\alpha a}^{nm}$, $M_{\beta\alpha a}^{nm}$, $B_{\beta a}^{m}$. Величини $M_{\beta\alpha a}^{nm}$ та $B_{\beta a}^{m}$ визначаються з виразів (3.25), (3.26) та (3.35), (3.36) відповідно. Нижче буде представлений розрахунок величин $K_{\beta\alpha a}^{nm}$ для різних механізмів розсіяння носіїв заряду.

3.2.1. Близькодіючий потенціал іонізованої домішки

Враховуючи співвідношення (2.9), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int \left\{ W_{I\mathcal{I}}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') f_{0\,I}(\boldsymbol{k}) \left[1 - f_{0\,I}(\boldsymbol{k}') \right] \left[\boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon') - \boldsymbol{\Phi}_{I}(\varepsilon) \right] \right\} d\,\boldsymbol{k}' =$$

$$=\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{\pi Z_{i}^{2}e^{4} a_{0}^{4} \gamma_{II}^{4}}{2\varepsilon_{0}^{2} \hbar}\frac{N_{i}}{V}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{01}(\mathbf{k})[1-f_{01}(\mathbf{k}')]\times$$

$$\times \left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right]d\mathbf{k}' .$$
(3.79)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$\frac{C_{n1}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4} a_{0}^{4} \gamma_{IJ}^{4}N_{i}}{8\pi^{2}\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T} \left[\int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)[1-f_{01}(k')]k'(\varepsilon')^{2}dk'\times \left[\frac{\pi^{2}}{2} \int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)[1-f_{01}(k')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\times \right] \right] (3.80)$$

$$\times \int_{0}^{\pi^{2}}\int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)[1-f_{01}(k')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\times \left[(3.80) + \frac{\pi^{2}}{2} \int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)\right] \left[\frac{\pi^{2}}{2} \int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k'})f_{01}(k)\right] \left[\frac{\pi^{2}}{2} \int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'})f_{01}(k)\right] \left[\frac{\pi^{2}}{2} \int_{0}^{\pi}\delta(\varepsilon_{k'})f_{01}(k)f_{01}(k)\right] \left[\frac{\pi^{2$$

В першому інтегралі в квадратних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π . Перейдемо в (3.80) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ - функції:

$$-\frac{C_{n1}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4}a_{0}^{4}\gamma_{II}^{4}N_{i}}{2\pi \varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{01}(\mathbf{k})[1-f_{01}(\mathbf{k}')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon' =$$
$$=-\frac{C_{n1}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4}a_{0}^{4}\gamma_{II}^{4}N_{i}}{2\pi \varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}f_{01}(\varepsilon)[1-f_{01}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\varepsilon^{n}.$$
(3.81)

Помножимо вираз (3.81) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{C_{nl}^{\alpha}Z_{l}^{2}e^{4}\hbar a_{0}^{4}\gamma_{III}^{4}N_{i}}{2\pi\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\int f_{0I}(\varepsilon)[I-f_{0I}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{4}\left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \times \\ \times \int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta \,d\theta \,d\varphi \,.$$
(3.82)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2Z_i^2 e^4 \hbar a_0^4 \gamma_{II}^4 N_i}{3\varepsilon_0^2 k_B T} \delta_{\alpha\beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^6 \times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon.$$
(3.83)

Враховуючи співвідношення (2.9), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int \{W_{I\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{2}(\varepsilon')-\Phi_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}' =$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int \frac{\pi Z_{i}^{2}e^{4} a_{0}^{4} \gamma_{I\mathcal{I}}^{4}}{2 \varepsilon_{0}^{2} \hbar}\frac{N_{i}}{V}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')]\times(3.84)$$

$$\times \left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right]d\boldsymbol{k}'.$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4} a_{0}^{4} \gamma_{III}^{4}N_{i}}{8\pi^{2}\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T} \left[\int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]k'(\varepsilon')^{2}dk'\times\right]$$

$$\times \int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi' - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\times (3.85)$$

$$\times \int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi' \left].$$

В першому інтегралі в квадратних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π . Перейдемо в (3.85) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ - функції, а також закон дисперсії (3.27):

$$\frac{C_{n2}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4}a_{0}^{4}\gamma_{III}^{4}N_{i}}{-4\pi\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')](-\varepsilon'-\varepsilon_{g})^{1/2}\times \\
\times k_{\alpha}(\varepsilon)d\varepsilon' = -\frac{C_{n2}^{\alpha}Z_{i}^{2}e^{4}a_{0}^{4}\gamma_{III}^{4}N_{i}}{4\pi\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}f_{02}(\varepsilon)[1-f_{02}(\varepsilon)](-\varepsilon-\varepsilon_{g})^{1/2}\times(3.86)\times \\
\times k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}.$$

Помножимо вираз (3.86) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha 2}^{nm}$:

$$K_{\beta\alpha2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{Z_i^2 e^4 \hbar a_0^4 \gamma_{III}^4 N_i}{6 \varepsilon_0^2 k_B T} \left(\frac{2 m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \times (3.88) \times \varepsilon^{n+m} d\varepsilon .$$

3.2.2. Близькодіючий потенціал нейтральної домішки

Враховуючи співвідношення (2.14), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{H\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{I}(\varepsilon')-\Phi_{I}(\varepsilon)]\} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{100 \pi^{2} a_{B} N_{H\mathcal{I}}}{V \hbar k'(\varepsilon')^{3} \left[\frac{d k'(\varepsilon')}{d \varepsilon'}\right]^{2}} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}) f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')] \times \quad (3.89) \\
\times \left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right] d\boldsymbol{k}' .$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

В першому інтегралі у фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.90) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{100 C_{nl}^{\alpha} a_B N_{H\underline{\beta}}}{k_B T} \int \frac{\varepsilon^n \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) f_{0l}(\mathbf{k}) [l - f_{0l}(\mathbf{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon)}{k'(\varepsilon')} d\varepsilon' =$$

$$= -\frac{100 C_{nl}^{\alpha} a_B N_{H\underline{\beta}}}{k_B T} \frac{f_{0l}(\varepsilon) [l - f_{0l}(\varepsilon)] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n}{k(\varepsilon) \frac{d k(\varepsilon)}{d \varepsilon}}.$$
(3.91)

Помножимо вираз (3.91) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{100 C_{nl}^{\alpha}a_{B}\hbar N_{H\underline{\beta}}}{k_{B}T}\int f_{0l}(\varepsilon)[l-f_{0l}(\varepsilon)]k(\varepsilon)\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \times \\ \times \int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta \,d\theta \,d\varphi \,.$$
(3.92)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,1}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{400 \pi a_B \hbar N_{H /\!\!\! I}}{3 k_B T} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^3 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon .$$
(3.93)

Враховуючи співвідношення (2.16), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int \{W_{H\mathcal{I}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{2}(\varepsilon')-\Phi_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}' =$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int \frac{100\pi^{2}a_{B}\hbar^{4}N_{H\mathcal{I}}}{\sqrt{2}V m_{hh}^{5/2}(-\varepsilon'-\varepsilon_{g})^{1/2}}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')]\times (3.94)$$

$$\times \left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right]d\boldsymbol{k}'.$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$-\frac{50C_{n\,2}^{\alpha}a_{B}\hbar^{3}N_{H\!\!\mathcal{I}}}{\sqrt{2}\pi\,k_{B}T\,m_{hh}^{3/2}} \Big[\int \varepsilon'\,^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{0\,2}(k) [1-f_{0\,2}(k')] \Big(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\Big)^{l/2}\,dk' \times \\ \times \int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{\kappa}k'_{\alpha}(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi' - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{0\,2}(k) [1-f_{0\,2}(k')] \Big(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\Big)^{l/2} \times (3.95) \\ \times k_{\alpha}(\varepsilon)dk' \int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{s}\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi' \Big].$$

В першому інтегралі в квадратних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π . Перейдемо в (3.95) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ - функції, а також закон дисперсії (3.27):

$$-\frac{100 C_{n2}^{\alpha} a_B \hbar^2 N_{H\underline{\beta}}}{k_B T m_{hh}} \int \varepsilon^n \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] k_{\alpha}(\varepsilon) d\varepsilon' =$$

$$= -\frac{100 C_{n2}^{\alpha} a_B \hbar^2 N_{H\underline{\beta}}}{k_B T m_{hh}} f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^n .$$
(3.96)

Помножимо вираз (3.96) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{50 C_{n2}^{\alpha} a_{B} \hbar^{3} N_{H\underline{\lambda}}}{k_{B} T m_{hh}} \left(\frac{2 m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} \times \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \,.$$
(3.97)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$:

$$K_{\beta \alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{400\pi a_B \hbar N_{H\!\mathcal{I}}}{3 k_B T} \left(\frac{2 m_{hh}}{\hbar^2}\right)^{3/2} \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] \times \\ \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \,.$$
(3.98)

3.2.3. Близькодіючий потенціал центру статичної деформації

Враховуючи співвідношення (2.27), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{C\mathcal{A}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{1}(\varepsilon')-\Phi_{1}(\varepsilon)]\} d\boldsymbol{k}' =
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{2^{5}3^{4}\pi^{3} C^{2} e^{2} e_{14}^{2} a_{0}^{6} N_{C\mathcal{A}}}{V \varepsilon_{0}^{2} \hbar} \frac{1}{q^{2}} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}}) f_{01}(\boldsymbol{k}) \times (3.99)
\times [1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] d\boldsymbol{k}' .$$

Приймемо до уваги, що цей тип розсіяння носить пружний характер, тому виконується співвідношення :

$$q^{2} = 2k(\varepsilon)^{2} (1 - \cos \theta). \qquad (3.100)$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k:

$$\frac{2^{3}3^{4}\pi C_{n1}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{14}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{I}}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left\{\int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')]d\boldsymbol{k}'\times\right.$$

$$\times \int_{0}^{\pi} \frac{k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\theta'd\theta'd\phi'}{1-\cos\theta'} - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)[1-f_{01}(k')]k_{\alpha}(\varepsilon)dk' \times$$

$$\times \int_{0}^{\pi} \frac{\sin\theta'd\theta'd\phi'}{1-\cos\theta'} \bigg\} = \frac{2^{3}3^{4}\pi C_{n1}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{14}^{-2}a_{0}^{-6}N_{CA}}{\varepsilon_{0}^{-2}k_{B}T} \bigg\{ \int \varepsilon'^{-n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k) \times (3.101) \times [1-f_{01}(k')]F_{1}(\varepsilon')dk' - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{01}(k)[1-f_{01}(k')]k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x)dk' \bigg\},$$

де введено позначення:

$$\int_{0}^{\pi} \frac{k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'}{1-\cos\vartheta'} = F_{I}(\varepsilon') \; ; \; \int_{x}^{\pi} \frac{\sin\vartheta'd\vartheta'}{1-\cos\vartheta'} \bigg\} = \gamma(x) \; . \tag{3.102}$$

Функція $F_{I}(\varepsilon')$ має розбіжність при $\alpha = 3$ та $\vartheta = 0$, функція $\gamma(x)$ має логарифмічну розбіжність при $\vartheta = 0$. Перейдемо в (3.101) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ - функції:

$$\frac{2^{3}3^{4}\pi C_{n1}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{I4}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{A}}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left\{\varepsilon^{n}f_{01}(\varepsilon)\left[l-f_{01}(\varepsilon)\right]F_{I}(\varepsilon')\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}-\varepsilon^{n}f_{01}(\varepsilon)\left[l-f_{01}(\varepsilon)\right]k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x)\right\}$$

$$(3.103)$$

Помножимо вираз (3.103) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{2^{3} 3^{4} \pi C_{n1}^{\alpha} C^{2} e^{2} e_{14}^{2} a_{0}^{6} N_{C \mu} \hbar}{\varepsilon_{0}^{2} k_{B} T} \left\{ \int f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon) \right] F_{1}(\varepsilon') k(\varepsilon)^{2} \varepsilon^{n+m} \times \right.$$

$$\times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2} d\varepsilon \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi - \int f_{01}(\varepsilon) [1 - f_{01}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^{2} \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2} \times \varepsilon^{n+m} \gamma(x) d\varepsilon \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\beta}(\varepsilon) k_{\alpha}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \right].$$
(3.104)

Перший інтеграл по кутовим змінним в (3.104) рівний нулю в силу (3.40), другий інтеграл в силу (3.24) рівний $\frac{4}{3}\pi k(\varepsilon)^2 \delta_{\alpha\beta}$. В результаті отримаємо:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{2^{5}3^{3}\pi^{2}C_{nI}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{I4}^{2}a_{0}^{6}N_{C\underline{\beta}}\hbar}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\delta_{\alpha\beta}\int f_{01}(\varepsilon)[1-f_{01}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{4}\times$$

$$\times\left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2}\varepsilon^{n+m}\gamma(x)d\varepsilon .$$
(3.105)

Для уникнення розбіжності функції $\gamma(x)$ обмежимо нижню границю інтеграла так, щоб узгодити теорію з експериментом, тобто, використаємо цей інтеграл як підгоночний параметр :

$$\gamma_{C\mathcal{I}} \equiv \gamma(x) = \int_{x}^{\pi} \frac{\sin\theta}{1 - \cos\theta} d\theta \quad . \tag{3.106}$$

Зауважимо, що аналогічний спосіб вибору нижньої границі інтеграла використовується і в методі Конуелла-Вайскопфа [11] при розсіянні носія заряду на іонізованій домішці. Однак, отримані при цьому значення радіуса дії потенціалу є занадто великі (наприклад, в CdHgTe для концентрації дефектів ~ 10^{15} см⁻³ величина $R \sim 160 a_0$).

В результаті отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha I}^{nm}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2^5 3^3 \pi^2 C_{nI}^{\alpha} C^2 e^2 e_{I4}^2 a_0^{\ 6} \gamma_{C \square} N_{C \square} \hbar}{\varepsilon_0^2 k_B T} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 \times C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{\alpha \beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^2 + C_{I}^{\alpha} \delta_{$$

$$\times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \quad . \tag{3.107}$$

202

Зауважимо, що в (3.107) в якості підгоночного параметра фігурує добуток $\gamma_{C\!Z\!} N_{C\!Z}$.

Враховуючи співвідношення (2.27), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{C\mathcal{A}}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{2}(\varepsilon')-\Phi_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}' = \\ = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{2^{5}3^{4}\pi^{3}C^{2}e^{2}e_{14}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{A}}}{V\varepsilon_{0}^{2}\hbar}\frac{1}{q^{2}}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{01}(\boldsymbol{k})\times \quad (3.108)\\ \times [1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}]d\boldsymbol{k}' .$$

Врахуємо співвідношення (3.100) і перейдемо до сферичної системи координат відносно **k**', направивши вісь ОZ вздовж вектора **k**:

$$-\frac{2^{3}3^{4}\pi C_{n2}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{14}^{2}a_{0}^{6}N_{CA}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left\{\int\varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]d\mathbf{k}'\times\right.$$

$$\times\int_{0}^{\pi}\frac{k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\theta'd\theta'd\phi'}{1-\cos\theta'}-\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]k_{\alpha}(\varepsilon)d\mathbf{k}'\times$$

$$\times\int_{0}^{\pi}\frac{\sin\theta'd\theta'd\phi'}{1-\cos\theta'}\left\{\int\varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]k_{\alpha}(\varepsilon)d\mathbf{k}'\times\right.$$

$$\times\left[1-f_{02}(\mathbf{k}')\right]F_{2}(\varepsilon')d\mathbf{k}'-\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{02}(\mathbf{k})[1-f_{02}(\mathbf{k}')]k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x)d\mathbf{k}'\right\},$$

$$(3.109)$$

де введено позначення:

$$\int_{0}^{\pi} \frac{k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'}{1-\cos\vartheta'} = F_{2}(\varepsilon') \; ; \; \int_{x}^{\pi} \frac{\sin\vartheta'\,d\vartheta'}{1-\cos\vartheta'} \bigg\} = \gamma(x) \; . \tag{3.110}$$

Функція $F_2(\varepsilon')$ має розбіжність при $\alpha = 3$ та $\vartheta = 0$. Перейдемо в (3.109) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ - функції:

$$\frac{2^{2}3^{4}\pi C_{n2}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{l4}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{A}}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{l/2} \left\{ \int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2} \times \left[1-f_{02}(k')\right]F_{2}(\varepsilon')d\varepsilon'-\int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[1-f_{02}(k')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2} \times \left[1-f_{02}(k')\right]\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T\right] \right\}$$

$$\times k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x)d\varepsilon' = \frac{2^{2}3^{4}\pi C_{n2}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{l4}^{2}a_{0}^{6}N_{C\mathcal{A}}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{l/2} \left\{f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon)\right]\times \left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2}F_{2}(\varepsilon)\varepsilon^{n}-f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon)\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2}\varepsilon^{n}k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x).\right\} \right\}$$

$$\times \left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2}F_{2}(\varepsilon)\varepsilon^{n}-f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon)\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{-l/2}\varepsilon^{n}k_{\alpha}(\varepsilon)\gamma(x).$$

$$(3.111)$$

Помножимо вираз (3.111) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{2}{\varepsilon_{0}^{2}}\frac{3^{4}\pi C_{n2}^{\alpha}C^{2}e^{2}e_{I4}^{2}a_{0}^{6}\hbar N_{CA}}{\varepsilon_{0}^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{2}\left\{\int f_{02}(\varepsilon)[I-f_{02}(\varepsilon)]F_{2}(\varepsilon)\times\right.\\ \times\varepsilon^{n+m}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi - \int f_{02}(\varepsilon)[I-f_{02}(\varepsilon)]\gamma(x)\varepsilon^{n+m}d\varepsilon\times (3.112)\\ \times\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\beta}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right\}.$$

Перший інтеграл по кутовим змінним в (3.104) рівний нулю в силу (3.40), другий інтеграл в силу (3.24) рівний $\frac{4}{3}\pi k(\varepsilon)^2 \delta_{\alpha\beta}$. Для уникнення розбіжності функції $\gamma(x)$ поступаємо так, як і у випадку електронів (див. (3.106)). В результаті отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha 2}^{nm}$:

$$K_{\beta \alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2^3 3^3 \pi^2 C^2 e^2 e_{14}^2 a_0^{\ 6} \hbar \gamma_{C\mathcal{A}} N_{C\mathcal{A}}}{\varepsilon_0^2 k_B T} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^3 \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) \times \left[1 - f_{02}(\varepsilon)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right) \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \quad .$$

$$(3.113)$$

Зауважимо, що в (3.113), як і в (3.107), в якості підгоночного параметра фігурує добуток $\gamma_{C\!\!\mathcal{I}} N_{C\!\!\mathcal{I}}$.

3.2.4. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з акустичним фононом

Враховуючи співвідношення (2.88), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{1}(\boldsymbol{\varepsilon}')-\boldsymbol{\Phi}_{1}(\boldsymbol{\varepsilon})]\} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{\pi^{3}k_{B}T E_{AK}^{2}}{144 N M \hbar} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) f_{01}(\boldsymbol{k}) \times \qquad (3.114) \\
\times [1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\boldsymbol{\varepsilon}')\varepsilon'^{n} - k_{\alpha}(\boldsymbol{\varepsilon})\varepsilon^{n}] d\boldsymbol{k}' .$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо, що густина кристалу визначається з виразу $\rho = \frac{NM}{V}$:

$$\frac{C_{n\,l}^{\alpha}E_{AK}^{2}}{576\ \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left\{ \int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{0\,l}(\boldsymbol{k})[l - f_{0\,l}(\boldsymbol{k}')]k'(\varepsilon')^{2}d\boldsymbol{k}'\times \right. \tag{3.115}$$

$$\times \int_{0}^{\pi^{2}\pi} k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\theta'd\theta'd\varphi' - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{0\,l}(\boldsymbol{k})[l - f_{0\,l}(\boldsymbol{k}')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)d\boldsymbol{k}'\times$$

$$\times \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin \vartheta' \, d\vartheta' \, d\varphi' \Big\} \, .$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.115) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{C_{n\,l}^{\alpha}E_{AK}^{2}}{576\ \rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{0l}(\boldsymbol{k})[l-f_{0l}(\boldsymbol{k}')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\times$$

$$\times\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon'=-\frac{C_{n\,l}^{\alpha}\pi\ E_{AK}^{2}}{144\ \rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}f_{0l}(\varepsilon)[l-f_{0l}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\times$$

$$\times\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\varepsilon^{n}.$$
(3.116)

Помножимо вираз (3.116) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{C_{nI}^{\alpha}\pi E_{AK}^{2}\hbar}{144\rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\int f_{0I}(\varepsilon)[1-f_{0I}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{4}\left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \times \int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,.$$
(3.117)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 E_{AK}^2 \hbar}{108\rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \delta_{\alpha\beta} \int f_{0I}(\varepsilon) [1 - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^6 \times (3.118)$$

$$\times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon.$$

Враховуючи співвідношення (2.88), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}'=$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{\pi^{3}k_{B}T E_{AK}^{2}}{144 N M \hbar}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{02}(\boldsymbol{k})\times \qquad(3.119)$$

$$\times[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}]d\boldsymbol{k}'.$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо, що густина кристалу визначається з виразу $\rho = \frac{NM}{V}$:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}E_{AK}^{2}}{576\rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)\left\{\int \varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[1-f_{02}(k')\right]\times\right.\\ \times\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k'_{\alpha}(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'-\int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[1-f_{02}(k')\right]\times(3.120)\\ \times\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'\right\}.$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.120) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}\pi E_{AK}^{2}}{288 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int \varepsilon^{n} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')]$$

$$\times \left(-\varepsilon' - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} k_{\alpha}(\varepsilon) d\varepsilon' = -\frac{C_{n2}^{\alpha}\pi E_{AK}^{2}}{288 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} f_{02}(\varepsilon) \times (3.121)$$

$$\times [1 - f_{02}(\varepsilon)] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n}.$$

Помножимо вираз (3.121) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{C_{n2}^{\alpha} \pi E_{AK}^{2} \hbar}{576 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^3 \int f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right) \times \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$
(3.122)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$:

$$K_{\beta \alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{C_{n2}^{\alpha} \pi^2 E_{AK}^{2} \hbar}{432 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}} \right)^2 \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2} \right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] \times (3.123) \times (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon .$$

3.2.5. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з неполярним оптичним фононом

Враховуючи співвідношення (2.117), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] [\Phi_{1}(\varepsilon') - \Phi_{1}(\varepsilon)] \} d\boldsymbol{k}' =$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{\pi^{3} E_{H\Pi O}^{2}}{288 a_{0}^{2} N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO})] \right\} f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] [k_{\alpha}'(\varepsilon') \varepsilon'^{n} - k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n}] d\boldsymbol{k}' .$$
(3.124)

208

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^{-3}}{4}$:

$$\frac{C_{n1}^{\alpha}\hbar E_{HIIO}^{2}a_{0}}{16\cdot 288 k_{B}T} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \left\{ \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO}\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \right. \\ \left. \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO}\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] \right\} \\ \left. \times \varepsilon'^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} dk' \int_{0}^{\pi^{2}\pi} k'_{\alpha}(\varepsilon') \sin \theta' d\theta' d\phi' - \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times (3.125) \right] \right\} \\ \left. \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1)\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] \right\} \\ \left. + \left(N_{TO} + 1 \right) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] \left\} \varepsilon^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) dk' \times \right] \\ \left. \times \int_{0}^{\pi^{2}\pi} \sin \theta' d\theta' d\phi' \right\} .$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.125) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{C_{nl}^{\alpha}\pi\hbar E_{H\Pi O}^{2}a_{0}}{4\cdot288\,k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta\left(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO}\right)+\left(N_{LO}+l\right)\times\right]\right\}$$
(3.126)

$$\begin{split} & \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \Big] + \frac{2}{\omega_{TO}} \Big[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \Big] \Big\} \times \\ & \times \varepsilon^n f_{01}(\varepsilon) \Big[1 - f_{01}(\varepsilon') \Big] k'(\varepsilon')^2 k_\alpha(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{C_{n1}^\alpha \pi \hbar E_{HIIO}^{-2} a_0}{4 \cdot 288 \, k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \times \\ & \times \varepsilon^n f_{01}(\varepsilon) k_\alpha(\varepsilon) \Big\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} \Big[1 - f_{01}(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \Big] k(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + \\ & + (N_{LO} + 1) \Big[1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{LO}) \Big] k(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} \Big\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} \times \\ & \times \Big[1 - f_{01}(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \Big] k(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) \Big[1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}) \Big] \times \\ & \times k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \Big\rangle \Big\} . \end{split}$$

Помножимо вираз (3.126) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{C_{n1}^{\alpha}\pi\hbar^{2}E_{HIIO}^{2}a_{0}}{4\cdot288\,k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\int\varepsilon^{n+m}f_{01}(\varepsilon)k(\varepsilon)^{2}\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\times$$

$$\times\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\langle N_{LO}[1-f_{01}(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})]k(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})}{d\varepsilon}+(N_{LO}+1)\times\right\}\times$$

$$\times\left[1-f_{01}(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})]k(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})^{2}\frac{dk(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})}{d\varepsilon}\right\}+\frac{2}{\omega_{TO}}\langle N_{TO}[1-(3.127))-f_{01}(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})]k(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}+(N_{TO}+1)[1-f_{01}(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})]\times$$

$$\times k(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}\right\}d\varepsilon\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\phi\,.$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$:

$$\begin{split} K_{\beta \alpha I}^{nm} &= -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar^2 E_{HIO}^2 a_0}{3 \cdot 288 \, k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \delta_{\alpha\beta} \int \varepsilon^{n+m} f_{0I}(\varepsilon) k(\varepsilon)^4 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} [1 - f_{0I}(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ &\times [1 - f_{0I}(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} [1 - (3.128) - f_{0I}(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) [1 - f_{0I}(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] \times \\ &\times k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \rangle \bigg\} d\varepsilon \,. \end{split}$$

Враховуючи співвідношення (2.117), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{H\Pi O}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{2}(\varepsilon')-\Phi_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}'=$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{\pi^{3}E_{H\Pi O}}{288 a_{0}^{2}N}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\right.\right.$$

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

$$\left.\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\right\}f_{02}(\boldsymbol{k})\left[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')\right]\left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right]d\boldsymbol{k}'.$$
(3.129)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^3}{4}$:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}\hbar E_{H\Pi O}^{2}a_{0}}{16\cdot 288 k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)\left\{\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\left(N_{LO}+1\right)\times\right.\right.\right.\right.\right.\\ \left.\times\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+\left(N_{TO}+1\right)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\right\}\times\\ \left.\times\varepsilon'^{n}f_{02}(\mathbf{k})\left[1-f_{02}(\mathbf{k}')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)d\mathbf{k}'\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}'(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'-\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\times(3.130)\right]\right\}\right\}$$

$$\times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \ \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \}\varepsilon^n f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] (-\varepsilon' - \varepsilon_g) k_\alpha(\varepsilon) d\mathbf{k}' \times \\ \times \int_{0}^{\pi^2 \pi} \sin^2 \theta' \, d\theta' \, d$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.130) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}\pi\hbar E_{HIO}^{2}a_{0}}{8\cdot288\,k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\right.\\\left.+\left(N_{LO}+1\right)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\,\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+\left(N_{TO}+1\right)\times\right.\\\left.\times\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}k_{\alpha}(\varepsilon)d\varepsilon=\\\left.=-\frac{C_{n2}^{\alpha}\pi\hbar E_{HIO}^{2}a_{0}}{8\cdot288\,k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left\{N_{LO}\left[1-f_{02}(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]\times\right.\right.$$
(3.131)
$$\left.\times\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}-\hbar\omega_{LO}\right)^{1/2}+\left(N_{LO}+1\right)\left[1-f_{02}(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}+\hbar\omega_{LO}\right)^{1/2}\right\}+\\\left.+\frac{2}{\omega_{TO}}\left\{N_{TO}\left[1-f_{02}(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}-\hbar\omega_{TO}\right)^{1/2}+\left(N_{TO}+1\right)\times\right.\right.$$
$$\left.\times\left[1-f_{02}(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}+\hbar\omega_{TO}\right)^{1/2}\right\}\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon).$$

Помножимо вираз (3.131) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{C_{n\,2}^{\alpha} \pi \hbar^2 E_{H\Pi O}^{2} a_0}{16 \cdot 288 k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^3 \int \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \{N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] \times \frac{1}{\omega_{LO}} \right\} d\omega_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] + \frac{1}{\omega_{LO}} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{$$

$$\times \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar\omega_{LO}\right)^{l/2} + (N_{LO} + 1)\left[1 - f_{02}\left(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar\omega_{LO}\right)^{l/2}\right) + \frac{2}{\omega_{TO}}\left\{N_{TO}\left[1 - f_{02}\left(\varepsilon + \hbar\omega_{TO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar\omega_{TO}\right)^{l/2} + (N_{TO} + 1)\times\right. \\ \times \left[1 - f_{02}\left(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar\omega_{TO}\right)^{l/2}\right\}f_{02}\left(\varepsilon\right)\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{l/2}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \times \\ \times \int_{0}^{\pi^{2}\pi} k_{\alpha}\left(\varepsilon\right)k_{\beta}\left(\varepsilon\right)\sin\theta d\theta d\varphi .$$

$$(3.132)$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha 2}^{n m}$:

$$\begin{split} K_{\beta\alpha2}^{nm} &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\pi^2 \hbar^2 E_{H\Pi O}^2 a_0}{12 \cdot 288 \, k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \{N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{LO}\right)^{1/2} + (N_{LO} + 1) \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{LO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{LO}\right)^{1/2} \right\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \{N_{TO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} + (N_{TO} + 1) \times \left(3.133\right) \times \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \right\} f_{02} \left(\varepsilon\right) \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon . \end{split}$$

3.2.6. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з полярним оптичним фононом

Враховуючи співвідношення (2.178), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{\Pi O}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') f_{01}(\boldsymbol{k}) [1 - f_{01}(\boldsymbol{k}')] [\Phi_{1}(\varepsilon') - \Phi_{1}(\varepsilon)] \} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{64 \pi^{7} \gamma_{\Pi O}^{10} e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0}^{4} N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \times (3.134)] \right\}$$

$$\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar \omega_{TO})] f_{01}(\mathbf{k}) [1 - f_{01}(\mathbf{k}')] [k'_{\alpha}(\varepsilon')\varepsilon'^{n} - k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] d\mathbf{k}'.$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^{-3}}{4}$:

$$\frac{4 C_{n1}^{\alpha} \pi^{4} \gamma_{IIO}^{10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \left\{ \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right] \right\} \times \\
\times \varepsilon'^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} dk' \int_{0}^{\pi^{2}\pi} \delta_{\alpha}'(\varepsilon') \sin \theta' d\theta' d\phi' - \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times (3.135) \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \right] \right\} \right\} \\
\times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \left] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right] \right\} \varepsilon^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) dk' \times \\
\times \int_{0}^{\pi^{2}\pi} \sin \theta' d\theta' d\phi' \right\} .$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.125) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \int \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] \right\} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Pi O}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Omega}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Omega}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0} k_{B} T} \frac{M}{M_{x} M_{B}} + \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) \left[1 - f_{01}(\varepsilon') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) \frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'} d\varepsilon' = -\frac{16 C_{n1}^{\alpha} \pi^{5} \gamma_{\Omega}^{-10} \hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} \delta_{\Omega}^{2} \delta_{\Omega}^{2} + \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon') \delta_{\Omega}^{2} + \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon')$$

$$\times \varepsilon^{n} f_{01}(\varepsilon) k_{\alpha}(\varepsilon) \Biggl\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} [1 - f_{01}(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + \\ + (N_{LO} + 1) [1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} \Biggr\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} \times (3.136) \times [1 - f_{01}(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) \times \\ \times [1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \Biggr\} \Biggr\} .$$

Помножимо вираз (3.136) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{16C_{n1}^{\alpha}\pi^{5}\gamma_{\Pi O}^{10}\hbar^{2}e^{4}}{225\varepsilon_{0}^{2}a_{0}k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\int\varepsilon^{n+m}f_{01}(\varepsilon)k(\varepsilon)^{2}\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\times$$

$$\times\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\langle N_{LO}[1-f_{01}(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})]k(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})}{d\varepsilon}+(N_{LO}+1)\times\right\}\times$$

$$\times\left[1-f_{01}(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})]k(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})^{2}\frac{dk(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})}{d\varepsilon}\right\}+\frac{2}{\omega_{TO}}\langle N_{TO}[1-(3.137))-f_{01}(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})]k(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}+(N_{TO}+1)[1-f_{01}(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})]\times$$

$$\times k(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}\right\}d\varepsilon\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,.$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{64 \pi^6 \gamma_{\Pi O}^{10} \hbar^2 e^4}{675 \varepsilon_0^2 a_0 k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \delta_{\alpha\beta} \int \varepsilon^{n+m} f_{0I}(\varepsilon) k(\varepsilon)^4 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} [1 - f_{01} (\varepsilon + \hbar \omega_{LO})] k (\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk (\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + (N_{LO} + 1) \times \left[1 - f_{01} (\varepsilon - \hbar \omega_{LO}) \right] k (\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^2 \frac{dk (\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} \right\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} [1 - f_{01} (\varepsilon + \hbar \omega_{TO})] k (\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk (\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) [1 - f_{01} (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] \times k (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^2 \frac{dk (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \right\} d\varepsilon .$$
(3.138)

Враховуючи співвідношення (2.178), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{\Pi O}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}'=$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{64\pi^{7}\gamma_{\Pi O}^{10}e^{4}}{225\varepsilon_{0}^{2}a_{0}^{4}}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\right.\right.$$

$$\left.\left.\left.\left(3.139\right)\right.\right.\right\}+\left.\left.\left(N_{LO}+1\right)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+\left.\left(N_{TO}+1\right)\times\right.\right]\right\}\right\}$$

$$\left.\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\left.\right]\right\}f_{02}(\boldsymbol{k})\left[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')\right]\left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}\right]d\boldsymbol{k}'.$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^{-3}}{4}$:

$$-\frac{4C_{n2}^{\alpha}\pi^{4}\gamma_{IIO}^{10}\hbar e^{4}}{225 \varepsilon_{0}^{2} a_{0}k_{B}T} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right) \left\{ \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \right. \right. \\ \left. \times \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right] \right\} \times \\ \left. \times \,\varepsilon'^{n} f_{02}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{02}(\mathbf{k}') \right] \left(-\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right) dk' \int_{0}^{\pi^{2}\pi} \int_{0}^{\pi} k_{\alpha}'(\varepsilon') \sin \theta' d\theta' d\phi' - \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times (3.140) \right] \right\} \times \\ \left. \times \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \,\delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) \right] \right]$$

$$+ (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] \varepsilon^n f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] (-\varepsilon' - \varepsilon_g) k_\alpha(\varepsilon) dk' \times \\ \times \int_0^{\pi 2\pi} \int_0^{2\pi} \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' \bigg\}.$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.140) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{8C_{n2}^{\alpha}\pi^{5}\gamma_{IIO}^{10}\hbar e^{4}}{225\varepsilon_{0}^{2}a_{0}k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\right.\\\left.+\left(N_{LO}+1\right)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+\left(N_{TO}+1\right)\times\right.\\\left.\times\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\right\}\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}k_{\alpha}(\varepsilon)d\varepsilon=\\=-\frac{8C_{n2}^{\alpha}\pi^{5}\gamma_{IIO}^{10}\hbar e^{4}}{225\varepsilon_{0}^{2}a_{0}k_{B}T}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left\{N_{LO}\left[1-f_{02}(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]\times\right.\right.$$
$$(3.141)$$
$$\times\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}-\hbar\omega_{LO}\right)^{1/2}+\left(N_{LO}+1\right)\left[1-f_{02}(\varepsilon-\hbar\omega_{LO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}+\hbar\omega_{LO}\right)^{1/2}\right\}+\\\left.+\frac{2}{\omega_{TO}}\left\{N_{TO}\left[1-f_{02}(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}-\hbar\omega_{TO}\right)^{1/2}+\left(N_{TO}+1\right)\times\right.\\\left.\times\left[1-f_{02}(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}+\hbar\omega_{TO}\right)^{1/2}\right\}\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon).$$

Помножимо вираз (3.141) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4C_{n2}^{\alpha} \pi^5 \gamma_{\Pi O}^{10} \hbar e^4}{225 \varepsilon_0^2 a_0 k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^3 \int \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \left\{N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] \times \right\} \right\} d\omega_{LO} d\omega_{L$$
$$\times \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar\omega_{LO}\right)^{l/2} + (N_{LO} + 1)\left[1 - f_{02}\left(\varepsilon - \hbar\omega_{LO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar\omega_{LO}\right)^{l/2}\right) + \frac{2}{\omega_{TO}}\left\{N_{TO}\left[1 - f_{02}\left(\varepsilon + \hbar\omega_{TO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar\omega_{TO}\right)^{l/2} + (N_{TO} + 1)\times\right. \\ \times \left[1 - f_{02}\left(\varepsilon - \hbar\omega_{TO}\right)\right]\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar\omega_{TO}\right)^{l/2}\right\}f_{02}\left(\varepsilon\right)\left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{l/2}\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \times \\ \times \int_{0}^{\pi^{2}\pi} k_{\alpha}\left(\varepsilon\right)k_{\beta}\left(\varepsilon\right)\sin\theta d\theta d\varphi .$$

$$(3.142)$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$:

$$\begin{split} K_{\beta\alpha2}^{n\,m} &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{16\pi^6 \gamma_{IIO}^{10} \hbar e^4}{675 \,\varepsilon_0^2 \,a_0 k_B T} \frac{M}{M_x M_B} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \{N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{LO}\right)^{l/2} + (N_{LO} + 1) \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{LO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{LO}\right)^{l/2} \right\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \{N_{TO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{TO}\right)^{l/2} + (N_{TO} + 1) \times \left(3.143\right) \times \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{TO}\right)^{l/2} \right\} f_{02} \left(\varepsilon \right) \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^{3/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon . \end{split}$$

3.2.7. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з акустичними коливаннями п'єзоелектричного поля

Враховуючи співвідношення (2.229), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{\Pi AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][\Phi_{1}(\varepsilon')-\Phi_{1}(\varepsilon)]\} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{128\pi^{7} e_{14}^{2} e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{\Pi E}^{10} k_{B}T}{225 \varepsilon_{0}^{2} \hbar N M} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \times \\
\times \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}]d\boldsymbol{k}' .$$
(3.144)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо, що густина кристалу визначається з виразу $\rho = \frac{NM}{V}$:

$$\frac{32\pi^{4}C_{n1}^{\alpha}e_{14}^{2}e^{2}a_{0}^{2}\gamma_{\Pi E}^{10}}{225\varepsilon_{0}^{2}\rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\left\{\int\varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{01}(\mathbf{k})\times\right. \\
\times\left[1-f_{01}(\mathbf{k}')\right]k'(\varepsilon')^{2}dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k'_{\alpha}(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'-\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{01}(\mathbf{k})\times(3.145) \\
\times\left[1-f_{01}(\mathbf{k}')\right]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'\right\}$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.145) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{128\pi^{5}C_{n\,I}^{\alpha}e_{I4}^{2}e^{2}a_{0}^{2}\gamma_{IIE}^{10}}{225\varepsilon_{0}^{2}\rho}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{0I}(\mathbf{k})\times \times \left[1-f_{0I}(\mathbf{k}')\right]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon'=-\frac{128\pi^{5}C_{n\,I}^{\alpha}e_{I4}^{2}e^{2}a_{0}^{2}\gamma_{IIE}^{10}}{225\varepsilon_{0}^{2}\rho}\times \left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}f_{0I}(\varepsilon)\left[1-f_{0I}(\varepsilon)\right]k(\varepsilon)^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\varepsilon^{n}.$$
(3.146)

Помножимо вираз (3.146) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^3}\frac{128\pi^5 C_{n\,I}^{\alpha} e_{I4}{}^2 e^2 \hbar \, a_0{}^2 \gamma_{\Pi E}{}^{10}}{225 \, \varepsilon_0{}^2 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 \times \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^4 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{v_{TO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \int f_{0I}(\varepsilon) [I - f_$$

$$\times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} k_{\alpha}(\varepsilon) k_{\beta}(\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi.$$
(3.147)

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,l}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{512\pi^6 e_{I4}^2 e^2 \hbar a_0^2 \gamma_{IIE}^{I0}}{675 \varepsilon_0^2 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \delta_{\alpha\beta} \int f_{0I}(\varepsilon) \times \left[1 - f_{0I}(\varepsilon)\right] k(\varepsilon)^6 \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon .$$

$$(3.148)$$

Враховуючи співвідношення (2.229), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{\Pi AK}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}' = \\ = -\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{128\pi^{7}e_{14}^{2}e^{2}a_{0}^{2}\gamma_{\Pi E}^{10}k_{B}T}{225\varepsilon_{0}^{2}\hbar NM}\left(\frac{1}{v_{LO}}+\frac{2}{v_{TO}}\right)^{2}\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})\times (3.149) \\ \times f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}]d\boldsymbol{k}' .$$

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо, що густина кристалу визначається з виразу $\rho = \frac{NM}{V}$:

$$\times \left[l - f_{02}(\mathbf{k}') \right] \left(-\varepsilon' - \varepsilon_g \right) k_\alpha(\varepsilon) dk' \int_0^{\pi 2\pi} \sin \vartheta' \, d\vartheta' \, d\varphi' \, d\varphi' \, \right\} \,. \tag{3.150}$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.120) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{64 \pi^{5} C_{n2}^{\alpha} e_{I4}^{2} e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{IIE}^{10}}{225 \varepsilon_{0}^{2} \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int \varepsilon^{n} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) f_{02}(\mathbf{k}) \times \\ \times \left[1 - f_{02}(\mathbf{k}')\right] \left(-\varepsilon' - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} k_{\alpha}(\varepsilon) d\varepsilon' = -\frac{64 \pi^{5} C_{n2}^{\alpha} e_{I4}^{2} e^{2} a_{0}^{2} \gamma_{IIE}^{10}}{225 \varepsilon_{0}^{2} \rho} \times \\ \times \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} f_{02}(\varepsilon) [1 - f_{02}(\varepsilon)] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} k_{\alpha}(\varepsilon) \varepsilon^{n} .$$
(3.151)

Помножимо вираз (3.151) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{32\pi^{5}C_{n2}^{\alpha}\hbar e_{14}^{2}e^{2}a_{0}^{2}\gamma_{\Pi E}^{10}}{225\varepsilon_{0}^{2}\rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^{2} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3} \int f_{02}(\varepsilon)[1 - f_{02}(\varepsilon)] \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)\varepsilon^{n+m}d\varepsilon \int_{0}^{\pi^{2}\pi} k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta \,d\theta \,d\varphi \,.$$

$$(3.152)$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$:

$$K_{\beta \alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{128\pi^6 \hbar e_{14}^2 e^2 a_0^2 \gamma_{\Pi E}^{10}}{675 \varepsilon_0^2 \rho} \left(\frac{1}{v_{LO}} + \frac{2}{v_{TO}}\right)^2 \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) \times \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) \delta_{\alpha\beta} \int$$

$$\times [1 - f_{02}(\varepsilon)] (-\varepsilon - \varepsilon_g)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon . \qquad (3.153)$$

221

3.2.8. Близькодіючий потенціал взаємодії носія заряду з оптичними коливаннями п'єзоелектричного поля

Враховуючи співвідношення (2.243), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{1}{k_{B}T} \int \{W_{\Pi O\Pi}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{01}(\boldsymbol{k})[1-f_{01}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{1}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{1}(\varepsilon)]\} d\boldsymbol{k}' = \\
= \frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{\hbar C_{n1}^{\alpha}}{k_{B}T} \int \frac{32^{2} \pi^{9} \gamma_{\Pi E}^{-10} e^{2} e_{14}^{2}}{75^{2} \varepsilon_{0}^{2} N} \frac{M}{M_{x}M_{B}} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} [N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO}) + (N_{LO}+1)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO}) + (N_{TO}+1) \times \delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO}) + (N_{TO}+1) \times \delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})] \right\} f_{01}(\boldsymbol{k}) [1-f_{01}(\boldsymbol{k}')] [k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{-n} - k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] d\boldsymbol{k}'.$$
(3.154)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^{-3}}{4}$:

$$\begin{aligned} &\frac{2^{6} \pi^{6} C_{n1}^{\alpha} \hbar \gamma_{IIE}^{10} a_{0}^{3} e^{2} e_{I4}^{2}}{75^{2} k_{B} T \varepsilon_{0}^{2}} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \left\{ \int \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ &\times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right] \right\} \\ &\times \varepsilon'^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} dk' \int_{0}^{\pi^{2} \pi} \int_{0}^{\pi^{2} \pi} k_{\alpha}'(\varepsilon') \sin \theta' d\theta' d\phi' - \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + (N_{LO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \right] \right\} \\ &\times \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{LO}) + \left(N_{LO} + 1 \right) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{LO}) \right] + \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO} \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon - \hbar \omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right] \right\} \\ &+ \left(N_{TO} + 1 \right) \delta(\varepsilon' \cdot \varepsilon + \hbar \omega_{TO}) \right] \left\{ \varepsilon^{n} f_{01}(\mathbf{k}) \left[1 - f_{01}(\mathbf{k}') \right] k'(\varepsilon')^{2} k_{\alpha}(\varepsilon) dk' \times \right\}$$

$$\times \int_{0}^{\pi} \int_{0}^{2\pi} \sin \theta' \, d\theta' \, d\varphi' \bigg\} \,. \tag{3.155}$$

222

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.155) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{2^{8}\pi^{7}C_{nI}^{\alpha}\hbar\gamma_{\Pi E}^{I0}a_{0}^{3}e^{2}e_{I4}^{2}}{75^{2}k_{B}T\varepsilon_{0}^{2}}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+(N_{LO}+I)\times\right]\right\}\times$$

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

$$\times\varepsilon^{n}f_{0I}(\varepsilon)\left[1-f_{0I}(\varepsilon')\right]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon'=-\frac{2^{8}\pi^{7}C_{nI}^{\alpha}\hbar\gamma_{\Pi E}^{I0}a_{0}^{3}e^{2}e_{I4}^{2}}{75^{2}k_{B}T\varepsilon_{0}^{2}}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\times$$

$$\times\varepsilon^{n}f_{0I}(\varepsilon)k_{\alpha}(\varepsilon)\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\langle N_{LO}[1-f_{0I}(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})]k(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{LO})}{d\varepsilon}++\frac{2}{\omega_{TO}}\langle N_{TO}\times$$

$$\times\left[1-f_{0I}(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]k(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon+\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}+(N_{TO}+I)\times$$

$$\times\left[1-f_{0I}(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})\right]k(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})^{2}\frac{dk(\varepsilon-\hbar\omega_{TO})}{d\varepsilon}\right\}.$$
(3.156)

Помножимо вираз (3.136) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^3}\frac{2^8\pi^7 C_{n\,l}^{\alpha}\hbar^2\gamma_{\Pi E}^{\ \ l0}a_0^3e^2e_{l4}^2}{75^2k_BT\,\varepsilon_0^2}\frac{M}{M_xM_B}\int\varepsilon^{n+m}f_{0\,l}(\varepsilon)k(\varepsilon)^2\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} [1 - f_{01} (\varepsilon + \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + (N_{LO} + 1) \times \left[1 - f_{01} (\varepsilon - \hbar \omega_{LO}) \right] k(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} [1 - f_{01} (\varepsilon + \hbar \omega_{TO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) [1 - f_{01} (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] \times \left[k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}) \right] k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \right\} d\varepsilon \int_{0}^{\pi 2\pi} k_{\alpha} (\varepsilon) k_{\beta} (\varepsilon) \sin \theta \, d\theta \, d\varphi \, .$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{nm}_{\beta \, \alpha \, l}$:

$$\begin{split} K_{\beta \alpha 1}^{nm} &= -\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{2^{10} \pi^{8} C_{n1}^{\alpha} \hbar^{2} \gamma_{IIE}^{10} a_{0}^{3} e^{2} e_{I4}^{2}}{3 \cdot 75^{2} k_{B} T \varepsilon_{0}^{2}} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \delta_{\alpha\beta} \int \varepsilon^{n+m} f_{01}(\varepsilon) k(\varepsilon)^{4} \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \langle N_{LO} [1 - f_{01}(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ &\times \left[1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{LO}) \right] k(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{LO})}{d\varepsilon} + \frac{2}{\omega_{TO}} \langle N_{TO} [1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] k(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon + \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} + (N_{TO} + 1) [1 - f_{01}(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] \times \\ &\times k(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})^{2} \frac{dk(\varepsilon - \hbar \omega_{TO})}{d\varepsilon} \rangle \right\} d\varepsilon \,. \end{split}$$

Враховуючи співвідношення (2.243), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^3}\frac{1}{k_BT}\int\{W_{\Pi O\Pi}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\Phi_2(\varepsilon')-\Phi_2(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}'=\\ =-\frac{2V}{(2\pi)^3}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_BT}\int\frac{32^2 \pi^9 \gamma_{\Pi E}^{-10} e^2 e_{14}^2}{75^2 \varepsilon_0^2 N}\frac{M}{M_x M_B}\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\right]\right\}d\boldsymbol{k}'=$$

$$+ (N_{LO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})] + \frac{2}{\omega_{TO}} [N_{TO} \ \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1) \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})] f_{02}(\mathbf{k}) [1 - f_{02}(\mathbf{k}')] [k'_{\alpha}(\varepsilon')\varepsilon'^{\ n} - k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}] d\mathbf{k}' .$$

$$(3.159)$$

224

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь OZ вздовж вектора k і врахуємо співвідношення $\frac{V}{N} = \frac{a_0^3}{4}$:

$$-\frac{2^{6}\pi^{6}C_{n2}^{\alpha}\hbar\gamma_{IIE}^{I0}a_{0}^{3}e^{2}e_{I4}^{2}}{75^{2}k_{B}T\varepsilon_{0}^{2}}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)\left\{\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+(N_{LO}+I)\times \delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]\right\}\right\}$$

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

$$\times\varepsilon'^{n}f_{02}(\mathbf{k})\left[1-f_{02}(\mathbf{k}')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)d\mathbf{k}'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\mathbf{k}'_{\alpha}(\varepsilon')\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'-\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\times(3.160)\times \delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+(N_{TO}+I)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\right\}+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+(N_{TO}+I)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\right]\right\}\varepsilon^{n}f_{02}(\mathbf{k})\left[1-f_{02}(\mathbf{k}')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)k_{\alpha}(\varepsilon)d\mathbf{k}'\times$$

$$\times\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\sin\vartheta'd\vartheta'd\varphi'\right\}.$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає 4π. Перейдемо в (3.160) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості δ- функції:

$$-\frac{2^{7}\pi^{7}C_{n2}^{\alpha}\hbar\gamma_{IIE}^{10}a_{0}^{3}e^{2}e_{I4}^{2}}{75^{2}k_{B}T\varepsilon_{0}^{2}}\frac{M}{M_{x}M_{B}}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\int\left\{\frac{1}{\omega_{LO}}\left[N_{LO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{LO})+\left(N_{LO}+1\right)\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{LO})\right]+\frac{2}{\omega_{TO}}\left[N_{TO}\delta(\varepsilon'-\varepsilon-\hbar\omega_{TO})+\left(N_{TO}+1\right)\times\right]\right\}\right\}$$

$$\times\delta(\varepsilon'-\varepsilon+\hbar\omega_{TO})\left]\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}k_{\alpha}(\varepsilon)d\varepsilon=1$$

$$(3.161)$$

$$= -\frac{2^{7} \pi^{7} C_{n2}^{\alpha} \hbar \gamma_{IIE}^{I0} a_{0}^{3} e^{2} e_{I4}^{2}}{75^{2} k_{B} T \varepsilon_{0}^{2}} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \left\{ N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO} \right) \right] \right\} \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar \omega_{LO} \right)^{1/2} + \left(N_{LO} + 1 \right) \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{LO} \right) \right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar \omega_{LO} \right)^{1/2} \right\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \left\{ N_{TO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO} \right) \right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar \omega_{TO} \right)^{1/2} + \left(N_{TO} + 1 \right) \times \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{TO} \right) \right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar \omega_{TO} \right)^{1/2} \right\} \varepsilon^{n} f_{02} \left(\varepsilon \right) k_{\alpha} \left(\varepsilon \right) .$$

Помножимо вираз (3.161) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$\frac{2V}{(2\pi)^{3}} \frac{2^{6} \pi^{7} C_{n2}^{\alpha} \hbar^{2} \gamma_{IIE}^{-10} a_{0}^{3} e^{2} e_{I4}^{2}}{75^{2} k_{B} T \varepsilon_{0}^{2}} \frac{M}{M_{x} M_{B}} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3} \int \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \{N_{LO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{LO}\right)\right] \times \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar \omega_{LO}\right)^{1/2} + (N_{LO} + 1) \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{LO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar \omega_{LO}\right)^{1/2}\right\} + \frac{2}{\omega_{TO}} \{N_{TO} \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} - \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} + (N_{TO} + 1) \times \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2}\right\} f_{02} (\varepsilon) \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \times \left[1 - f_{02} \left(\varepsilon - \hbar \omega_{TO}\right)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g} + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2}\right\} f_{02} (\varepsilon) \left(-\varepsilon - \varepsilon_{g}\right)^{1/2} \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \times \left(\sum_{k=1}^{n} \int_{0}^{\pi/2} \int_{0}^{\pi/2} \int_{0}^{\pi/2} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} d\varepsilon^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \int_{0}^{\pi/2} \int_{0}^{\pi/2} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \int_{0}^{\pi/2} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \int_{0}^{\pi/2} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \int_{0}^{\pi/2} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{k=1}^{n} \left(\varepsilon + \hbar \omega_{TO}\right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon \right)^{1/2} \delta^{n+m} d\varepsilon + \sum_{$$

Прийнявши до уваги співвідношення (3.24), отримаємо остаточний вираз для величини $K^{n\,m}_{\beta\,\alpha\,2}$:

$$\begin{split} K_{\beta\alpha2}^{n\,m} &= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2^8 \pi^8 \hbar^2 \gamma_{IIE} a_0^3 e^2 e_{I4}^2}{3 \cdot 75^2 k_B T \varepsilon_0^2} \frac{M}{M_x M_B} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int \left\{ \frac{1}{\omega_{LO}} \{N_{LO} \times \left[1 - f_{02} (\varepsilon + \hbar \omega_{LO})\right] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{LO})^{1/2} + (N_{LO} + 1) [1 - f_{02} (\varepsilon - \hbar \omega_{LO})] \times (3.163) \right\} \\ &\times \left(-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{LO}\right)^{1/2} + \frac{2}{\omega_{TO}} \left\{ N_{TO} [1 - f_{02} (\varepsilon + \hbar \omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g - \hbar \omega_{TO})^{1/2} + (N_{TO} + 1) [1 - f_{02} (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{TO})^{1/2} + \varepsilon^2 \right\} \\ &\times (N_{TO} + 1) [1 - f_{02} (\varepsilon - \hbar \omega_{TO})] (-\varepsilon - \varepsilon_g + \hbar \omega_{TO})^{1/2} \left\{ f_{02} (\varepsilon) (-\varepsilon - \varepsilon_g)^{3/2} \times \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \right] . \end{split}$$

3.2.9. Випадок розсіяння на близькодіючому потенціалі невпорядкованості

Крім запропонованих вище близькодіючих моделей розсіяння носіїв заряду існує ще один близькодіючий механізм розсіяння, описаний в літературі. Це так званий механізм розсіяння на невпорядкованості, обумовленій поступовою заміною в твердому розчині $AI_x A2_{1-x} B$ (A1, A2 – елементи другої або третьої групи; B- елемент шостої або п'ятої групи) елемента A1 на елемент A2.

Для електронів зони провідності ймовірність переходу для цього механізму розсіяння визначається з виразу [83-85]:

$$W_{H\Pi}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{x(1-x)N_0}{V} \Biggl\{ \Biggl[a^2 W_1 + (c^2 + b^2) \cos\theta W_2 \Biggr]^2 + b^2 \Biggl(\frac{b}{2} - \sqrt{2}c \Biggr)^2 \times \\ \times \sin\theta^2 W_2^2 \Biggr\} \delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}) , \qquad (3.164)$$

де $N_0 = \frac{\rho N_A}{\mu}$ - число елементарних комірок на одиницю об'єму; коефіцієнти *a,b,c* визначаються з виразу (2.73); W_1 та W_2 - потенціали невпорядкованості, зв'язані співвідношенням:

$$\varepsilon_g(x) = \varepsilon_g(0) + \frac{x}{\Omega} (W_I - W_2) . \qquad (3.165)$$

Враховуючи співвідношення (3.164), розрахуємо для електронів перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.18):

$$\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{1}{k_B T} \int \{ W_{HII}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') f_{0I}(\boldsymbol{k}) [I - f_{0I}(\boldsymbol{k}')] [\boldsymbol{\Phi}_I(\varepsilon') - \boldsymbol{\Phi}_I(\varepsilon)] \} d\boldsymbol{k}' =$$

$$= \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{\hbar C_{n_I}^{\alpha}}{k_B T} \int \frac{2\pi}{\hbar} \frac{x(1-x)N_0}{V} \left\{ \left[a^2 W_1 + \left(c^2 + b^2\right) \cos\theta W_2 \right]^2 + b^2 \left(\frac{b}{2} - \sqrt{2}c \right)^2 \sin\theta^2 W_2^2 \right\} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) f_{0\,I}(\mathbf{k}) [1 - f_{0\,I}(\mathbf{k}')] \times \left[k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon' - k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^n \right] d\mathbf{k}' \right]$$
(3.166)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$\frac{C_{n_{I}}^{\alpha}x(l-x)N_{0}}{2\pi^{2}k_{B}T}\left\{\int \varepsilon' \,^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,l}(\mathbf{k})[l-f_{0\,l}(\mathbf{k}')]\mathbf{k}'(\varepsilon')^{2}\,d\mathbf{k}'\times \times \int_{0}^{\pi}\int_{0}^{\pi}k_{\alpha}'(\varepsilon')\left\{\left[a^{2}W_{I}+\left(c^{2}+b^{2}\right)\cos\theta'W_{2}\right]^{2}+b^{2}\left(\frac{b}{2}-\sqrt{2}c\right)^{2}\sin\theta'^{2}W_{2}^{2}\right\}\times (3.167) \times \sin\theta'd\theta'd\phi'-\int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,l}(\mathbf{k})[l-f_{0\,l}(\mathbf{k}')]\mathbf{k}'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)d\mathbf{k}'\times \times \int_{0}^{\pi}\int_{0}^{\pi}\int_{0}^{\pi}\left\{\left[a^{2}W_{I}+\left(c^{2}+b^{2}\right)\cos\theta'W_{2}\right]^{2}+b^{2}\left(\frac{b}{2}-\sqrt{2}c\right)^{2}\sin\theta'^{2}W_{2}^{2}\right\}\sin\theta'\,d\theta'\,d\phi'\right\}= \\ =\frac{C_{n\,l}^{\alpha}x(l-x)N_{0}}{2\pi^{2}k_{B}T}\left\{\int \varepsilon' \,^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,l}(\mathbf{k})[l-f_{0\,l}(\mathbf{k}')]\mathbf{k}'(\varepsilon')^{2}F_{l}(\varepsilon')d\mathbf{k}'-\int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,l}(\mathbf{k})[l-f_{0\,l}(\mathbf{k}')]\mathbf{k}'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)F_{2}(\varepsilon')d\mathbf{k}'.$$

де $F_{I}(\varepsilon')$ - відома функція енергії, а $F_{2}(\varepsilon')$ визначається з виразу:

$$F_2(\varepsilon') = 2\pi \left[\left(\frac{2}{3}c^4 + b^4 + 4b^2c^2 - \frac{4\sqrt{2}}{3}b^3c \right) W_2^2 + 2a^4 W_1^2 \right].$$
(3.168)

Перейдемо в (3.167) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості *δ* - функції:

$$\frac{C_{n\,I}^{\alpha}x(1-x)N_{0}}{2\pi^{2}k_{B}T} \left\{ \int \varepsilon' \,^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,I}(\mathbf{k})[1-f_{0\,I}(\mathbf{k}')]k'(\varepsilon')^{2}F_{I}(\varepsilon')\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon' - \int \varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'}-\varepsilon_{\mathbf{k}})f_{0\,I}(\mathbf{k})[1-f_{0\,I}(\mathbf{k}')]k'(\varepsilon')^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)F_{2}(\varepsilon')\frac{dk'(\varepsilon')}{d\varepsilon'}d\varepsilon' \right\} = \\
= \frac{C_{n\,I}^{\alpha}x(1-x)N_{0}}{2\pi^{2}k_{B}T} \left\{ \varepsilon^{n}f_{0\,I}(\varepsilon)[1-f_{0\,I}(\varepsilon)]k(\varepsilon)^{2}F_{I}(\varepsilon)\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} - \varepsilon^{n}f_{0\,I}(\varepsilon) \times \right. \right. \tag{3.169}$$

$$\times \left[1-f_{0\,I}(\varepsilon)\right]k(\varepsilon)^{2}k_{\alpha}(\varepsilon)F_{2}(\varepsilon)\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} .$$

Помножимо вираз (3.169) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{C_{n_{I}}^{\alpha}x(1-x)\hbar N_{0}}{2\pi^{2}k_{B}T}\left\{\int \varepsilon^{n+m}f_{0\,I}(\varepsilon)\left[1-f_{0\,I}(\varepsilon)\right]k(\varepsilon)^{4}F_{I}(\varepsilon)\left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2}d\varepsilon\times\right.\\ \times\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi-\int \varepsilon^{n+m}f_{0\,I}(\varepsilon)\left[1-f_{0\,I}(\varepsilon)\right]k(\varepsilon)^{4}F_{2}(\varepsilon)\left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^{2}d\varepsilon\times (3.170)\\ \times\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\int_{0}^{2\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right\}.$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає $\frac{4}{3}\pi k(\varepsilon)^2 \delta_{\alpha\beta}$. Тоді отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha I}^{nm}$:

$$K_{\beta \alpha I}^{nm} = -\frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2x(1-x)\hbar N_0}{3\pi k_B T} \delta_{\alpha\beta} \int \varepsilon^{n+m} f_{0I}(\varepsilon) [1-f_{0I}(\varepsilon)] k(\varepsilon)^6 F_2(\varepsilon) \times \left[\frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right]^2 d\varepsilon \quad .$$
(3.171)

Для важких дірок валентної зони ймовірність переходу для розсіяння невпорядкованості визначається з виразу [4,9]:

$$W_{H\Pi}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{x(l-x)N_0}{V} W_2^2 \frac{1}{4} \left(l + 3\cos^2\theta \right) \delta\left(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'} - \varepsilon_{\boldsymbol{k}}\right). \quad (3.172)$$

Враховуючи співвідношення (3.172), розрахуємо для важких дірок перший інтеграл в правій стороні рівняння Больцмана (3.19):

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{1}{k_{B}T}\int\{W_{H\Pi}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon')-\boldsymbol{\Phi}_{2}(\varepsilon)]\}d\boldsymbol{k}'=$$

$$=-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{\hbar C_{n2}^{\alpha}}{k_{B}T}\int\frac{2\pi}{\hbar}\frac{x(1-x)N_{0}}{V}W_{2}^{2}\frac{1}{4}(1+3\cos^{2}\theta)\delta(\varepsilon_{\boldsymbol{k}'}-\varepsilon_{\boldsymbol{k}})\times$$

$$\times f_{02}(\boldsymbol{k})[1-f_{02}(\boldsymbol{k}')][k_{\alpha}'(\varepsilon')\varepsilon'^{n}-k_{\alpha}(\varepsilon)\varepsilon^{n}]d\boldsymbol{k}'.$$
(3.173)

Перейдемо до сферичної системи координат відносно k', направивши вісь ОZ вздовж вектора k:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}x(l-x)N_{0}W_{2}^{2}}{2\pi^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)\left\{\int\varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[l-f_{02}(k')\right]\times\right]\times\right\}$$

$$\times\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k'_{\alpha}(\varepsilon')\frac{l}{4}\left(l+3\cos^{2}\theta\right)\sin\theta'd\theta'd\phi'-\int\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})\times\right]\times$$

$$\times f_{02}(k)\left[l-f_{02}(k')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}dk'_{\alpha}(\varepsilon)dk'\int_{0}^{\pi^{2}\pi}\frac{l}{4}\left(l+3\cos^{2}\theta\right)\sin\theta'd\theta'd\phi'\right]=(3.174)$$

$$=-\frac{C_{n2}^{\alpha}x(l-x)N_{0}W_{2}^{2}}{2\pi^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)\left\{\int\varepsilon'^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[l-f_{02}(k')\right]\times\right]\times$$

$$\times\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}dk'-\int2\pi\varepsilon^{n}\delta(\varepsilon_{k'}-\varepsilon_{k})f_{02}(k)\left[l-f_{02}(k')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}dk'\right)\times$$

$$\times k_{\alpha}(\varepsilon)dk'\right\},$$

де $F_3(\varepsilon')$ - відома функція енергії.

Перейдемо в (3.174) від інтегрування по хвильовому вектору до інтегрування по енергії, прийнявши до уваги властивості *δ* - функції:

$$-\frac{C_{n2}^{\alpha}x(1-x)N_{0}W_{2}^{2}}{4\pi^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left\{\int\varepsilon' {}^{n}\delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon')\right]\times\right] \times \left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}F_{3}(\varepsilon')d\varepsilon'-\int2\pi\varepsilon' \delta(\varepsilon'-\varepsilon)f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon')\right]\left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}\times\right] \times \left(-\varepsilon'-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}F_{3}(\varepsilon)d\varepsilon'\right) = -\frac{C_{n2}^{\alpha}x(1-x)N_{0}W_{2}^{2}}{4\pi^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2}\left\{\varepsilon^{n}f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon)\right]\times\right] \times \left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}F_{3}(\varepsilon)-2\pi\varepsilon'' f_{02}(\varepsilon)\left[1-f_{02}(\varepsilon)\right]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)^{1/2}k_{\alpha}(\varepsilon)\right\}.$$
(3.175)

Помножимо вираз (3.175) на $\hbar k_{\beta}(\varepsilon)\varepsilon^{m}$ (*m*= 0,1,2,3..., β = 1,2,3) і проінтегруємо його по хвильовому вектору, перейшовши до сферичної системи координат:

$$-\frac{2V}{(2\pi)^{3}}\frac{C_{n2}^{\alpha}x(1-x)N_{0}W_{2}^{2}\hbar}{4\pi^{2}k_{B}T}\left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^{2}}\right)^{3}\left\{\int\varepsilon^{n+m}f_{02}(\varepsilon)[1-f_{02}(\varepsilon)]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)\times\right.\\ \times F_{3}(\varepsilon)d\varepsilon\int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi - \int2\pi\,\varepsilon^{n+m}f_{02}(\varepsilon)[1-f_{02}(\varepsilon)]\left(-\varepsilon-\varepsilon_{g}\right)d\varepsilon\times(3.176)\\ \times \int_{0}^{\pi^{2}\pi}k_{\alpha}(\varepsilon)k_{\beta}(\varepsilon)\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\right\}.$$

В першому інтегралі в фігурних дужках інтегрування по кутовим змінним дає нуль в силу співвідношення (3.40), а в другому інтегралі дає $\frac{4}{3}\pi k(\varepsilon)^2 \delta_{\alpha\beta}$. Тоді отримаємо остаточний вираз для величини $K_{\beta \alpha 2}^{nm}$:

$$K_{\beta \alpha 2}^{nm} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{2 C_{n2}^{\alpha} x (l-x) N_0 W_2^2 \hbar}{3 k_B T} \left(\frac{2m_{hh}}{\hbar^2}\right)^4 \delta_{\alpha\beta} \int f_{02}(\varepsilon) \times \left[l - f_{02}(\varepsilon)\right] \left(-\varepsilon - \varepsilon_g\right)^2 \varepsilon^{n+m} d\varepsilon \quad .$$
(3.177)

3.3. Розв'язок рівняння нейтральності

Для обчислення вище означених величин $K_{\beta \alpha a}^{nm}$, $M_{\beta \alpha a}^{nm}$ та $B_{\beta a}^{m}$ необхідно визначити рівень Фермі, який знаходиться шляхом чисельного розв'язку рівняння нейтральності. В загальному випадку рівняння нейтральності має вид:

$$n - p = N_D^+ - N_A^- , \qquad (3.178)$$

де N_D^+ , N_A^- - концентрація іонізованих донорів та акцепторів відповідно. Концентрація електронів в зоні провідності визначається з виразу:

$$n = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{1}{1 + exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T}\right)} k(\varepsilon)^2 \frac{dk(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon , \qquad (3.179)$$

де ε_F - рівень Фермі, а початок відліку енергії знаходиться в точці Γ_6 зони Бриллюена.

Закон дисперсії електронів визначається з секулярного рівняння Кейна (1.2). Для отримання явного виду залежності $k(\varepsilon)$ зробимо наступні перетворення. Введемо позначення:

$$y = \frac{\hbar^2 k(\varepsilon)^2}{2 m_0};$$

$$a_1 = -\left(\frac{2 m_0 P^2}{\hbar^2} + 2 \varepsilon_g + \Delta + 3 \varepsilon\right);$$

$$a_2 = \frac{2 m_0 P^2}{\hbar^2} \left(\varepsilon + \varepsilon_g + \frac{2}{3} \Delta\right) + 3 \varepsilon^2 + 2 \varepsilon \left(\varepsilon + \Delta\right) + \varepsilon_g \left(\varepsilon_g + \Delta\right);$$

$$a_3 = -\left(\varepsilon + \varepsilon_g\right) \left(\varepsilon + \varepsilon_g + \Delta\right) \varepsilon .$$
(3.180)

Використовуючи позначення (3.180), отримаємо рівняння Кейна у виді:

$$y^{3} + a_{1} y^{2} + a_{2} y + a_{3} = 0 \quad . \tag{3.181}$$

Це кубічне рівняння підстановкою $y = x - \frac{a_1}{3}$ зводиться до так званого "неповного" рівняння з дійсними коефіцієнтами:

$$x^3 + b_1 x + b_2 = 0 , (3.182)$$

де
$$b_1 = -\frac{a_1^2}{3} + a_2$$
; $b_2 = 2\left(\frac{a_1}{3}\right)^3 - \frac{a_1a_2}{3} + a_3$

Так званий "тригонометричний " розв'язок рівняння (3.182) має вид:

$$x_{l,2} = -2\sqrt{-\frac{b_l}{3}}\cos\left(\frac{\alpha}{3}\pm\frac{\pi}{3}\right); \quad x_3 = 2\sqrt{-\frac{b_l}{3}}\cos\left(\frac{\alpha}{3}\right) , \quad (3.183)$$

де
$$\cos \alpha = -\frac{b_2}{2\sqrt{-\left(\frac{b_l}{3}\right)^3}}$$

Безпосередньою підстановкою можна встановити, що корінь $x_1 = -2\sqrt{-\frac{b_1}{3}}\cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{\pi}{3}\right)$ відповідає зоні провідності Γ_6 та зоні легких дірок Γ_8 , а корінь $x_2 = -2\sqrt{-\frac{b_1}{3}}\cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{\pi}{3}\right)$ відповідає спін-відщепленій зоні Γ_7 . Явна залежність $k(\varepsilon)$ має наступний вид [86]:

$$k(\varepsilon)^{2} = \frac{2m_{0}}{\hbar^{2}} \left[-2\sqrt{-\frac{b_{I}}{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{a_{I}}{3} \right] - \text{для зон } \Gamma_{6} \text{ та } \Gamma_{8} ; \quad (3.184)$$

$$k(\varepsilon)^{2} = \frac{2m_{0}}{\hbar^{2}} \left[-2\sqrt{-\frac{b_{1}}{3}} \cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{a_{1}}{3} \right] - \text{для зони } \Gamma_{7}.$$
(3.185)

Підставляючи (3.184) в (3.179), отримаємо вираз для концентрації електронів в зоні провідності:

$$n = \frac{1}{2\pi^{2}} \left(\frac{2m_{0}}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int_{0}^{\infty} \left[-2\sqrt{-\frac{b_{I}}{3}}\cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{\pi}{3}\right) - \frac{a_{I}}{3}\right]^{1/2} \left[\frac{b_{3}\cos\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{\pi}{3}\right)}{3\sqrt{-\frac{p}{3}}} + \frac{2}{3\sqrt{-\frac{b_{I}}{3}}}\sin\left(\frac{\alpha}{3} - \frac{\pi}{3}\right)b_{4} + 1\right] \frac{d\varepsilon}{\exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_{F}}{k_{B}T}\right) + 1},$$
(3.186)

де

$$b_{3} = 2a_{1} + \frac{2m_{0}P^{2}}{\hbar^{2}} + 6\varepsilon + 2(\varepsilon_{g} + \Delta); \ b_{4} = \frac{-b_{5}b_{1} + b_{3}b_{2}}{12\left(-\frac{b_{1}}{3}\right)^{5/2}\left[1 + \frac{9b_{2}^{2}}{4b_{1}^{2}}\right]^{1/2}};$$

$$b_{5} = -\frac{2}{3}a_{1}^{2} + a_{2} - \frac{a_{1}}{3}\left[\frac{2m_{0}P^{2}}{\hbar^{2}} + 6\varepsilon + 2(\varepsilon_{g} + \Delta)\right] - 3\varepsilon^{2} - 2\varepsilon(\varepsilon_{g} + \Delta) - \varepsilon_{g}(\varepsilon_{g} + \Delta).$$

Приймаючи до уваги закон дисперсії (2.15), вираз для концентрації важких дірок валентної зони можна записати у виді:

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_{hh}k_BT}{\hbar^2}\right)^{3/2} F_{1/2} \left(\frac{-\varepsilon_F - \varepsilon_g}{k_BT}\right), \qquad (3.187)$$

де $F_{l/2}(x)$ - однопараметричний інтеграл Фермі.

Інтеграли (3.186) та (3.187) в аналітичному виді не вичислюються, тому

вони обчислювалися методом Ньютона- Котеса з допомогою програми "quanc8" [74] з точністю 10 знаків. Рівняння нейтральності (3.178) розраховувалося з точністю ~ 0.1%.

Висновки до розділу 3

- Запропоновано метод знаходження аналітичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана для напівпровідника з ізотропним законом дисперсії, який справедливий для довільного відхилення функції розподілу від рівноважного значення.
- 2. Визначено критерій відбору фізичних розв'язків серед сукупності математичних розв'язків стаціонарного рівняння Больцмана.
- Представлена методика розрахунку множників К^{nm}_{βαa} при коефіцієнтах розкладу в ряд за степенями енергії нерівноважної функції розподілу для різних механізмів розсіяння.

РОЗДІЛ 4

Застосування принципу близькодії до опису процесів розсіяння електронів в твердих розчинах сполук А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V

Розглянуті в попередніх розділах моделі розсіяння носіїв заряду, а також метод знаходження нерівноважної функції розподілу дозволяють описати явища переносу в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$. В цьому розділі буде проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей електронів в твердих розчинах $Cd_xHg_{1-x}Te$, $Cd_xHg_{1-x}Se$, $Zn_xHg_{1-x}Te$, $Zn_xHg_{1-x}Se$, ZnO, GaN, CdS, InN та InSb. Вибрані сполуки демонструють широкий діапазон зміни ширини забороненої зони – від від'ємного значення (~ -0.2 ÷ -0.3 eB) для HgTe та HgSe до додатного (~ 1÷3 eB) для CdTe, ZnTe, ZnSe та GaN. Попередньо для кожного з цих сполук будуть вибрані параметри зонної структури, які в подальшому використовуватимуться при розрахунках.

4.1. Параметри твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te

Твердий розчин Cd_xHg_{1-x} Те знаходить широке застосування в електронній техніці, зокрема в інфрачервоній техніці, завдяки своїм унікальним фізичним властивостям: великій рухливості електронів та можливості плавно змінювати ширину забороненої зони від 0 до $1.6 \ eB$. Ширина забороненої зони Cd_xHg_{1-x} Те визначалася різними авторами з вимірювань фотопровідності [87,88], спектрів поглинання [89-91], магнітооптичних фотоефектів [92-94], залежності гальваномагнітних ефектів від температури і тиску [95-97], осциляцій Шубнікова- де Гааза [98] та фотолюмінісценції [99-101]. При цьому були отримані різні емпіричні формули залежності ширини забороненої зони від складу та температури, наприклад,

$$E_g(x,T) = -0.30 + 5 \times 10^{-4} T + (1.91 - 10^{-3} T)x, \qquad (4.1)$$

справедливої для 0.135 < x < 0.203 [91]; або

$$E_g(x,T) = -0.303 + 1.73x + 0.25x^4 + 5.6 \times 10^{-4} T(1-2x) , \qquad (4.2)$$

справедливої для 0.23 < x < 0.61; 10 K < T < 300 K [89]; або

$$E_g(x,T) = -0.25 + 1.59x + 0.327x^3 + 5.233 \times 10^{-4}T(1 - 2.08x), \qquad (4.3)$$

справедливої для 0.13 < x < 0.6 ; 20 K < T < 300 K [87].

Найбільш точна залежність $E_g(x,T)$, отримана в роботі [102], має наступний вид:

$$E_g(x,T) = -0.302 + 1.93x - 0.81x^2 + 0.832x^3 + 5.35 \times 10^{-4} T(1-2x) . \quad (4.4)$$

При визначенні енергетичного еквівалента матричного елемента $E_p = \frac{2m_0P^2}{\hbar^2}$ в роботах [92, 93, 96, 97] припускалося, що ця величина не залежить від складу та температури. Однак, сильний розкид експериментальних значень свідчить про можливу таку залежність. З іншої сторони, результати робіт [103,104] підтверджують таку залежність, яка для x < 0.5 має наступний вид:

$$\begin{aligned} x &= 0 & -E_p = 18.1 - 6.8 \times 10^{-3} T; \\ 0 &< x &< 0.5 - E_p = 23.6 - 2.7 \times 10^{-2} T. \end{aligned}$$
 (4.5)

Згідно результатів роботи [105] величина спін-орбітального розщеплення в Cd_xHg_{1-x}Te для *x* < 0.5 рівна *1.08* eB і приймалася незалежною від складу та температури, тоді як для CdTe вона складає величину 0.92 eB [106].

Густина твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te описується емпіричним виразом [118]:

$$\rho = (8.05 - 2.3) \times 10^3 \, \kappa c / \, m^3 \,. \tag{4.6}$$

Решіткова діелектрична стала для HgTe становить $\kappa_L = 4.2$ [116], а для CdTe - $\kappa_L = 3.1$ [105]. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Високочастотна діелектрична стала для HgTe становить $\kappa_{\infty} = 10.4$ [116], а для CdTe - $\kappa_{\infty} = 7.4$ [105]. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Частота поперечних оптичних фононів визначалася по результатам робіт [105, 116], а частота поздовжніх оптичних фононів розраховувалася із співвідношення Ліддена-Сакса-Теллера:

$$\omega_{LO}^{2} = \omega_{TO}^{2} \frac{\kappa_{L} + \kappa_{\infty}}{\kappa_{L}} .$$
(4.7)

Величина оптичного потенціалу деформації d_0 для HgTe становить 29.8 eB [56], а для CdTe - 22 eB [117]. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних. Константи акустичного потенціалу деформації для електронів зони провідності вибиралися за результатами роботи [55].

Пружні константи C_l та C_t розраховувалися за результатами робіт [13, 119-122], а поздовжня та поперечна швидкості звуку визначалися з виразів:

$$v_{II} = \sqrt{\frac{C_l}{\rho}} ; \quad v_{\perp} = \sqrt{\frac{C_t}{\rho}}.$$
(4.8)

Значення п'єзоакустичної константи e_{14} для x < 0.5 вибиралось згідно результатів роботи [123], а для x > 0.5 - згідно робіт [123, 124]. Величина матричного елемента розсіяння невпорядкованості вибиралася згідно роботи [83]. Значення параметрів, що використовувалися в розрахунках представлені в таблиці 4.1.

Таблиця 4.1

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та температурна	Літера-
	залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Hg} = 33.312 \times 10^{-26}$	
	$M_{Cd} = 18.666 \times 10^{-26}$	
	$M_{Te} = 21.19 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.461 \times 10^{-10} - 2.0 \times 10^{-12} x$	[1]
Ширина забороненої зо-	$E_g = -0.302 + 1.93x + 5.35 \times 10^{-4} (1 - 2x) - 0.81x^2 +$	[102]
ни, еВ	$+0.832 x^3$	
Енергетичний еквівалент	$x=0$ $-E_p=18.1-6.8\times 10^{-3}T$;	
матричного елемента, еВ	$0 < x < 0.5 - E_p = 23.6 - 2.7 \times 10^{-23} T$;	[103]
	$x > 0.5$ - $E_p = 21.0$	[125]
Спін-орбітальне роз-	$x < 0.5$ $\Delta = 1.08$	[105]
щеплення, еВ	$x > 0.5$ $\Delta = 0.92$	[106]
Густина, кг/м ³	$\rho = (8.05 - 2.3x) \times 10^{3}$	[118]
Оптичний потенціал	29.8 - 7.8 x	[56,117]
деформації, еВ		
Частота поперечних	$\omega_{TO} = 2.2 \times 10^{-13} + 0.43 \times 10^{-13} x$	[105,116]
оптичних фононів, рад/с		
Решіткова діелектрична	$\varepsilon_L = 4.7 - 1.6 x$	[105,116]
стала		
Високочастотна ді-	$\varepsilon_{\infty} = 7.4 - 0.12 x$	[105,116]
електрична стала		
Константи акустичного	l=0.1; $m=4.0$; $n=-1.91$; $C=-8.3$.	[55]
потенціалу деформації,		
еВ(зона провідності)		
Пружні константи, Н/м ²	$C_l = 6.422 \times 10^{-10} - 0.102 \times 10^{-10} x;$	[13, 119-
	$C_t = 1.594 \times 10^{-10} 0.056 \times 10^{-10} x$.	122]
П'єзоакустична кон-	$x < 0.5 - e_{14} = 0.2003;$	[123]
станта, Кл/м ²	$x > 0.5 - e_{14} = 0.03457 - 1.39 \times 10^{-5} T$	[123,124]
Матричний елемент	$V = 9 \times 10^{-23}$	[83]
розсіяння невпорядко-		
ваності, $eB \times cm^3$		

Параметри кристалів Cd_xHg_{1-x}Te

4.2. Температурні залежності рухливості електронів в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в [126-128,279] для кристалів Cd_xHg_{1-x}Te з 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 припускалась модель однократно іонізованої домішки, а рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності:

$$n - p = N_{4,2} \tag{4.9}$$

де N_{4.2}-концентрація іонізованої домішки при 4.2 К, яка визначалася за результатами роботи [126].

Для *x*=0.36; 0.52; 0.59 припускалась модель однократно іонізованої домішки, а рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності:

$$n = N_D^+ = 1/eR_{exp} , (4.10)$$

де R_{exp} – експериментальне значення коефіцієнта Холла [126], N_D^+ – концентрація іонізованих донорів.

Для *x*=1 рівень Фермі розраховувався з рівняння нейтральності з врахуванням моделі структури дефектів, представленої в [278].

Таблиця 4.2

x	Υпо	$\gamma_{\Pi E}$	ΥЦ	$\gamma_{\rm CD} N_{CD}$
				$\times 10^{14} cm^{-3}$
0.00	0.51	0.46	1.0	0.06
0.08	0.50	0.40	1.0	2.4
0.17	0.53	0.45	1.0	2.0
0.26	0.70	0.50	1.0	2.0
0.36	0.63	0.50	1.0	2.0
0.52	0.66	0.47	1.0	2.0
0.59	0.67	0.48	1.0	3.0
1.0	0.64	0.59	1.0	11.0

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



Рис.4.1. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [126].



Рис.4.2. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.08). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [126].



Рис.4.3. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.17). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [126].



Рис.4.4. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.26). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [126].



Рис.4.5. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.36). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [127].



Рис.4.6. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.52). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [127].



Рис.4.7. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.59). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [127].



Рис.4.8. Температурна залежність рухливості електронів в Cd_xHg_{1-x}Te (x=1). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, СД, НД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [128].

Теоретичні залежності $\mu(T)$ представлені на рис. 4.1-4.8 ^{*}. Суцільні лінії представляють криві, отримані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 4.2 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ . Видно, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4.1-4.8 точковими лініями представлені відповідні залежності.

Як видно, при низьких температурах ($T < 50 \ K$) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації. Розсіяння невпорядкованості та розсіяння на акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля теж відіграють значну роль в цьому інтервалі. При високих температурах внесок розсіяння на полярних оптичних фононах стає переважаючим. Решта механізмів розсіяння — розсіяння на акустичних, неполярних оптичних фононах, оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля та на іонізованих домішках — дають знехтувано малий внесок.

Якщо порівняти теоретичні криві $\mu(T)$, отриманих на основі близькодіючих моделей розсіяння, з кривими, отриманими в наближенні часу релаксації [126, 128,129], то видно, що в області низьких температур близькодіючі моделі розсіяння дають добре узгодження з експериментом, тоді як наближення часу релаксації дає розбіжність між теорією та експериментом на половину порядку і більше.

4.3. Параметри твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Se

Твердий розчин $Cd_xHg_{1-x}Se$ демонструє лінійну залежність ширини забороненої зони від температури та складу [143-148], однак, в різних температурних діапазонах величина $\frac{dE_g}{dT}$ є різна. Тому для залежності $E_g(T)$ була вибрано наступне співвідношення [149-150]:

^{*} Тут і нижче представлені графіки з порівнянням близькодіючих та далекодіючих (наближення часу релаксації) моделей.

$$Eg = -0.22 + 2.06 x + 2 \times 10^{-4} (1 - 2.22x) T - T < 100 K;$$

$$Eg = -0.20 + 2.015 x + 6 \times 10^{-4} (1 - 2.22x) (T - x) - T \ge 100 K.$$
(4.11)

Згідно результатів роботи [145] кейнівський матричний елемент P(x) при 4.2 К не залежить від складу і рівний $7.2 \times 10^{-8} eB cm$. З іншої сторони, автори робіт [149,150], припускаючи незалежність P від температури для x=0.45 та залежність P від температури для x=0, провели лінійну інтерполяцію між значеннями P(0) та P(0.45) для кожної температури і отримали вираз:

$$P = 7.2 \times 10^{-8} + 2 \times 10^{-11} (1 - 2.22 \text{ x}) T \text{ eB cm}.$$
(4.12)

Згідно результатів роботи [147] величина спін-орбітального розщеплення в CdSe складає величину 0.43 eB, а для HgSe – 0.45 eB [145]. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Значення ефективної маси важких дірок припускалося незалежним від складу та температури і вибиралося згідно роботи [149].

Густина твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Se описується емпіричним виразом [1, 151]:

$$\rho = \frac{4 \left[112.4 \ x \ + (1 - x) 200.59 + 78.96 \right]}{(6.0855 - 0.004 \ x)^3} 1.6605 \times 10^3 \ \kappa z/m^3 \ . \tag{4.13}$$

Згідно результатів робіт [152,153] для решіткової діелектричної сталої припускалася лінійна залежність від складу. Для високочастотної діелектричної сталої згідно цих же авторів спостерігається лінійна залежність від складу та складна залежність від температури : при T > 100 K спостерігається лінійна залежність, а при низьких температурах – незалежність від температури.

Згідно результатів роботи [154] частота поперечних оптичних фононів в HgSe рівна 2.49×10¹³ рад/с, а для CdSe – 3.11×10¹³ рад/с [153]. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Для величини оптичного потенціалу деформації припускалося, що вона рівна аналогічній величині для Cd_xHg_{1-x}Te [149-150].

Константи акустичного потенціалу деформації для електронів зони провідності вибиралися за результатами роботи [155-160]. Пружні константи C_l та C_t розраховувалися за результатами робіт [1, 157], згідно яких ці величини лінійно залежать від температури. Для величини п'єзоакустичної константи e_{14} припускалося, що вона рівна аналогічній величині для HgTe [123]. Величина матричного елемента розсіяння невпорядкованості вибиралася згідно роботи [150]. Значення параметрів, що використовувалися в розрахунках представлені в таблиці 4.4.

Таблиця 4.4

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та температурна	Літера-
	залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Hg} = 33.312 \times 10^{-26}$	
	$M_{Cd} = 18.666 \times 10^{-26}$	
	$M_{Se} = 13.111 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.084 \times 10^{-10} - 1 \times 10^{-12} x \ (0 \le x \le 0.7)$	[141,142]
Ширина забороненої зо-	$E_g = -0.22 + 2.06 x + 2 \times 10^{-4} \times$	
ни, еВ	$\times (1-2.22 x) T$ - $T < 100 K$	[143-
	$E_g = -0.2 + 2.015 x + 6 \times 10^{-4} (1 - 2.22 x) \times$	150]
	$(T - 100)$ - $T \ge 100 K$	
	0 11	
Кейнівський матричний	$P = 7.2 \times 10^{-6} + 2 \times 10^{-11} (1 - 2.22 x) T$	[145,149,
елемент, еВ×см		150]
Спін-орбітальне роз-	$\Delta = 0.45 - 0.02 x$	[145,147]
щеплення, еВ		
Ефективна маса важких	$m_{hh}/m_0 = 0.67$	[149]
дірок		
Густина, кг/м ³	$4 \left[112.4 \ x + (1-x) 200.59 + 78.96 \right]$	[1, 151]
	$p = \frac{(6.0855 - 0.004 x)^3}{(6.0855 - 0.004 x)^3}$	
	$\times 1.6605 \times 10^{3}$	
Оптичний потенціал	$d_0 = 29.8$	[149,150]
деформації, еВ		
Частота поперечних	$\omega_{TO} = 2.49 \times 10^{13} + 0.62 \times 10^{13} x$	[153,154]
оптичних фононів, рад/с		

Параметри кристалів Cd_xHg_{1-x}Se

Решіткова ліелектрична	$\varepsilon_{I} = 15.5 - 11.68 x$	[147.152.
стала		1531
Високочастотна ді-	$\varepsilon_{\infty} = 13.0 - 7.2 x$ - $T < 100 K$	[147,152,
електрична стала	$\varepsilon_{m} = 13.0 - 7.2 x - 2 \times 10^{-2} (1 - x) x$	153]
1	$\times (T-100)$ - $T \ge 100 K$	-
Константи акустичного	l=4.4; $m=8.6$; $n=-4.68$; $C=-10.5$.	[155-
потенціалу деформації,		160]
еВ(зона провідності)		
Пружні константи, Н/м ²	$C_{11} = (6.922 - 0.003 \ T) \times 10^{10}$	[1,157]
	$C_{12} = (5.129 - 0.003 \ T) \times 10^{10}$	
	$C_{44} = (2.32 - 0.0004 \text{ T}) \times 10^{10}$	
	$C_{l} = \frac{1}{5}(3C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})$	
	$C_t = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})$	
П'єзоакустична кон-	$e_{14} = 0.2003;$	[123,149,
станта, Кл/м ²		150]
Матричний елемент	V 16 cP	[150]
розсіяння невпорядко-	$\frac{1}{\Omega} = 1.0 \ eB$	
ваності(нормований на		
елементарну комірку),		
eB		

4.4. Температурні залежності рухливості електронів в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Se

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів в кристалах Cd_xHg_{1-x}Se проводилося з експериментальними даними, представленими в роботах [146, 149-151]. Досліджувалися два типи зразків: а) зразки, отримані шляхом відпалу в парі селену або в динамічному вакуумі [161,162] – x=0; x=0.05 (зразок A1); x=0.1(зразок B1); x=0.2 (зразок C1); x=0.268 (зразок 26BB2); x=0.353 (зразок 24AA1-1); x=0.547 (зразок 40EB2). б) – зразки, отримані шляхом відпалу в парі ртуті [163] - x=0; x=0.05 (зразок A5); x=0.1(зразок B5); x=0.2 (зразок C4); x=0.268 (зразок 26BB3).

Рівень Фермі розраховувався з рівняння електронейтральності:

$$n - p = N_D^+ - N_A^-, (4.14)$$

де $N_D^+; N_A^-$ - концентрації іонізованих донорів та акцепторів, які визначалися за результатами робіт [146, 149-151].

Теоретичні залежності $\mu(T)$ представлені на рис. 4.9-4.15 для зразків, відпалених в парі селену або в динамічному вакуумі, та на рис.4.16-4.20 для зразків, відпалених в парі ртуті. Суцільні лінії представляють криві, отримані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 4.5 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ . Видно, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому



Рис.4.9. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [146].



Рис.4.10. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.05) – зразок А1. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].



Рис.4.11. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.1) – зразок В1. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].



Рис.4.12. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.2) – зразок С1. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].



Рис.4.13. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.268) – зразок 26BB2. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [151].



Рис.4.14. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.353) – зразок 24AA1-1. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [151].



Рис.4.15. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.547) – зразок 40ЕВ2. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [151].


Рис.4.16. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [149].



Рис.4.17. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.05) – зразок А5. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].



Рис.4.18. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.1) – зразок B5. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].



Рис.4.19. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.2) – зразок C4. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [150].





Рис.4.20. Температурна залежність рухливості електронів в кристалі Cd_xHg_{1-x}Se (x=0.268) – зразок 26BB3. *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП, НП, СД механізми розсіяння; б: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [151].

Таблиця 4.5

Зразок	x	γпо	γід	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
_	0	0.61	0.26	0.32	1.9
-	0	0.478	0.26	0.32	7.35
A1	0.05	0.64	0.26	0.32	2.8
A5	0.05	0.54	0.26	0.32	8.0
B1	0.1	0.70	0.26	0.32	4.5
B5	0.1	0.56	0.26	0.32	7.5
C1	0.2	0.70	0.26	0.32	2.2
C4	0.2	0.58	0.26	0.32	11.47
26BB2	0.268	0.68	0.26	0.32	2.9
26BB3	0.268	0.65	0.26	0.32	6.9
24AA1-1	0.353	0.64	0.26	0.32	2.3
40EB2	0.547	0.59	0.26	0.32	7.5

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

розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4.22-4.33 точковими лініями представлені відповідні залежності. Видно, що при низьких температурах (*T*<60 K) основними

механізмами розсіяння для всіх типів зразків є розсіяння на потенціалі статичної деформації та розсіяння невпорядкованості (для x>0). Однак, для зразків відпалених у парі ртуті, що мають високу концентрацію електронів (крім зразка 26ВВЗ з відносно невисокою концентрацією електронів). додатковим механізмом розсіяння у цьому інтервалі температур є розсіяння на іонізованих домішках, тоді як для зразків, відпалених у парі селену або динамічному вакуумі, цей механізм відіграє незначну роль. При високих температурах внесок розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння – розсіяння на акустичних та неполярних оптичних фононах, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля - дають знехтувано малий внесок.

Порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей (наближення часу релаксації) розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження з експериментом (див. рис 4.9-4.20а).

4.5. Параметри твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te

Твердий розчин Zn_xHg_{1-x} Те розглядається як потенціально кращий матеріал для інфрачервоних детекторів в порівнянні з твердим розчином Hg_xCd_{1-x} Те завдяки кращій стабільності матеріалу [189-192]. В літературі відомо декілька емпіричних виразів для ширини забороненої зони Zn_xHg_{1-x} Те в залежності від температури та складу, зокрема [193]:

$$E_g(x,T) = -0.303 + 5 \times 10^{-4} T + (2.69 - 1.22 \times 10^{-3} T)x ;$$

$$E_g(x,T) = -0.244 + 4.5 \times 10^{-4} T + (2.58 - 9 \times 10^{-4} T)x .$$
(4.15)

Найбільш точну залежність представлено в роботі [194]:

$$Eg(x,T) = -0.3 + 3.24 \times 10^{-2} x^{1/2} + 2.731x - 0.629x^{2} + 0.533x^{3} + 5.3 \times 10^{-4} (1 - 0.76x^{1/2} - 1.29x).$$
(4.16)

Згідно результатів роботи [195] величина енергетичного еквівалента матричного елемента взаємодії для HgTe лінійно залежить від температури, а для ZnTe складає величину 20.79 eB [113]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [105] величина спін-орбітального розщеплення в НgTe складає *1.08 eB*, а для ZnTe – *0.96 eB* [173]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [195] ефективна маса важких дірок в HgTe лінійно залежить від температури, а для ZnTe складає величину 0.60 m₀ [174]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Густина твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te описується емпіричним виразом [175,118]:

$$\rho = 8.05 \times 10^{3} - 2.414 \times 10^{3} x \quad . \tag{4.17}$$

Решіткова діелектрична стала для ZnTe становить $\kappa_L = 2.39$ [176], а для HgTe - $\kappa_L = 4.7$ [116]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Високочастотна діелектрична стала для ZnTe становить $\kappa_{\infty} = 7.28$ [176], а для HgTe - $\kappa_{\infty} = 10.4$ [116]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [116] частота поперечних оптичних фононів в HgTe рівна 2.2×10¹³ рад/с, а для ZnTe – 3.632×10¹³ рад/с [123]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Величина оптичного потенціалу деформації d_0 для ZnTe становить 23 eB [177,178], а для HgTe - 29.8 eB [56]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Для константи акустичного потенціалу деформації для електронів зони провідності вибиралися вибиралося оціночне значення $E_{AC} = 2.0 \ eB$.

Пружні константи C_l та C_t розраховувалися за результатами роботи [118, 124]. Згідно роботи [122] значення п'єзоакустичної константи e_{14} в HgTe становить 0.2003 K_{n/m^2} , а для ZnTe – 0.0284 K_{n/m^2} [124]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих залежностей. Для величини матричного елемента розсіяння невпорядкованості вибиралося оціночне значення $V = 6 \times 10^{-23} eB cm^3$. Значення параметрів, що використовувалися в розрахунках представлені в таблиці 4.6.

Таблиця 4.6

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та температурна	Літера-
	залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Zn} = 10.858 \times 10^{-26}$	
	$M_{Hg} = 33.312 \times 10^{-26}$	
	$M_{Te} = 21.19 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.461 \times 10^{-10} - 3.573 \times 10^{-11} x$	[1,175]
Ширина забороненої зо-	$E_g = -0.3 + 3.24 \times 10^{-2} x^{1/2} + 2.731 x - 0.629 x^2 +$	[194]
ни, еВ	$+ 0.533 x^{3} + 5.30 \times 10^{-4} T (1-0.76 x^{1/2} -$	
	-1.29 x)	
Енергетичний еквівалент	$E_p = 18.1 - 6.8 \times 10^{-3} T (1-x) + 2.69 x$	[103,113]
матричного елемента, еВ	r · · ·	
Спін-орбітальне роз-	$\Delta = 1.08 - 0.12 x$	[105,173]
щеплення, еВ		
Ефективна маса важких	$m_{hh}/m_0 = 0.60 + 2.1 \times 10^{-4} (1-x) T$	[174,195]
дірок		
Густина, кг/м ³	$\rho = 8.05 \times 10^{3} - 2.414 \times 10^{3} x$	[118,175]
Оптичний потенціал	$d_0 = 29.8 - 6.8 x$	[56, 177,
деформації, еВ		178]
Частота поперечних	$\omega_{TO} = 2.2 \times 10^{-13} + 1.432 \times 10^{-13} x$	[116,123]
оптичних фононів, рад/с		
Решіткова діелектрична	$\varepsilon_L = 4.7 - 2.31 x$	[116,176]
стала		
Високочастотна ді-	$\varepsilon_{\infty} = 10.4 - \overline{3.12} x$	[116,176]
електрична стала		
Константа акустичного	$E_{AC} = 2.0$	-
потенціалу деформації,		

Параметри кристалів Zn_xHg_{1-x}Te

еВ(зона провідності)		
Пружні константи, Н/м ²	$C_l = 6.422 \times 10^{10} + 1.98 \times 10^{10} x$	[118,124]
	$C_t = 1.594 \times 10^{10} + 0.89 \times 10^{10} x$	
П'єзоакустична кон-	$e_{14} = 0.2003 - 0.1719 x$	[122,124]
станта, Кл/м ²		
Матричний елемент	$V = 6 \times 10^{-23}$	-
розсіяння невпорядко-		
ваності, $eB \times cm^3$		

4.6. Температурні залежності рухливості електронів в твердому розчині Zn_xHg_{1-x}Te

Для кристалу Zn_xHg_{1-x}Te (x=0.15) порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в роботі [189]. Рівень Фермі визначався з рівняння n = 1/e R, R – експериментальне значення коефіцієнта Холла, визначеного в [189].

Теоретична крива $\mu(T)$ для Zn_xHg_{1-x}Te (x=0.15) представлена на рис. 4.41[185,187,188,209,211]. Суцільна лінія представляє криву, розраховану на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 4.7 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Видно, що теоретична крива достатньо добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4.21 точковими лініями представлені відповідні залежності.

З рис. 4.21 видно, що у всьому дослідженому інтервалі температур домінуючими механізмами розсіяння є розсіяння на центрах статичної дефор-

Таблиця 4.7

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

x	γпо	Ύц	γпе	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
0.15	0.70	1.0	0.55	70.0



Рис.4.21. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі Zn_xHg_{1-x}Te (x=0.15). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [189].

мації, акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля та полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння - розсіяння невпорядкованості та на іонізованій домішці, акустичному та неполярному оптичному фононі, оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля - дають знехтувано малий внесок.

В області низьких температур спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це може бути пояснене неповнотою СДмоделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

Як і для розглянутих вище твердих розчинів, для Zn_xHg_{1-x}Te порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей (наближення часу релаксації) розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження з експериментом (див. рис 4.21а).

4.7. Параметри твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se

Ширина забороненої зони твердого розчину $Zn_xHg_{1-x}Se$ досліджувалася для складів $0 \le x \le 0.15$ в роботі [195] і описується виразом:

$$E_g(x,T) = -0.244 + 6.7253 \ x - 24.939 \ x^2 - 101.82 \ x^3 + 883.9633 \ x^4 + (6-81.56 \ x + 511.691 \ x^2 - 116 \ x^3 - 7021 \ x^4)?10^{-4}T, \qquad (4.18)$$

а для складу x=1 – виразом : $E_g(T) = 2.825 - 4.84$?10⁻⁴T [196,197].

Згідно результатів роботи [149] величина енергетичного еквівалента матричного елемента взаємодії для HgSe лінійно залежить від температури, а для ZnSe складає величину 9.36 eB см [198]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [147] величина спін-орбітального розщеплення в HgSe складає 0.45 *eB*, а для ZnSe – 0.43 *eB* [199]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [146] ефективна маса важких дірок в HgSe складає величину 0.67 *m*₀, а для ZnSe - 0.57 *m*₀ [200]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Густина твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se описується емпіричним виразом [1,201]:

$$\rho = 8.245 \times 10^{3} - 2.979 \times 10^{3} x \,. \tag{4.19}$$

Решіткова діелектрична стала для ZnSe становить $\kappa_L = 2.0$ [202,203], а для HgSe - $\kappa_L = 15.5$ [149]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Високочастотна діелектрична стала для ZnSe становить $\kappa_{\infty} = 6.3$ [203], а для HgSe спостерігається лінійна залежність від складу та складна залежність від температури : при T > 100 K спостерігається лінійна залежність, а при низьких температурах – незалежність від температури [152,153]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [154] частота поперечних оптичних фононів в HgSe piвна 2.49×10¹³ pad/c, а для ZnSe – 3.88×10¹³ pad/c [204,205]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих даних. Константи акустичного потенціалу деформації для електронів зони провідності вибиралися за результатами робіт [149,180,182].

Пружні константи C_l та C_t розраховувалися за результатами роботи [157, 206].

Значення п'єзоакустичної константи *e*₁₄ для HgSe вибиралась по аналогії з HgTe - 0.2003 *Кл/м*² [122], а для ZnSe – 0.049 *Кл/м*² [124]. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Se припускалася лінійна інтерполяція цих залежностей.

Для величини матричного елемента розсіяння невпорядкованості вибиралося оціночне значення $V = 5 \times 10^{-23} eB \ cm^3$.

Значення параметрів, що використовувалися в розрахунках представлені в таблиці 4.8 .

Таблиця 4.8

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та температурна	Літера-
	залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Zn} = 10.858 \times 10^{-26}$	
	$M_{Hg} = 33.312 \times 10^{-26}$	
	$M_{Se} = 13.111 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.084 \times 10^{-10} - 4.164 \times 10^{-11} x$	[175]
Ширина забороненої зо-	E_g = -0.244+6.7253 x-24.939 x ² -101.82 x ³	[195]
ни, еВ	$+883.9633 x^{4}+(6-81.56 x+511.691 x^{2})$	
	$-116 x^{3} - 7021 x^{4})?10^{-4}T - 0 \le x \le 0.15$	
	$E_g = 2.825 - 4.84 ? 10^{-4}T - x = 1$	[196,197]
Матричний елемент	$P = 2?10^{-11} T(1-x) + 2.16? 10^{-8} x + 7.2? 10^{-8}$	[149,198]
взаємодії, еВ см		
Спін-орбітальне роз-	$\Delta = 0.45 - 0.02 x$	[147,199]
щеплення, еВ		
Ефективна маса важких	$m_{hh}/m_0 = 0.67 - 0.1 x$	[146,200]
дірок		
Густина, кг/м ³	$\rho = 8.245 \times 10^{3} - 2.979 \times 10^{3} x$	[1,201]
Оптичний потенціал	$d_0 = 29.8 - 17.8 x$	[56, 178]

Параметри кристалів Zn_xHg_{1-x}Se

деформації, еВ		
Частота поперечних	$\omega_{TO} = 2.49 \times 10^{-13} + 1.39 \times 10^{-13} x$	[154,205,
оптичних фононів, рад/с		205]
Решіткова діелектрична	$\varepsilon_L = 15.5 - 13.5 x$	[149,202,
стала		203]
Високочастотна ді-	$\varepsilon_{\infty HgSe} = 13.0$ - $T < 100$ K	[152,153,
електрична стала	$\varepsilon_{\infty HgSe} = 13.0 - 2 \times 10^{-2} (T - 100) - T \ge 100 K$	203]
	$\varepsilon_{\infty ZnSe} = 6.3$	
	$\varepsilon_{\infty} = (1-x) \varepsilon_{\infty HgSe} + x \varepsilon_{\infty ZnSe}$	
Константа акустичного	a = 7.2 - 12.6 x	[149,180,
потенціалу деформації,	b = -1.4 + 0.2 x	182]
еВ(зона провідності)	d = -5.4 + 0.5 x	
	C = -10.5	
Пружні константи, Н/м ²	$C_l = (0.16 x - 0.332) \times 10^8 T + 3.17 \times 10^{10} x +$	[157,206]
	$+8.061 \times 10^{10}$	
	$C_t = -(0.1 x + 0.24) \times 10^7 T + 1.458 \times 10^{10} x +$	
	$+1.751 \times 10^{10}$	
П'єзоакустична кон-	$e_{14} = 0.2003 - 0.1513 x$	[122,124]
станта, Кл/м ²		
Матричний елемент	$V = 5 \times 10^{-23}$	-
розсіяння невпорядко-		
ваності, eB×см ³		

4.8. Температурні залежності рухливості електронів в твердому розчині Zn_xHg_{1-x}Se

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в [147,195,207] для кристалів Zn_xHg_{1-x}Se з складом x = 0.02 (зразки з концентрацією електронів $2.7?10^{18}$ cm⁻³ та $6?10^{18}$ cm⁻³ відповідно); 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 (випадок виродженого електронного газу [195]). Для x = 0.06 рівень Фермі розраховувався з рівняння $n - p = N_{4.2}$, $N_{4.2}$ - концентрація іонізованих домішок при 4.2 K [207]. Для x = 1 рівень Фермі розраховувався з рівняння $n = n_e$, n_e експериментальне значення концентрації електронів, визначене в [175].



Рис.4.22. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі Zn_xHg_{1-x}Se (x=0.02, n=2.7?10¹⁸см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [195].



Рис.4.23. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі Zn_xHg_{1-x}Se (x=0.02, n=6?10¹⁸см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [195].





Рис.4.24. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі Zn_xHg_{1-x}Se (x=0.06). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [207].



Рис.4.25. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі Zn_xHg_{1-x}Se (x=0.15). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [195].



Рис.4.26. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі ZnSe (N_D=3.4×10¹⁵ см⁻³, N_A=1.3×10¹⁵ см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близько-діючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [147].



Рис.4.27. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі ZnSe (N_D=1.8×10¹⁶ см⁻³, N_A=5×10¹⁵ см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно; б: порівняння близько-діючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [147].



Рис.4.28. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі ZnSe (N_D=3.7×10¹⁶ см⁻³, N_A=5×10¹⁵ см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно; б: порівняння близько - діючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [147].



Рис.4.29. Температурна залежність рухливості електрона в кристалі ZnSe (N_D=7.4×10¹⁶ см⁻³, N_A=3.4×10¹⁶ см⁻³). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близько-діючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [147].

x	γпо	Ύц	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
0.02^{a}	0.54	0.30	0.30	1.0
0.02^{6}	0.52	0.30	0.30	1.0
0.06	0.70	0.30	0.30	2.0
0.15	0.53	0.30	0.30	1.0
$1.00^{\ e}$	0.68	1.0	0.50	65.0
1.00 ²	0.68	1.0	0.50	95.0
$1.00^{\ o}$	0.68	1.0	0.50	400.0
1.00^{e}	0.67	1.0	0.50	900.0

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

 a n=2.7?10¹⁸ cm⁻³. o n=6.0?10¹⁸ cm⁻³.

^o n=6.0?10¹⁸ cm⁻³. ^e N_D=3.4×10¹⁵ cm⁻³; N_A=1.3×10¹⁵ cm⁻³. ^z N_D=1.8×10¹⁶ cm⁻³; N_A=5×10¹⁵ cm⁻³. ^d N_D=3.7×10¹⁶ cm⁻³; N_A=5×10¹⁵ cm⁻³.

 e N_D=7.4×10¹⁶ cm⁻³; N_A=3.4×10¹⁶ cm⁻³.

Теоретичні криві $\mu(T)$ представлені на рис. 4.22-4.29[188,209-213]. Суцільні лінії представляють криві, розраховані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 4.9 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Видно, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4.22-4.29 точковими лініями представлені відповідні залежності. Видно, що при низьких температурах ($T < 70 \ K$) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації та розсіяння невпорядкованості (для x > 0). При високих температурах внесок розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння на полярних оптичних фононах стає домінуючим. Решта механізмів розсіяння – розсіяння на акустичному та неполярному оптичному фононах, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля, нейтральній та іонізованій доміщці – дають знехтувано малий внесок.

В кристалах з високою концентрацією центрів статичної деформації спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних

Таблиця 4.9

(рис. 4.27-4.29). Це може бути пояснене неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

Як і для розглянутих вище твердих розчинів, для Zn_xHg_{1-x}Se порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей (наближення часу релаксації) розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження з експериментом (див. рис 4.22-4.29а).

4.9. Параметри GaN

Нітрид галію (GaN) є одним з матеріалів, які знаходять широке застосування в приладах, що працюють при високих температурах і високих частотах та в умовах підвищеної радіації. Експериментальні дані із залежності рухливості носіїв від температури та рівня легування домішками представлені в роботах [215-227]. Теоретична інтерпретація цих даних проводилася методом ітерацій [228-230], варіаційним методом [231,232] та методом Монте-Карло [233]. Спільною особливістю всіх цих методів є використання для опису явищ переносу в цьому матеріалі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду, які мають всі вищевказані недоліки. Нижче розглядається застосування принципу близькодії для опису процесів розсіяння носіїв заряду на різних типах дефектів кристалічної гратки в GaN зі структурою вюртциту та сфалериту.

Всі вищерозглянуті близькодіючі моделі розсіяння описують явища переносу в напівпровідниках зі структурою цинкової обманки. Для того, щоб застосувати ці моделі до нітриду галію, який має структуру вюртциту, у формули для ймовірності переходу носія з стану k в стан k' вводяться наступні зміни: а) об'єм елементарної комірки структури цинкової обманки $V_{ZB} = a_0^3/4$ заміняється об'ємом елементарної комірки структури вюртциту $V_W = a_0^2 c_0 \sqrt{3}/2$ (a_0 ; c_0 – сталі гратки гексагональної структури); б) при інтегруванні по хвильовому вектору носія стала гратки структури цинкової обманки a_0 замінюється виразом ($a_0 + c_0$)/2. З врахуванням цього ймовірність переходу носія заряду з стану k в стан k' матиме вид [234-238]:

$$\begin{split} W_{\Pi O}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{a_0^{-6}}{12 c_0^2} \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^8 \frac{64 p^7 c_{PO}^{+0} e^4}{225 e_0^{-2} G} \frac{M_{Ga} + M_N}{M_{Ga} M_N} \left\{\frac{1}{\omega_{IO}} \left[N_{IO} \times \right. \right. \\ &\times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{LO}) + (N_{LO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{LO})\right] + (4-20) \\ &+ \frac{2}{\omega_{TO}} \left[N_{TO}\delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})\right] \right]; \\ W_{H\Pi O}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{1}{\left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^2} \frac{\pi^3 E_{NPO}^2}{288 G} \frac{M_{Ga} + M_N}{M_{Ga} M_N} \times \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times (\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})\right] \right\}; \\ W_{H\Pi O}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{a_0^{-10}}{\left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{10}} \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO}) \right]; \\ W_{\Pi O\Pi}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{a_0^{-10}}{\left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{10}} \left(\frac{32}{75}\right)^2 \frac{\pi^9 e^2 e_{12}^2 \gamma_{10}^{+0}}{\varepsilon_0^2 G} \frac{M_{Ga} + M_N}{M_{Ga} M_N} \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})\right]\right]; \\ W_{\Pi O\Pi}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{a_0^{-10}}{\left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{10}} \left(\frac{32}{75}\right)^2 \frac{\pi^9 e^2 e_{12}^2 \gamma_{10}^{+0}}{\varepsilon_0^2 G} \frac{M_{Ga} + M_N}{M_{Ga} M_N} \left\{\frac{1}{\omega_{LO}} \left[N_{LO} \times \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \hbar\omega_{TO}) + (N_{TO} + 1)\delta(\varepsilon' - \varepsilon + \hbar\omega_{TO})\right]\right\}; \\ W_{ILLK}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \frac{a_0^{-10}}{\left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{10}} \frac{128 \pi^7 e^2 e_{12}^2 \gamma_{10}^{+0} K_BT}{225 \varepsilon_0^2 \hbar G \left[M_{Ga} + M_N\right]} \left[\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}}\right]^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{LLK}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left[4 \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^{-3} \frac{a_0^2 c_0 \sqrt{3}}{2}\right]^2 \frac{\pi^3 k_B T E_{AC}^2}{144 \hbar G \left[M_{Ga} + M_N\right]} \times \left(\frac{1}{c_{LO}} + \frac{2}{c_{TO}}\right)^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{CR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{2^{53} q p^3 C^2 e^2 e_{12}^2 N_{SS}}{V \varepsilon_0^2 \hbar} \frac{1}{q^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{CR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{2^{53} q p^3 C^2 e^2 e_{12}^2 N_{SS}}{2 \varepsilon_0^2 \hbar M} \frac{1}{q^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{TI}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{\pi e^4 Z_1^2 N_M \gamma_1^4}{2 \varepsilon_0^2 \hbar M} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{CR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{\pi e^4 Z_1^2 N_M \gamma_1^4}{2 \varepsilon_0^2 \hbar M} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{CR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}{2}\right)^6 \frac{\pi e^4 Z_1^2 N_M \gamma_1^4}{2 \varepsilon_0^2 \hbar M} \delta(\varepsilon' - \varepsilon); \\ W_{CR}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \left(\frac{a_0 + c_0}$$

$$W_{NI}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \frac{(a_0 + c_0)\gamma_{II}}{4} \frac{20 \pi^2 N_{NI} \hbar^3}{V m^{*2} k'} \delta(\varepsilon' - \varepsilon), \qquad (4-27)$$

де підгоночні параметри визначаються з нерівностей:

$$0 < \gamma_{PO}, \gamma_{PZ} \le \sqrt{1 + a_0^2 / c_0^2} / 2 = 1.187; \quad 0 \le \gamma_{II} \le (1 + c_0 / a_0) / 2 = 1.31.$$
(4-28)

У виразах (4-20) – (4.27) перший множник у правій частині представляє собою геометричний фактор, що враховує відмінність структури вюртциту від структури сфалериту. Слід відзначити, що, як і у випадку структури сфалериту, сильна степенева залежність підгоночних параметрів γ_{PO} , γ_{PZ} , γ_{II} різко обмежує можливості вибору їх чисельних значень.

Зона провідності нітриду галію припускалась непараболічною, сферичною і згідно моделі Кейна описується виразом:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_n} = \varepsilon \left(l + \alpha \varepsilon \right), \tag{4-29}$$

де коефіцієнт непараболічності α задається виразом $\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m_n}{m_0} \right)^2$, $m_0 - \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m_n}{m_0} \right)^2$

маса вільного електрона.

Наступний параметр, значення якого відсутнє в літературі, це оптичний потенціал деформації E_{NPO} (d_0 – для електронів зони провідності). Для його оцінки використаємо той факт, що для GaP, GaAs, GaSb (структура сфалериту) значення цього параметру рівні 28.9, 36,4 та 32.3 еВ відповідно [182]. Тому для GaN значення E_{NPO} вибиралося рівним 29 еВ. Решта параметрів матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.10.

Таблиця 4.10

271

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та	Літера-
	температурна залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Ga} = 11.611 \times 10^{-26}$	
	$M_N = 2.3253 \times 10^{-26}$	

Параметри кристалів GaN зі структурою вюртциту

	10	
Постійна решітки, а ₀ ,м	$a_0 = 3.189 \times 10^{-10}$	[245]
c_0 ,M	$c_0 = 5.185 \times 10^{-10}$	
Ширина забороненої зони, еВ	$E_g = 3.503 - 5.08?10^{-4} T^2/(T+996)$	[245,246]
Ефективна маса електрона	$m_n/m_0 = 0.22$	[228,232]
Густина, кг/м ³	$\rho = 6.1?10^3$	[247]
Швидкість звуку, м/с	$c = 6.59?10^{3}$	[247]
Оптичний потенціал	$d_0 = 29$	Оцінка
деформації(зона провідності), еВ		
Акустичний потенціал	$E_{AC} = 9.2$	[228,232]
деформації		
(зона провідності), (eB)		
Пружні константи, (?10 ¹¹) Н/м ²		
C_{11}	3.9	[222]
C_{13}	1.06	[222]
C_{33}	3.98	[222]
C_{44}	1.05	[222]
Енергія оптичного фонона, меВ	91.2	[232,233]
П'єзоакустична константа,	$e_{14} = 0.5$	[228,233]
Кл/м ²		

4.10. Температурні залежності рухливості електронів в GaN

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів $\mu_n(T)$ проводилося з експериментальними даними, представленими в роботах [217,219,226,227,331]. Рівень легування в досліджених зразках змінювався в межах 1.1?10¹⁶ ? 1.9?10¹⁸ см⁻³. Рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності для широкозонного напівпровідника п-типу (власна провідність нехтувалася) з донорами та компенсованими акцепторами:

$$n + N_A = \frac{N_{DI}}{1 + 2 \exp\left(\frac{F - E_{DI}}{k_B T}\right)} + \frac{N_{D2}}{1 + 2 \exp\left(\frac{F - E_{D2}}{k_B T}\right)},$$
(4-30)

де N_{D1} , N_{D2} , N_A , E_{D1} , E_{D2} – концентрації донорів та акцепторів і енергії іонізації донорів відповідно, визначених в [219,226,227].

Для зразків з невідомою концентрацією домішок [217,331] рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності $n = 1/e R = N_D^{+}$, де R – експериментальне значення коефіцієнта Холла. Теоретичні криві $\mu_n(T)$ для n-GaN представлені на рис.4-30 [234-236,331]. В таблиці 4.11 представлені отримані значення параметрів розсіяння електронів γ для різних механізмів розсіяння. Видно, що теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур крім зразка з максимальним рівнем домішки (крива G).

Таблиця 4.11

Зразок	γпо	γц	γπε	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
A ^a	0.93	1.0	0.44	1.0
Вб	0.90	1.0	0.44	8.0
Св	0.90	1.0	0.44	10.0
D ^r	0.93	1.0	0.44	22.0
E ^r	0.90	1.0	0.44	32.0
F ^r	0.90	1.0	0.44	40.0
G ^B	0.90	1.0	0.44	160.0
\mathbf{H}^{μ}	-	-	-	350.0

Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в GaN

^{*a*} [227].

° [217].

^e [226].

^{*г*} [219].

^д [331] (сфалерит).

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4-31 –4.37 штриховими лініями представлені відповідні залежності. Для зразків A і E з низькою (~10¹⁶ см⁻³) та середньою (~10¹⁷ см⁻³) концентрацією домішок при низьких температурах (T < 70 K) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації (крива 7). Дещо меншим, але не знехтувано малим є розсіяння на акустичних фононах (крива 1), вплив якого по мірі підвищення температури зростає. При високих температурах домінуючим механізмом розсіяння стає розсіяння на полярних оптичних фононах (крива 5), однак, розсіяння на акустичних фононах є теж суттєвим. В області низьких спостерігається різний теоретичної температур нахил кривої та експериментальних даних. Це може бути пояснене неповнотою СД- моделі

розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

В зразку G з високою (~ 10^{18} 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 домішках (крива 2), а при високих температурах необхідно врахо-



Рис. 4-30. Температурна залежність рухливості електрона в кристалах GaN з різною концентрацією домішок. Експеримент – [217,219,226,227].



Рис.4-31. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D=8.4×10¹⁵ см⁻³, N_A=1.7×10¹⁵ см⁻³). *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.



Рис.4-32. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (сфалерит). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей.



Рис.4-33. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D=4.2×10¹⁷ см⁻³, N_A=1.1×10¹⁷ см⁻³). *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.



Рис.4-34. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D~3×10¹⁷ см⁻³, N_A=1×10¹⁶ см⁻³). *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.



Рис.4-35. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D=1.49×10¹⁷ см⁻³, N_A=3.2×10¹⁷ см⁻³). *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.



Рис.4-36. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D=8×10¹⁷ см⁻³, N_A=1×10¹⁶ см⁻³). *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.



Рис.4-37. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі GaN (N_D=1.35×10¹⁸ см⁻³, N_A=5.8×10¹⁷ см⁻³). *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.

вувати розсіяння на акустичних та полярних оптичних фононах.

Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на неполярних оптичних фононах, нейтральних домішках, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля – дають знехтувано малий внесок.

На основі отриманих параметрів розсіяння були розраховані температурні залежності Холл-фактора електронів (див. рис.4-38). Видно, що мінімуми цих залежностей спостерігаються при температурі, де відбувається перехід від однотипного розсіяння (СД- розсіяння при низькій температурі) до комбінованого розсіяння (високі температури). Температура переходу залежить від концентрації домішок: вищий рівень легування визначає вищу температуру переходу. Для високої концентрації домішок Холл-фактор змінюється в межах 1 ? 1.1, тоді як для низького рівня легування він може досягати значення 1.5.



Рис. 4-38. Температурна залежність Холл-фактора електронів в кристалах GaN. Позначення кривих відповідає кристалам на рис.4-50.

4.11. Параметри ZnO

Оксид цинку є напівпровідниковим матеріалом, що знаходить широке застосування в приладних структурах: 1) ZnO є радіаційно стійким матеріалом, що робить його підходящим кандидатом для застосування в космічній техніці [249-251]; 2) ZnO може використовуватися як підкладка для епітаксійного вирощування високоякісних плівок GaN [252-253]; 3) ZnO є перспективним кандидатом для застосування в спінтроніці [254-256]. Експериментальні дані із залежності рухливості носіїв від температури та рівня легування домішками представлені в роботах [20, 257-264]. Теоретична інтерпретація цих даних проводилася в наближенні часу релаксації [259], варіаційним методом [265] та методом Монте-Карло [266]. Спільною особливістю всіх цих методів є використання для опису явищ переносу в цьому матеріалі далекодіючих моделей розсіяння носіїв заряду, які мають всі вищевказані недоліки. Слід відзначити, що в роботі [248] при розгляді розсіяння носіїв заряду в напівпровідниках зі структурою вюртциту не приймалося до уваги розсіяння на різного типу оптичних коливаннях кристалічної гратки. Нижче розглядається застосування принципу близькодії для опису процесів розсіяння носіїв заряду на різних типах дефектів кристалічної гратки в ZnO із врахуванням складної структури оптичних коливань в напівпровіднику зі структурою вюртциту. Параметри матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.12.

Таблиця 4.12

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та	Літера-
	температурна залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Zn} = 10.858 \times 10^{-26}$	
	$M_O = 2.657 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, <i>a</i> ₀ ,м	$a_0 = 3.249 \times 10^{-10}$	[267]
c_0 ,M	$c_0 = 5.204 \times 10^{-10}$	
Ширина забороненої зони, еВ	$E_g = 3.446 - 5.05?10^{-4}T^2/(900-T)$	[268]
Ефективна маса електрона	$m_n/m_0 = 0.24$	[269]
Густина, кг/м ³	$\rho = 5.675?10^3$	[267]
Швидкість звуку, м/с		[270]

Параметри кристалів ZnO зі структурою вюртциту

v_{\perp}	2.764?10 ⁻³	
$v_{//}$	6.087?10 ⁻³	
Оптичний потенціал	$d_0 = 8$	Оцінка
деформації, еВ		
Акустичний потенціал	$E_{AC} = 3.8$	[20]
деформації		
Пружні константи, (?10 ¹¹) Н/м ²		[270]
C_{II}	2.1	
C_{12}	1.21	
C_{13}	1.05	
C_{33}	2.11	
	0.423	[271]
частота оптичних коливань,		[2/1]
рад/с. коливання вздовж осі со		
$A_{i}(I, \Omega)$ we	1.08210 14	
$A_{\tau}(\mathbf{TO}) = \omega_{\tau}$		
$A_{I}(10), \omega_{TO}$	7.12?10	
$B_{I}^{(1)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	4.92?10	
$B_I^{(2)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	$1.04?10^{-14}$	
коливання перпендикулярно осі		
C_0		
E_I (LO), ω_{LO}	1.11?10 ⁻¹⁴	
$E_1(\mathrm{TO}), \omega_{TO}$	7.72?10 13	
$E_2^{(I)}$ (TO), ω_{TO}	1.86?10 ⁻¹³	
$E_2^{(2)}$ (TO), ω_{TO}	8.25?10 ⁻¹³	
П'єзоакустичні константи,		[272]
Кл/м ²		
<i>e</i> ₁₃	-0.51	
e ₃₃	1.22	
<i>e</i> ₁₅	-0.45	

4.12. Температурні залежності рухливості електронів в ZnO

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в роботах [20, 257-259]. Рівень легування у зразках, що досліджувалися, складав ~ 10^{17} см⁻³. Всі ці зразки демонстрували високе значення рухливості електронів (~ 2000 см² / (В с)), відповідно, можна було припустити, що їх

дефектна структура є подібною. Тому для всіх зразків рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності для широкозонного напівпровідника n- типу (власна провідність нехтувалася) з донорами та компенсованими акцепторами:



Рис. 4-39. Температурна залежність концентрації електронів в кристалах ZnO.

$$n + N_A = \frac{N_{D1}}{1 + 2\exp\left(\frac{F - E_{D1}}{k_B T}\right)} + \frac{N_{D2}}{1 + 2\exp\left(\frac{F - E_{D2}}{k_B T}\right)},$$
(4-31)

де N_{D1} , N_{D2} , N_A , E_{D1} , E_{D2} – концентрація донорів, акцепторів та енергії іонізації донорів.

Величини $E_{D1} = 31 \, meB$ та $E_{D2} = 61 \, meB$ були вибрані за результатами роботи [259]. Для зразка з роботи [259] (зразок А) були вибрані наступні значення концентрації домішок: $N_{D1} = 9.0 \times 10^{15} \, cm^{-3}$, $N_{D2} = 1.0 \times 10^{17} \, cm^{-3}$, $N_A = 2.0 \times 10^{15} \, cm^{-3}$. Для зразка з робіт [20, 257, 258] (зразок В) були вибрані наступні значення концентрації домішок: $N_{D1} = 3.0 \times 10^{15} \, cm^{-3}$, $N_{D2} = 9.9 \times 10^{16} \, cm^{-3}$, $N_A = 2.3 \times 10^{15} \, cm^{-3}$. Розраховані на основі цих параметрів дефектної структури температурні залежності концентрації електронів демонструють добре узгодження з експериментальними даними (див. рис. 4.39).

Теоретичні температурні залежності рухливості електронів представлені на рис. 4-40 а,б [273-277]. Для зразка В теоретичні криві розраховувалися для двох





Рис. 4-40. Температурна залежність рухливості електронів в кристалах ZnO. *a* – зразок A; *б* – зразок B.

випадків: електричний струм перпендикулярний до осі " c_0 " та паралельний до осі " c_0 ". Отримані значення параметрів розсіяння електронів для різних механізмів представлені в таблиці 4.13. Видно, що теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментальними даними у всьому дослідженому ін-Таблиця 4.13

Зразок γ_{SS} Nss Концентрація дефектів γро γ_{PZ} γп $?10^{-14}$ (cm⁻³) (CM^{-3}) $N_{D1}=9?10^{15}, N_{D2}=1?10$ 0.64 0.42 1.0 A 1.0 $N_{A}=2?10^{15}, N_{D2}=9.9?10^{16}, N_{A}=2.3?10^{15}, N_{D2}=9.9?10^{16}, N_{A}=2.3?10^{15}$ 0.615 0.25 0.42 1.0 В



Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в ZnO



Рис. 4-41. 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,в,г,д* – зразок В; *в,д* – порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей.

тервалі температур. Необхідно відзначити, що теоретичні криві для зразка В демонструють гірше узгодження з експериментальними даними, так як розрахункові залежності $\mu_{//}(T)$ та $\mu_{\perp}(T)$ є взаємопов'язані: зміна підгоночних параметрів призводить до одночасного зсуву цих кривих вверх або вниз. Для зразка A експериментальна залежність $\mu_{//}(T)$ невідома, тому в цьому випадку існує краща можливість узгодити теорію та експеримент.

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4-41 а-в штриховими лініями представлені відповідні залежності. Видно,що основним механізмом розсіяння за низьких температур (T < 150 K) є розсіяння на центрах статичної деформації (крива 7). За високих температур внесок розсіяння на полярних оптичних фононах (крива 5) стає домінуючим, однак, розсіяння на оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля є також суттєвий. Особливо сильний вплив цей механізм розсіяння демонструє у випадку, коли електричний струм напрямлений паралельно до осі " c_0 " (див. рис. 4-41 в). Видно, що в інтервалі T > 150 K цей механізм розсіяння є одного порядку величини, що й ПО-розсіяння. За низьких температур спостерігається різний нахил експериментальних та теоретичних кривих. Це може бути пояснене неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.



Рис. 4-42. Температурна залежність Холл-фактору електронів в кристалах ZnO. *a* – зразок A; *б* – зразок B.

На основі отриманих параметрів розсіяння була розрахована температурна залежність Холл-фактору електронів (див. рис. 4-42). Видно, що мінімуми цих залежностей спостерігаються при температурі, де відбувається перехід від однотипного розсіяння (СД- розсіяння при низькій температурі) до комбінованого розсіяння (високі температури). Порівняння двох типів моделей розсіяння показує, що в оксиді цинку близькодіючі моделі дають краще якісне узгодження теорії з експериментальними даними (див. рис. 4-41 *в*,*д*).

4.13. Параметри CdS

Сульфід кадмію знаходить широке застосування при виготовленні тонкоплівкових перетворювачів сонячної енергії [281,282]. Експериментальні дані з дослідження температурної залежності рухливості електронів в CdS представлені в роботі [283,284]. Аналіз цих залежностей, як правило, проводиться на основі далекодіючих моделей розсіяння в наближенні часу релаксації, які мають всі вищевказані недоліки. Окрім того, при розгляді розсіяння носіїв заряду в сульфіді кадмію зі структурою вюртциту не приймалося до уваги розсіяння на різного типу оптичних коливаннях кристалічної гратки. Нижче розглядається застосування принципу близькодії для опису процесів розсіяння носіїв заряду на різних типах дефектів кристалічної гратки в CdS із врахуванням складної структури оптичних коливань в напівпровіднику зі структурою вюртциту. Параметри матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.14.

Таблиця 4.14

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та	Літера-
	температурна залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Cd} = 18.666 \times 10^{-26}$	
	$M_S = 5.325 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, а ₀ ,м	$a_0 = 4.1365 \times 10^{-10}$	[285]
c_0 ,M	$c_0 = 6.716 \times 10^{-10}$	
Ширина забороненої зони, еВ	$E_g = 2.579 - 4.7?10^{-4} T^2/(T+230)$	[286]
Густина, кг/м ³	$\rho = 4.82?10^{-3}$	[287,288]
Швидкість звуку, м/с		[289]
v_{\perp}	1.76?10 ⁻³	
$v_{//}$	4.25?10 ³	
Оптичний потенціал	$d_0 = 6.9$	[182]
деформації, еВ		
Акустичний потенціал	$E_{AC} = 3.3$	[20]
деформації		
Енергетичний еквівалент	$E_P=21$	[290]
матричного елементу, еВ		
Спін-орбітальне розщеплення,	⊿=0.062	[291]
eB		
Частота оптичних коливань,		[292]

Параметри кристалів CdS зі структурою вюртциту

рад/с:		
коливання вздовж осі <i>с</i> ₀		
$A_I(LO), \omega_{LO}$	5.71?10 ⁻¹³	
$A_I(\mathrm{TO}), \omega_{TO}$	<i>4.37?10</i> ^{<i>13</i>}	
$B_I^{(I)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	2.46?10 ¹³	
$B_I^{(2)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	5.51?10 ⁻¹³	
коливання перпендикулярно осі		
c_0		
E_I (LO), ω_{LO}	5.77? 10 ^{-13j}	
E_I (TO), ω_{TO}	4.56?10 ⁻¹³	
$E_2^{(I)}$ (TO), ω_{TO}	7.33?10 ¹²	
$E_2^{(2)}$ (TO), ω_{TO}	4.77?10 ¹³	
П'єзоакустичні константи,		[293]
Кл/м ²		
<i>e</i> ₁₃	- 0.262	
e ₃₃	0.385	
<i>e</i> ₁₅	- 0.183	

4.14. Температурні залежності рухливості електронів в CdS

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, представленими в роботах [283, 284] для п'яти зразків сульфіду кадмію: зразки 1, 2, ЕР-1 роботи [283,] та зразки DM83039-03-Y, DM82-I-54-26 роботи [284]. Рівень Фермі 3 рівняння електронейтральності визначався для широкозонного напівпровідника n-типу (власна провідність нехтувалася) з донорами та компенсованими акцепторами:

$$n + N_A = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{F - E_D}{k_B T}\right)},\tag{4-32}$$

де N_D , N_A , E_D – концентрація донорів, акцепторів та енергія іонізації донорів відповідно, значення яких вибиралося згідно результатів робіт [283, 284].

Теоретичні температурні залежності рухливості електронів для CdS представлені на рис. 4.436-4.476. Суцільні лінії представляють криві, розрахо-



Рис.4-43. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі CdS (N_D+N_A=1.1×10¹⁹ см⁻³). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей.



Рис.4-44. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі CdS (N_D+N_A=8.7×10¹⁷ см⁻³). *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.


Рис.4-45. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі CdS (N_D+N_A=2.77×10¹⁷ см⁻³). *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.



Рис.4-46. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі CdS (N_D+N_A=3.39×10¹⁶ см⁻³). *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.



Рис.4-47. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі CdS (N_D+N_A=5.5×10¹⁵ см⁻³). *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 4.15

Зразок	γпо	Ύιд	γпе	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
1^{a}	0.59	1.0	0.50	132.0
کر DM 83039-03-Y ^б	0.62	1.0	0.50	1.85
DM 82 I 54-26 ⁶	0.64	1.0	0.46	1.05
	0.72	1.0	0.50	0.23

Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в CdS

^{*a*} [283].

^б[284].

вані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана [294-297]. В таблиці 4.15 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Штриховими лініями представлені криві, розраховані на основі далекодіючих моделей розсіяння в наближенні часу релаксації. Відзначимо, що при розрахунках цих кривих використовувалися однакові механізми розсіяння носіїв заряду. Видно, що у всьому розглянутому інтервалі температур 10 – 400 К близькодіючі моделі розсіяння дають достатньо добре узгодження теорії та експерименту, тоді як наближення часу релаксації дає як якісне так і кількісне відхилення теорії від експерименту в 2 ? 5 разів. Це свідчить про те, що близькодіючі моделі більш адекватно описують процеси розсіяння електронів в сульфіді кадмію у порівнянні з наближенням часу релаксації.

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 4.43а-4.47а штриховими лініями представлені відповідні залежності. Видно, що за низьких температур (T<150K) основним механізмом розсіяння є розсіяння електронів на потенціалі статичної деформації (крива 7). Однак, для зразка з максимально високою концентрацією дефектів (зразок 1) ІД – розсіяння теж відіграє помітну роль в цьому температурному діапазоні. За більш високих температур (T>150K) домінуючим стає розсіяння на полярних оптичних (крива 5) та п'єзооптичних (крива 6) та акустичних (крива 3) фононах. Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на неполярних оптичних фононах, розсіяння на п'єзоакустичних фононах , нейтральних та іонізованих домішках – дають знехтувано малий внесок.



Рис. 4-48. Температурна залежність Холл-фактора електронів в кристалах CdS.

На основі отриманих параметрів розсіяння була розрахована температурна

залежність Холл- фактору електронів, яка представлена на рис. 4-48. Видно, що мінімуми на цих кривих відповідають переходу від одного механізму розсіяння за низьких температур (СД – розсіяння) до змішаного механізму розсіяння за високих температур (ПО, ПОП та АК – розсіяння). Цей перехід спостерігається при тим вищій температурі, чим більша концентрація центрів статичної деформації. Порівняння двох типів моделей розсіяння показує, що в сульфіді кадмію близькодіючі моделі дають краще якісне узгодження теорії з експериментальними даними в порівнянні з далекодіючими моделями.

4.15. Параметри InN

фокусі Напівпровідникова сполука InN знаходиться обширних У досліджень електричних [298,299] та оптичних властивостей [300-302], що пов'язано з потенціальним застосуванням цього матеріалу в лазерних діодах та приладах, що працюють при високих температурах та потужностях. Аналіз експериментальних температурних залежностей рухливості електронів проводився на основі далекодіючих моделей розсіяння методом Монте-Карло [303] та в наближенні часу релаксації [298,304,305], які мають всі вищевказані недоліки. Окрім того, при розгляді розсіяння носіїв заряду в нітриді індію зі структурою вюртциту не приймалося до уваги розсіяння на різного типу оптичних коливаннях кристалічної гратки. Нижче розглядається застосування принципу близькодії для опису процесів розсіяння носіїв заряду на різних типах дефектів кристалічної гратки в InN із врахуванням складної структури оптичних коливань в напівпровіднику зі структурою вюртциту. Параметри матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.16.

Таблиця 4.16

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та	Літера-
	температурна залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{In} = 19.066 \times 10^{-26}$	
	$M_N = 2.326 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, а ₀ ,м	$a_0 = 3.545 \times 10^{-10}$	[306]

Параметри кристалу InN зі структурою вюртциту

С ₀ ,М	$c_0 = 5.703 \times 10^{-10}$	
Ширина забороненої зони, еВ	$E_g = 0.69 - 4.1?10^{-4} T^2 / (T + 454)$	[307]
Ефективна маса електрона,	0.115	[306]
m_n/m_0		
Густина, кг/м ³	$\rho = 6.81?10^{-3}$	[308]
Швидкість звуку, м/с		[308]
v_{\perp}	1.21?10	
$v_{//}$	5.28?10 3	
Оптичний потенціал	$d_0 = 5.0$	Оцінка
деформації, еВ		
Акустичний потенціал	$E_{AC} = 2.1$	Оцінка
деформації		
Частота оптичних коливань,		[309]
рад/с:		
коливання вздовж осі c_0	1 1 1 2 1 0 14	
$A_I(LO), \omega_{LO}$	1.11.10	
A_I (TO), ω_{TO}	8.29?10 ⁻¹³	
$B_I^{(1)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	<i>3.77?10</i> ^{<i>13</i>}	
$B_I^{(2)}(\text{LO}), \omega_{LO}$	$1.02?10^{-14}$	
коливання перпендикулярно осі		
C_0		
E_I (LO), ω_{LO}	1.12?10 ⁻¹⁴	
$E_1(\mathrm{TO}), \omega_{TO}$	8.97?10 ¹³	
$E_2^{(1)}$ (TO), ω_{TO}	1.64?10 ⁻¹³	
$E_2^{(2)}$ (TO), ω_{TO}	<i>9.19?10</i> ^{<i>13</i>}	
П'єзоакустичні константи,		[310]
Кл/м ²		
<i>e</i> ₁₃	- 0.57	
e ₃₃	0.97	
<i>e</i> ₁₅	- 0.45	

4.16. Температурні залежності рухливості електронів в InN

Порівняння теоретичної температурної залежності рухливості електронів проводилося з експериментальними даними, предиставленими в роботі [305]. Концентрація домішок у дослідженому зразку нітриду індію складала величину $\sim 1.1 \times 10^{18}$ см⁻³. Положення рівня Фермі в кристалі InN визначалося шляхом чисельного розв'язку рівняння електронейтральності:

$$n + N_A = N_D \left[2 \exp\left(\frac{F - E_D}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} + N_{d0}, \qquad (4-33)$$

де концентрація донорів $N_D = 9 \times 10^{17}$ см⁻³ з енергією активації $E_D = 0.09$ еВ та концентрація акцепторів $N_A = 3.0 \times 10^{17}$ см⁻³ вибиралася згідно результатів роботи [305]. Величина $N_{d0} = 8.3 \times 10^{17}$ см⁻³ представляє собою концентрацію додаткових донорів, які утворюють домішкову зону, що утворює спільну смугу енергій з зоною провідності, і яка забезпечує високу провідність за гелієвих температур. Можлива природа цих додаткових донорів в плівках нітриду індію пов'язана з надлишком азоту, який утворює антиструктурний дефект [311]. З представленої на рис. 4-49 залежності концентрації електронів від температури видно, що теоретична крива добре узгоджується з експериментальними даними у температурному проміжку 4.2 ? 560 К. Це означає, що рівняння (4-33) адекватно описує дефектну структуру плівки нітриду індію.



Рис. 4-49. Температурна залежність концентрації електронів в кристалі InN.



Рис.4-50. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електрона в кристалі InN. *a*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8 – АК-, IД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей.

Таблиця 4-17

Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в InN

(n-p) ×10 ⁻¹⁷ см ⁻³	ү по	γpz	γц	γ _{СД} <i>N</i> _{СД} ?10 ⁻¹⁴ см ⁻³
5.3 - 7.4	0.38	0.27	0.22	2.35

На рис. 4-506 суцільна лінія представляє криву, розраховану на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана [312-314]. В таблиці 4.17 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів розсіяння. Штриховими лініями представлені криві, розраховані на основі далекодіючих моделей розсіяння в наближенні часу релаксації. Видно, що в InN близькодіючі моделі розсіяння дають відхилення від експерименту не більше, ніж на 15%, тоді як наближення часу релаксації дає відхилення від експерименту в 2 – 2.5 рази. Це означає, що опис явищ переносу на основі принципу близькодії більш адекватно відображає процеси розсіяння електронів в кристалі нітриді індію зі структурою вюртциту.

Для оцінки внеску розсіяння на різних дефектах у загальну рухливість електрона в кристалі InN на рис. 4-50а штриховими лініями зображені відповідні залежності. Видно, що у дослідженому проміжку температур домінуючу роль



Рис. 4-51. Залежність Холл-фактору електронів від температури в нітриді індію. відіграє розсіяння на центрах статичної деформації. При температурах менших 200 К суттєву роль відіграє розсіяння на нейтральних домішках. За високих температур (T > 200 K) починає відігравати помітну роль АК механізм розсіяння і, дещо менше, розсіяння на полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння – розсіяння на п'єзооптичних та п'єзоакустичних фононах, неполярних оптичних фононах та іонізованих домішках – дають несуттєвий внесок в загальну рухливість електрона і можуть бути знехтувані.

Визначення параметрів розсіяння електронів в InN дає можливість розрахувати температурну залежність Холл-фактора електронів (див. рис.9). При температурах менших 200 К величина $r_H(T) \approx 1$, що відповідає СД механізму розсіяння. За високих температур (T > 200 K) розсіяння визначається декількома механізмами – Холл-фактор збільшується і досягає значення 1.14. Така поведінка Холл-фактора також обумовлена тим, що за низьких температур електронний газ є виродженим. По мірі зростання температури електрони переходять у стан, проміжний між виродженим та невиродженим, а при T >400 K електронний газ стає невиродженим.

4.17. Параметри InSb

Антимонід індію знаходить широке застосування в оптоелектронних приладах. Зокрема, InSb є базовим матеріалом для виробництва інфрачервоних детекторів [315]. В роботах [316-318] досліджувалися явища переносу в антимоніді індію, де аналіз експериментальних даних проводився на основі далекодіючих моделей розсіяння в наближенні часу релаксації. Нижче розглядається застосування принципу близькодії для опису процесів розсіяння носіїв заряду на різних типах дефектів кристалічної гратки в InSB. Параметри матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.18.

Таблиця 4.18

Параметр матеріалу	Значення, температурна залежність	Літера-
		тура
Маса атома, кг	$M_{In} = 19.066 \times 10^{-26}$	
	$M_{Sb} = 20.219 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.47937 \times 10^{-10}$	
Ширина забороненої зо-	$E_g = 0.235 - 2.7?10^{-4} T^2 / (T + 106)$	[316]
ни, еВ		
Енергетичний еквівалент	$E_p = 23.2$	[317]
матричного елемента, еВ		
Спін-орбітальне роз-	$\Delta = 0.803$	[318]
щеплення, еВ		
Густина, кг/м ³	$\rho = 5.7747 \times 10^{-3}$	[319]
Оптичний потенціал	$d_0 = 26.8$	[182]
деформації, еВ		
Акустичний потенціал	$E_{AK} = 9.5$	[320]
деформації, еВ		
Швидкість звуку, м/с		[321]
v_{\perp}	3.77?10	
$v_{//}$	2.29?10 ⁻³	
Енергія оптичного фоно-		[322]
на,		
$\hbar\omega_{LO}$ (meB)	23.6	
$\hbar\omega_{TO}$ (меВ)	22.3	
П'єзоакустична кон-	$e_{14} = 0.071$	[323]
станта, Кл/м ²		

Параметри кристалів InSb

4.18. Температурні залежності рухливості електронів в InSb

Положення рівня Фермі в кристалах InSb визначалося шляхом чисельного розв'язку рівняння електронейтральності:

$$n - p = N_D - N_A, \tag{4-34}$$

де N_D, N_A – концентрація донорів та акцепторів відповідно.

Теоретичні криві, які відображали залежність рухливості електронів від температури в антимоніді індію, порівнювалися з даними експерименту робіт [324,325]. На рис. 4-52 суцільними лініями представлені криві, отримані з аналітичного розв'язку рівняння Больцмана [312,326-328]. Параметри розсіяння електронів для різних механізмів розсіяння, які були отримані в результаті процедури підгонки, представлені в таблиці 4-19. Штрихові лінії представляють собою залежності, отримані на основі далекодіючих моделей розсіяння (наближення часу релаксації). Видно, що в області високих температур обидва підходи (близькодіючий та далекодіючий) однаково добре співпадають з експериментом. Однак, за низьких температур близькодіючі моделі розсіяння демонструють набагато краще узгодження з експериментом.



Рис. 4-52. Залежність $\mu(T)$ для електронів в кристалах InSb з різною концентрацією дефектів. 1 – близькодіючі моделі розсіяння; 2 – далекодіючі моделі розсіяння (наближення часу релаксації).

Таблиця 4-19

$(n-p) \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3}$	γпо	γ pz	γц	γ _{СД} <i>N</i> _{СД} ?10 ⁻¹⁴ см ⁻³
1.2	0.65	0.40	1.0	2.0
8.3	0.65	0.40	1.0	6.3

Параметр у для різних механізмів розсіяння електронів в InSb



Рис. 4-53. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електронів в кристалі InSb. Суцільна крива – загальний механізм розсіяння, 1,2,3,4,5,6,7 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно.



Рис. 4-54. Залежність Холл-фактору електронів від температури в кристалі InSb.

Щоб оцінити внесок розсіяння на різних дефектах у загальну рухливість електрона на рис. 4-53 представлені штриховими лініями відповідні залежності (для зразка з $n-p=8.3 \times 10^{-14}$ см⁻³). Видно, що при температурах менших 100 К основний внесок у рухливість електрона визначається розсіянням центрами статичної деформації. При температурах вище 100 К внесок у рухливість електрона визначається взаємодією електрона з полярним оптичним фононом, яка є домінуючою. В цьому інтервалі температур АК- механізм розсіяння теж відіграє помітну роль. Решта механізмів розсіяння – ПОП- та ПАК- розсіяння, НПО- розсіяння та ІД- розсіяння – не дають помітного внесоку у рухливість і можуть бути знехтувані.

Визначення параметрів розсіяння електронів дає можливість розрахувати температурну залежність Холл-фактора електронів (див. рис.4-54). Видно, що при температурах менших 100 К Холл-фактор змінюється в межах 1 ?1.05, що визначається СД- механізмом розсіяння, який домінує за цих температур. За високих температур, де домінуючим є ПО- механізм розсіяння, Холл-фактор може досягнути значень $r_H \approx 2.0$.



Рис. 4 -55 Залежність термо-е.р.с. від температури в кристалі InSb (область власної провідності).





Рис. 4-56. Залежність термо-е.р.с. від температури в кристалах InSb (область домішкової провідності).

Теоретичні температурні залежності термоелектричної сили за високих температур (область власної провідності) порівнювалися з експериментальними результатами, отриманими в роботі [320]. З рис. 4-55 видно, що теорія демонструє достатньо близьке наближення до експерименту. При температурах менших 200 К (область домішкової провідності) теоретичні температурні залежності порівнювалися з експериментальними результатами, представленими в роботі [317]. З рис. 4-56 видно, що і в цьому випадку спостерігається достатньо добре узгодження теорії з експериментом.

Висновки до розділу 4

- 1. Для твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te$ (сфалерит) встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів ($0 \le x \le 1$)з експериментальними даними в інтервалі температур 4.2 300 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 2. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Se (сфалерит) встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів ($0 \le x \le 0.547$) з експериментальними даними в інтервалі температур 4.2 300 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 3. Для твердого розчину Zn_xHg_{1-x}Te (сфалерит) встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів (*x* = 0.15) з експериментальними даними в інтервалі температур 50 300 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 4. Для твердого розчину $Zn_xHg_{1-x}Se$ (сфалерит) встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів ($0.02 \le x \le 1$) з експериментальними даними в інтервалі температур 50 300 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 5. Для кристалів GaN зі структурою вюртциту встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними даними в інтервалі температур 15 500 К та концентрацій домішок 1.1?10¹⁶ ? 1.9?10¹⁸ см⁻³. Визначено

внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.

- 6. Для кристалів ZnO зі структурою вюртциту встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними даними в інтервалі температур 15 550 К та концентрацій домішок ~ 1?10¹⁷ см⁻³. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- Для кристалів CdS зі структурою вюртциту встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними даними в інтервалі температур 10 400 К та концентрацій домішок 5.5?10¹⁵? 1.1?10¹⁹ см⁻³. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 8. Для кристалів InN зі структурою вюртциту встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними даними в інтервалі температур 4.2 ? 560 К та концентрації домішок (1.2?8.3)?10¹⁴ см⁻³. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 9. Для кристалів InSb зі структурою сфалерит встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними даними в інтервалі температур 8 ? 700 К та концентрації домішок (1.2?8.3)?10¹⁸ см⁻³. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння електронів.
- 10. Розраховано температурні залежності рухливості електронів у вищезазначених напівпровідникових сполуках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V зі структурою сфалерит та вюртцит, які дають ліпше узгодження з експериментом в порівнянні з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

Розділ 5

Розсіяння важких дірок на близькодіючому потенціалі кристалічних дефектів в сполуках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V

Розглянуті в попередніх розділах моделі розсіяння носіїв заряду, а також метод знаходження нерівноважної функції розподілу, дозволяють теж описати процеси розсіяння важких дірок в твердих розчинах сполук $A^{II}B^{VI}$ та $A^{III}B^{V}$. В цьому розділі буде проведено порівняння теоретичних кривих та експериментальних даних для температурних залежностей важких дірок в твердих розчинах Cd_xHg_{1-x}Te та Zn_xCd_{1-x}Te, а також нітриду галію.

5.1. Температурні залежності рухливості важких дірок в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Te

В роботах [91, 95, 96, 107-115] проводилися вимірювання ефективної маси важких дірок в $Cd_xHg_{1-x}Te$, які показали сильний розкид експериментальних даних, що свідчить про залежність цього параметра від складу та температури. Цей висновок був підтверджений в роботі [103], згідно якої для x<0.5 виконувалися співвідношення:

$$x = 0 m_{hh}/m_0 = 0.60 + 2.1 \times 10^{-4} T; (5.1)$$

$$0 < x < 0.5 m_{hh}/m_0 = 0.49 + 7.3 \times 10^{-4} T.$$

Для x>0.5 приймалося співвідношення $m_{hh}/m_0 = 0.63$ [123]. Константи акустичного потенціалу деформації для важких дірок валентної зони вибиралися за результатами роботи [55]: a=2.7; b=-1.3; d=-2.2. Решта параметрів матеріалу, що використовувалися при розрахунку кривої $\mu_p(T)$ представлені в таблиці 4.1.

Порівняння теоретичних і експериментальних температурних залежностей



Рис.5.1. Температурна залежність коефіцієнта Холла в p-HgTe. Експеримент - [130].



Рис.5.2. Температурна залежність електропровідності в HgTe. Експеримент - [130].



Рис.5.3. Температурна залежність рухливості важких дірок в HgTe. Суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння. 1,2,3,4,5,6 – АК, ІД, НПО, ПАК, ПО, ПОП механізми розсіяння.

коефіцієнта Холла та електропровідності в НgTe проводилося для зразка 14-7 з роботи [130], який при T = 4.2 К мав значення коефіцієнта Холла $R \sim 2 \ cm^3 / Kn$ при В=0.6 Тл. Для отримання такого теоретичного значення коефіцієнта Холла необхідно припустити, що концентрація іонізованих акцепторів у цьому зразку складає $N_A^+ \sim 3.25 \times 10^{18}$ см⁻³ [134]. Відповідно розрахунок теоретичних кривих проводився на основі рівняння нейтральності : $p - n = N_A^-$. Як видно з коефіцієнта Холла температурних залежностей та електропровідності, представлених на рис. 5.1-5.2, теоретичні криві достатньо добре узгоджуються з експериментом в інтервалі температур 4.2 – 300 К, тобто, як в області діркового типу провідності так і в області змішаної провідності. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис.5.3 точковими лініями представлені криві для відповідних механізмів розсіяння. Видно, що у всьому розглянутому інтервалі температур основним механізмом є розсіяння на іонізованих домішках та розсіяння на полярних оптичних фононах. Решта механізмів – розсіяння на

акустичних та неполярних оптичних фононах, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля – дають нехтувано малий внесок.

Для складів з x>0 порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості важких дірок $\mu(T)$ проводилося з експериментальними даними, представленими в роботах [131-133] для зразків Cd_xHg_{1-x}Te з складом x = 0.216 (нелегований зразок sx19), x = 0.224 (Cu- легований зразок DH-328), x = 0.229 (нелегований зразок 143-II-1), x = 0.232 (нелегований зразок sx25), x = 0.31(нелегований зразок 7), x = 0.38 (нелеговані зразки 1 та 4 і Cu- легований зразок 5), x = 0.5(нелегований зразок 8), x = 0.62(нелегований зразок 9). Рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності:

$$p - n = N_A^- - N_D^+ , \qquad (5.2)$$

де $N_A^-; N_D^+$ - концентрації іонізованих акцепторів та донорів, а параметри дефектної структури (тобто, концентрація дефектів, енергія іонізації) вибиралися згідно робіт [13, 131]. Теоретичні криві $\mu(T)$ представлені на рис.



Рис. 5.4. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.216). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [132].



Рис. 5.5. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.224). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [133].



Рис. 5.6. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.229). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [133].



Рис. 5.7. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.232). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [132].



Рис. 5.8. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.31). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].



Рис. 5.9. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.38). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].



Рис. 5.10. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.38). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].



Рис. 5.11. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.38). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].



Рис. 5.12. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.50). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].



Рис. 5.13. Температурна залежність рухливості важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te (x=0.62). *а*: суцільна крива – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – відповідно АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СД- механізми розсіяння; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент – [131].

5.4 – 5.13 [135-140]. Суцільні лінії представляють залежності, розраховані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку стаціонарного рівняння Больцмана. Отримані параметри розсіяння γ для різних механізмів розсіяння представлені в таблиці 5.1. Як видно, теоретичні криві добре узгоджуються з

Таблиця 5.1

Зразок	x	γпо	γід	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
14-7	0	0.45	0.56	0.3	-
sx19	0.216	0.4	1.0	0.3	0.459
sx25	0.232	0.4	1.0	0.3	1.5
DH-328	0.224	0.4	1.5	0.3	0.779
143-II-1	0.229	0.4	1.0	0.3	3.51
1	0.38	0.4	1.5	0.3	5.13
4	0.38	0.45	1.0	0.3	1.2
5	0.38	0.4	0.8	0.3	5.04
7	0.31	0.4	1.0	0.3	2.25
8	0.50	0.4	1.0	0.3	15.0
9	0.62	0.4	1.0	0.3	9.0

Параметр *у* для різних механізмів розсіяння важких дірок в Cd_xHg_{1-x}Te

експериментальними даними у всьому досліджуваному інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 5.4 - 5.13 представлені у вигляді точкових ліній відповідні залежності. Видно, що при низьких температурах (T < 50~K) основним механізмом розсіяння є розсіяння на потенціалі статичної деформації. Розсіяння невпорядкованості та розсіяння на полярних оптичних фононах відіграє теж суттєву роль в цьому температурному інтервалі. При вищих температурах внесок розсіяння на іонізованих домішках стає також суттєвим. Решта механізмів розсіяння – розсіяння на акустичних та неполярних оптичних фононах, акустичних та оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля, нейтральних домішках – дають знехтувано малий внесок.

Порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження теорії та експерименту для важких дірок в $Cd_xHg_{1-x}Te$. Далекодіючі моделі розсіяння дають узгодження з експериментом при умові, що параметр b_0 , що пов'язаний з розміром дефекту (див. (1.29)), має значення ~ 40 A [13]. Якщо порівняти це значення з постійною решітки $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($a_0 \approx 6$ A), то видно, що дефект не є точковим, що суперечить вихідним припущенням далекодіючої моделі.

5.2. Параметри твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te

Твердий розчин Zn_xCd_{1-x}Te знаходить широке застосування в електроніці, зокрема, він є одним з перспективних матеріалів для виготовлення детекторів радіації, що працюють при кімнатній температурі [164]. Однак, на теперішній час домінуючі механізми розсіяння носіїв та їх температурні залежності для системи ZnCdTe є недостатньо відомі [165-169]. Ширина забороненої зони твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te детально досліджувалась в роботах [170-172]. В роботі [170] для залежності $E_g(x,T)$ при температурах 77 та 295 К були отримані наступні залежності:

$$E_g(x,77) = 1.603 + 0.679 x + 0.097 x^2 ;$$

$$E_g(x,300) = 1.513 + 0.651 x + 0.093 x^2 .$$
(5.3)

Припускаючи лінійну залежність E_g від температури отримаємо:

$$E_g(x,T) = 1.635 - (4.128 + 1.284 \ x + 0.1835 \ x^2) \times 10^{-4} T + 0.6889 \ x + 0.09841 \ x^2.$$
(5.4)

Ця залежність краще узгоджується зі значенням E_g для CdTe, отриманим із співвідношення (4.4), ніж аналогічна формула, отримана на основі робіт [171,172].

Згідно результатів роботи [125] величина енергетичного еквівалента матричного елемента взаємодії для CdTe складає *21 eB*, а для ZnTe – *20.79 eB* [113]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [106] величина спін-орбітального розщеплення в CdTe складає 0.92 *eB*, а для ZnTe – 0.96 *eB* [173]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [123] ефективна маса важких дірок в CdTe складає $0.63 m_0$, а для ZnTe – $0.60 m_0$ [174]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Густина твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te описується емпіричним виразом [175,118]:

$$\rho = 5.75 \times 10^{3} - 0.114 \times 10^{3} x \,. \tag{5.5}$$

Решіткова діелектрична стала для ZnTe становить $\kappa_L = 2.39$ [176], а для CdTe - $\kappa_L = 3.1$ [105]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Високочастотна діелектрична стала для ZnTe становить $\kappa_{\infty} = 7.28$ [176], а для CdTe - $\kappa_{\infty} = 7.4$ [105]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Згідно результатів роботи [105] частота поперечних оптичних фононів в CdTe рівна 2.63×10¹³ рад/с, а для ZnTe – 3.632×10¹³ рад/с [123]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Величина оптичного потенціалу деформації d_0 для ZnTe становить 23 eB [177,178], а для CdTe - 22 eB [117]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих даних.

Константи акустичного потенціалу деформації для важких дірок валентної зони вибиралися за результатами робіт [179-182].

Пружні константи C_l та C_t розраховувалися за результатами роботи [124].

З гідно робіт [123, 124] значення п'єзоакустичної константи e_{14} в CdTe лінійно залежить від температури, а для ZnTe є величиною постійною [124]. Для твердого розчину Zn_xCd_{1-x}Te припускалася лінійна інтерполяція цих залежностей.

Для величини матричного елемента розсіяння невпорядкованості вибиралося оціночне значення $V = 5 \times 10^{-23} eB \ cm^3$.

Значення параметрів, що використовувалися в розрахунках представлені в таблиці 5.2.

Таблиця 5.2

Параметр матеріалу	Значення, композиційна та температурна	Літера-
	залежність	тура
Маса атома, кг	$M_{Zn} = 10.858 \times 10^{-26}$	
	$M_{Cd} = 18.666 \times 10^{-26}$	
	$M_{Te} = 21.19 \times 10^{-26}$	
Постійна решітки, м	$a_0 = 6.481 \times 10^{-10} - 3.773 \times 10^{-11} x$	[1,175]
Ширина забороненої зо-	$E_g = 1.635 - (4.128 + 1.284 x + 0.1835 x^2) \times$	[170]
ни, еВ	$\times 10^{-4}T + 0.6889 x + 0.09841 x^2$	
Енергетичний еквівалент	$E_p = 21 - 0.21 x$	[113,125]

Параметри кристалів Zn_xCd_{1-x}Te

матричного елемента, еВ		
Спін-орбітальне роз-	$\Delta = 0.92 + 0.04 x$	[106,173]
щеплення, еВ		
Ефективна маса важких	$m_{hh}/m_0 = 0.63 - 0.03 x$	[123,174]
дірок		
Густина, кг/м ³	$\rho = 5.75 \times 10^{3} - 0.114 \times 10^{3} x$	[118,175]
Оптичний потенціал	$d_0 = 22 + x$	[117,177,
деформації, еВ		178]
Частота поперечних	$\omega_{TO} = 2.63 \times 10^{-13} + 1.002 \times 10^{-13} x$	[105,123]
оптичних фононів, рад/с		
Решіткова діелектрична	$\varepsilon_L = 3.1 - 0.71 x$	[105,176]
стала		
Високочастотна ді-	$\varepsilon_{\infty} = 7.4 - 0.12 x$	[105,176]
електрична стала		
Константи акустичного	a = -3.4 - 2.4 x	[179-
потенціалу деформації,	b = -1.2 - 0.6 x	182]
еВ(валентна зона)	d = -4.8 + 0.2 x	
Пружні константи, Н/м ²	$C_l = 8.402 \times 10^{-10}$	[124]
	$C_t = 1.538 \times 10^{-10} + 0.946 \times 10^{-10} x$	
П'єзоакустична кон-	$e_{14} = 0.03457 - 6.17 \times 10^{-3} x -$	[123,124]
станта, Кл/м ²	$-1.39 \times 10^{-5} T(1-x)$	
Матричний елемент	$V = 5 \times 10^{-23}$	-
розсіяння невпорядко-		
ваності, $eB \times cm^3$		

5.3. Температурні залежності рухливості важких дірок в твердому розчині Zn_xCd_{1-x}Te

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості важких дірок проводилося з експериментальними даними, представленими в [165,183,184] для кристалів Zn_xCd_{1-x} Te з складом x = 0 (зразок A-71[183]), x = 0.16; 0.40; 0.68; 0.80; 0.90 та x=1 (легований Ag зразок [184]). Для 0 < x < 1 рівень Фермі визначався з рівняння електронейтральності:

$$p = N_A \left[2 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1},$$
(5.6)

де E_A - енергія іонізації акцептора, визначена в роботі [165] ; N_A концентрація акцепторів, отримана з композиційної залежності концентрації важких дірок при 300 К (рис.4 в [165]). Для x = 0 рівняння нейтральності має вид:

$$p = N_A \left[2 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{k_B T}\right) + 1 \right]^{-1} - N_D, \qquad (5.7)$$

де E_A, N_A, N_D (N_D - концентрація донорів) визначалися в роботі [183]. Для x = l рівень Фермі визначався з рівняння $p = N_A^+ = l/e R$, R – експериментальне значення коефіцієнта Холла, визначене в [184].



Рис.5.14. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [183].



Рис.5.15. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0.16). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [165].



Рис.5.16. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0.40). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [165].



Рис.5.17. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0.68). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [165].



Рис.5.18. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0.80). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [165].



Рис.5.19. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=0.90). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,7,8,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, НД-, НП-, СДмеханізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [165].



Рис.5.20. Температурна залежність рухливості важкої дірки в кристалі Zn_xCd_{1-x}Te (x=1). *а*: суцільна лінія – змішаний механізм розсіяння; 1,2,3,4,5,6,9 – АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД- механізми розсіяння відповідно; *б*: порівняння близькодіючих і далекодіючих моделей. Експеримент - [184].

Теоретичні криві $\mu(T)$ для Zn_xCd_{1-x}Te представлені на рис. 5.14-5.20 [185-188,210,214]. Суцільні лінії представляють криві, розраховані на основі близькодіючих моделей в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана. В таблиці 5.3 представлені отримані значення параметрів розсіяння γ для різних механізмів

x	γпо	Ύιд	$\gamma_{\Pi \mathrm{E}}$	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
0.00	0.44	1.0	0.34	0.5
0.16	0.45	1.0	0.33	40.0
0.40	0.47	1.0	0.33	20.0
0.68	0.40	1.0	0.36	8.0
0.80	0.40	1.0	0.37	0.1
0.90	0.39	1.0	0.35	0.1
1.00	0.39	1.0	0.35	0.1

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

розсіяння. Видно, що теоретичні криві добре узгоджуються з експериментом у всьому розглянутому інтервалі температур. Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння на рис. 5.14-5.20 точковими лініями представлені відповідні залежності.

Видно, що в кристалах, збагачених Cd, основними механізмами розсіяння 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 кращою якістю кристалу в порівнянні з випадком x>0. В області низьких температур спостерігається різний нахил теоретичної кривої та експериментальних даних. Це може бути пояснене неповнотою СД- моделі розсіяння, де, можливо, повинна бути врахована кутова залежність потенціалу взаємодії.

В кристалах, збагачених Zn, розсіяння на полярних оптичних, акустичних фононах та акустичних коливаннях п'єзоелектричного поля є також домінуючим. Для цього випадку вплив СД- механізму розсіяння є менш суттєвим. Решта механізмів розсіяння – таких як розсіяння на нейтральній та іонізованій домішці, розсіяння на оптичних коливаннях п'єзоелектричного поля та неполярному оптичному фононі, розсіяння невпорядкованості – дають знехтувано малий внесок.

Порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження теорії та експерименту для важких дірок в Zn_xCd_{1-x}Te.

Таблиця 5.3

5.4. Температурні залежності рухливості важких дірок в GaN

При розрахунках валентна зона нітриду галію припускалась параболічною та сферичною. Значення ефективної маси дірок недостатньо добре відомо для GaN – існує широкий розкид експериментальних даних: $m_h = 0.59 m_0$ [239]; $m_h = 0.8 m_0$ [240]; $m_h = 1.1 m_0$ [241]; $m_h = 1.4 m_0$ [242]; $m_h = 2.2 m_0$ [243]. В теперішній роботі використовувалося значення $m_h = 1.4 m_0$, яке дає найкраще узгодження з експериментальними даними.

Розсіяння дірок на НПО- та АК- фононах описувалося на основі ефективного потенціалу деформації, представленого виразами (2-102) та (2-76) відповідно, де C_l , C_t – сферично усереднені пружні коефіцієнти структури вюртциту [244]:

$$C_{x} = C_{11} + C_{33} - 2C_{13} - 4C_{44}; C_{l} = \frac{1}{3} (2C_{11} + C_{33}) - \frac{2}{15} C_{x}; C_{t} = C_{44} + \frac{2}{15} C_{x}.$$
 (5-8)

Значення *a*, *b*, *d* (фундаментальні потенціали деформації валентної зони) для GaN відсутні в літературі. Для оцінки їх значень на основі даних роботи [182] використовувався то й же метод, що і для E_{NPO} в GaN. В результаті отримаємо: a = -8.9 eB; b = -1.8 eB; d = -4.7 eB. Решта параметрів матеріалу, що використовувалися при розрахунках, представлені в таблиці 4.10.

Таблиця 5.4

Зразок	γпо	γід	γпе	γ _{СД} N _{СД} ? 10 ⁻¹⁴ см ⁻³
K	0.53	0.45	0.30	130.0
L M	0.53	0.45	0.30	2500
Ν	0.53	0.45	0.30	7500

Параметр γ для різних механізмів розсіяння дірок в GaN

Порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості дірок $\mu_p(T)$ проводилося з експериментальними даними, представленими в роботі [225]. Рівень Фермі визначався з рівняння нейтральності:

$$p + N_D = \frac{N_A}{1 + 4 \exp\left(\frac{E_A - F}{k_B T}\right)},$$
(5-9)

де N_A , N_D , E_A – концентрація акцепторів, донорів та енергія іонізації акцептора відповідно, визначених в [225].



Рис. 5.21. Температурна залежність рухливості дірки в кристалах GaN з різною концентрацією домішок.

Теоретичні криві $\mu_p(T)$ представлені на рис.5.21 [237,238]. Отримані значення параметрів розсіяння дірок представлені в таблиці 5.4. Видно, що відносно добре узгодження теорії та експерименту спостерігається тільки при мінімальному рівні легування (зразок К), тоді як при високому рівні легування теорія тільки якісно описує експериментальні дані. Це може бути пояснене тим, що при високому рівні легування має місце сильна перебудова енергетичного спектру кристала – або утворення акцепторної зони, або утворення твердого розчину акцепторної домішки та нітриду галію. Однак, така ситуація виходить за межі області застосування розглянутих вище моделей розсіяння. Слід також відзначити, що подібна ситуація має місце і у випадку електронів (дивись вище зразок G), де найбільша розбіжність між теорією та експериментом спостерігається при найвищій концентрації домішки.

Для оцінки ролі різних механізмів розсіяння дірок на рис. 5.22 штриховими лініями представлені відповідні залежності для зразка К. Видно, що у низькотемпературному інтервалі основну роль відіграє СД- розсіяння, тоді як при високих температурах спостерігається комбіноване розсіяння – розсіяння на іонізованих домішках, акустичних та полярних оптичних фононах. Решта механізмів розсіяння дають нехтувано малий внесок.

Такий характер розсіяння визначає температурну залежність Холл-фактора дірок (див. рис. 5.23) – мінімум спостерігається при температурі, де має місце перехід від однотипного до комбінованого розсіяння. При високих температурах спостерігається насичення залежності $r_H(T)$ на рівні $r_H \approx 1.10$.



Рис. 5.22. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість дірки в кристалі GaN. *a*: 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.


Рис. 5.23. Температурна залежність Холл-фактора дірок в кристалі GaN.

Порівняння двох конкуруючих підходів – близькодіючих та далекодіючих моделей розсіяння – показує, що близькодіючі моделі розсіяння дають краще узгодження теорії та експерименту для важких дірок в GaN (див. рис. 5.22б).

- 1. Для твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te (сфалерит) встановлено узгодженість основі близькодіючих розрахованих на моделей температурних рухливості важких дірок $(0 \le x \le 0.62)$ залежностей 3 експериментальними даними в інтервалі температур 4.2 – 300 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри у для різних механізмів розсіяння важких дірок.
- 2. Для твердого розчину $Zn_xCd_{1-x}Te$ (сфалерит) встановлено узгодженість розрахованих на основі близькодіючих моделей температурних залежностей рухливості важких дірок ($0 \le x \le 1$) з експериментальними даними в інтервалі температур 50 360 К. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння важких дірок.
- 3. Для кристалів GaN p-типу зі структурою вюртциту в інтервалі температур 100 ? 1000 К та концентрацій домішок 1.9?10¹⁹ ? 2.6?10²⁰ см⁻³ встановлено відносно добре узгодження теоретичних залежностей $\mu_p(T)$ та експерименту тільки при мінімальному рівні легування, тоді як при високому рівні легування теорія тільки якісно описує експериментальні дані. Визначено внесок різних механізмів розсіяння у рухливість носіїв заряду. Встановлено параметри γ для різних механізмів розсіяння дірок.
- 4. Розраховано температурні залежності рухливості дірок у вищезазначених напівпровідникових сполуках А^{II}В^{VI} та А^{III}В^V зі структурою сфалерит та вюртцит, які дають краще узгодження з експериментом в порівнянні з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

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:

- З'ясовано, що врахування близькодії в разі розсіяння носія заряду на іонізованій домішці вводить обмеження на характерний радіус кулонівської взаємодії розмірами кристалічної комірки a₀, тобто допускає представлення r = γ_{IД}a₀, де підгінний параметр γ_{IД} змінюється в межах [0,1].
- 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 ~ b₀ r ⁻² (b₀ – величина, яка зв'язана з розміром дефекту), зроблено припущення, що величина b₀ дорівнює сталій гратки, тобто сферичносиметричне поле центра статичної деформації діє тільки в межах однієї елементарної комірки.
- 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.
- 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 А^ПВ^{VI} та А^ШВ^V зі структурою сфалерит та вюртцит, які дають ліпше узгодження з експериментом порівняно з далекодіючими моделями в наближенні часу релаксації.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- Берченко Н.Н. Полупроводниковые твердые растворы и их применение: Справочные таблицы / Н.Н. Берченко, В.Е. Кревс, В.Г. Средин. – Москва: Воениздат, 1982. – 208 с.
- Нокс Р. Симметрия в твердом теле / Р. Нокс, А. Гольд. Москва: Наука, 1970. – 424 с.
- Гавалешко Н.П. Узкозонные полупроводники. Получение и физические свойства / Н.П. Гавалешко, П.Н. Горлей, В.А. Шендеровский. – Киев: Наукова думка, 1984. – 288 с.
- 4. Wiley J.D. Mobility of holes in III-V compounds/J.D. Wiley // Semiconductors and semimetals. Transport phenomena.– Acad. Press., 1975 V.10. P. 91- 174.
- Kane E.O. Band structure of indium antimonide/ E.O. Kane // J. Phys. Chem. Solids. – 1957.- V. 1. N 2. – P. 249-261.
- Kane E.O. The *kp*-method /E.O. Kane // Semiconductors and semimetals. -Acad. Press., 1970 - V.1. – P. 75- 100.
- Kane E.O. Band structure of narrow gap semiconductors /E.O. Kane // Lect. Note. Phys. – 1980. – V. 133. – P. 13-31.
- Ландау Л.Д. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц – Москва: Наука, 1974. – 752 с.
- Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках/ Б.М. Аскеров – Москва:Наука,1985.–319с.
- Бонч-Бруевич В.Л. Физика полупроводников /В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников – Москва: Наука, 1977. – 672 с.
- Conwell E.M. Theory of impurity scattering in semiconductors/ E.M. Conwell, V.F. Weisskopf // Phys. Rev. - 1950. - V.77, - P.388-390.
- 12. Brooks H. // Advances in Electronics and Electron Physics 1955. V.7, P.87.
- Yadava R.D.S. Hole scattering mechanisms in Hg_{1-x}Cd_xTe/R.D.S. Yadava, A.K.Gupta, A.V.R.Warrier//J. Electronic Materials.–1994.–V.23,N12.–P. 1359-1378.

- Massey H.S.W. The scattering of electrons by hydrogen atoms/ H.S.W. Massey, B.L. Moiseiwitsch // Phys. Rev. – 1950. – V.78, N 2. – P.180-181.
- Киреев П.С. Физика полупроводников/ П.С. Киреев Москва: Высшая школа, 1975. – 584 с.
- Erginsoy C. Neutral impurity scattering in semiconductors/ C. Erginsoy // Phys. Rev. – 1950. – V. 79, N 6.- P. 1013-1014.
- 17. Ландау Л.Д. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Москва: Наука, 1987. – 248 с.
- Fedders P.A. Strain scattering of electrons in piezoelectric semiconductors/ P.A. Fedders // J. Appl. Phys. – 1983. – V.54, N 4. – P.1804-1807.
- 19. Ландау Л.Д. Электродинамика сплошных сред/ Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц
 Москва: Наука, 1987. 248 с.
- 20. Rode D.L. Low-field electron transport/ D.L. Rode // Semiconductors and semimetals. -Academic Press, New York, 1975. V.10. P.1-89.
- 21. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников/ А.И. Ансельм Москва: Наука, 1978.- 616 с.
- Bardeen J. Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals/ J. Bardeen, W. Schockley // Phys. Rev. 1950.- V. 80. N 1. P. 72-80.
- Bardeen J. Energy Bands and Mobilities in Monatomic Semiconductors/ J. Bardeen, W. Schockley // Phys. Rev. – 1950.- V. 77. N3. – P. 407-408.
- 24. Meijer H.J.G./ H.J.G. Meijer, D. Polder // Physica. 1953.-V.19. P.255-264.
- Дыкман И.М. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках/ И.М. Дыкман, П.М. Томчук – Киев: Наукова думка, 1981. – 319 с.
- Казлаускас П.А. Использование вариационного принципа Швингера для вычисления кинетических коэффициентов/ П.А. Казлаускас, И.Б. Левинсон // ФТТ.- 1967.- Т.9. № 12.- С.3504-3511.
- Гашим-заде Ф.М. Вариационный принцип Швингера для расчета кинетических коэффициентов в полуметаллических сплавах Cd_xHg_{1-x}Te/ Ф.М. Гашим-заде, С.М. Сенд-Рзаева, В.Я. Штейеншрайбер // ФТТ.- 1980.- Т.22. № 8.- С.2285-2292.

- Carsia-Moliner F. An extension of the general variational principle of transport theory/ F. Carsia-Moliner, S. Simons, J.M. Ziman // Proc. Cambr. Phil. Soc. -1957. – V.53. N 4. – P. 848-855.
- 29. Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential in narrow gap Cd_xHg_{1-x}Te/ O.P. Malyk // Materials Science & Engineering B. 2006. V. 129. P. 161-171.
- 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.
- Малик О.П. Локальна взаємодія електронів з близькодіючим потенціалом дефектів в Cd_xHg_{1-x}Te (0 ≤ x≤ 0.26) / О.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. «Фізико-математичні науки». 2005. № 540.-С.101-110.
- 32. 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.
- 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.
- 34. 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.
- 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.

- 36. 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
 // Journal of Alloys and Compounds. 2004. V.371, N 1-2. P.146-149.
- Malyk O.P. Nonelastic electron scattering in HgTe/ Malyk O.P. // 6-th International Conference "Material Science and Material Properties for Infrared Optoelectronics", 22-24 May 2002: - Abstracts. - Kyiv, 2002. - P. 31.
- 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.
- 41. 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.
- 42. 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.
- 43. 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.
- 44. 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.
- 45. 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.

- 46. Малик О.П. Взаємодія електронів з близькодіючим потенціалом кристалічних дефектів у твердому розчині CdHgTe при низькій температурі/О.П. Малик//З-я Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології», 2-6 червня 2008.-Тези доповідей.- Одеса, 2008- С.199.
- 47. 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.
- 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 школа-конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників", 23 – 26 вересня 2008. - Тези доповідей.- Дрогобич, 2008. - С. 129.
- 50. Бир Г.Л./ Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус // ФТТ.- 1960. Т.2. С. 2287-2297.
- Lawaetz P. Long wave phonon scattering in nonpolar semiconductors/P. Lawaetz // Phys. Rev. – 1969. - V.183, N 3.- P. 730-739.
- 52. Zawadzki W. Elastic electron scattering in InSb-type semi-conductors/ W. Zawadzki, W. Szymanska // Phys. Stat. Sol.(b). 1971. V.45. P. 415-432.
- Szymanska W. Elastic electron scattering in symmetry-induced zero-gap semiconductors/ W. Szymanska, P. Boguslawski, W. Zawadzki // Phys. Stat. Sol.(b). – 1974. – V.65. – P. 641-654.
- 54. Wiley J.D. Lattice mobility of holes in III-V compounds /J.D. Wiley, M. DiDomenico //Phys. Rev. 1970. V. B2, N 2. P. 427-433.

- Weill G. Deformation, sans l'effet de la pression, de la structure de bende des alliages HgTe-CdTe/G. Weill, C. Verie //C. R. Acad. Sci. 1966. V. 263, N 6.- P. 463-465.
- Boguslawski P. Nonpolar scattering of electrons by optical phonons in small-gap semiconductors/ P. Boguslawski // Phys. Stat. Sol.(b). – 1973. – V.70. – P.53-62.
- Wiley J.D. Valence-band deformation potentials for the III-V compounds/ J.D.
 Wiley //Solid State Commun. -1970.- V. 8, N 22. P. 1865-1868.
- Lawaetz P. Symmetry principles in the theory of transport properties with special reference to p-type germanium /P. Lawaetz // Phys. Rev. 1968. – V.166, N3. – P.763-769.
- Lawaetz P. Low-field mobility and galvanomagnetic properties of holes in germanium with phonon scattering/P. Lawaetz // Phys. Rev. – 1968. – V.174, N 3. – P. 867- 880.
- Тамм И.Е. Основы теории электричества / И.Е.Тамм Москва: Наука, 1976. 616 с.
- Смирнов В.И. Курс высшей математики. Т. 2/ В.И. Смирнов Москва: Наука, 1974.- 656 с.
- 62. Малик О.П. Непружне розсіяння електронів на полярних оптичних фононах в телуриді ртуті /О.П. Малик //УФЖ.-2004.-Т.49,№ 7.- С.677- 680.
- 63. 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.
- 64. Малик О.П. Непружне розсіювання електронів на полярних оптичних коливаннях кристалічної гратки в твердому розчині Cd_x Hg_{1-x} Te/O.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Електроніка ". 2004. № 513. С.137-142.
- 65. Malyk O.P. The inelastic electron polar optical phonon scattering in HgTe/O.P. Malyk // WSEAS Trans. Math. 2004. Vol. 3, Issue 2. P.293-296.
- 66. Malyk O.P. The local inelastic electron -polar optical phonon interaction in mercury telluride/O.P. Malyk //Comput. Mater. Sci.- 2005. V.33. P. 153-156.

- 67. 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.
- 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.
- Malyk O.P. The model of short-range inelastic electron-polar optical phonon scattering in Cd_x Hg_{1-x} Te/O.P. Malyk // 20th General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society, 19-23 July 2004. Program.- Prague, 2004. Abstract S2X53.
- Malyk O.P. The local inelastic electron -polar optical phonon interaction in mercury telluride/ O.P. Malyk//The European Material Conference "EMRS 2004", 24-28 May 2004.-Book of Abstracts.- Strasbourg, 2004. - P.13. Abstract H/P.09.
- 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.
- Malyk O.P. The model of short-range inelastic electron-polar optical phonon inter-action 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.
- Lewin L. Polylogarithms and Associated Functions/ L. Lewin. Amsterdam, North Holland, 1981.
- 74. Форсайт Д. Машинные методы математических вычислений/ Д. Форсайт,М. Малкольм, К. Моулер. Москва: Мир, 1980.- 279 с.

- 75. Malyk O.P. Nonelastic charge carrier scattering in mercury telluride/O.P. Malyk
 // J. Alloys Compd. 2004. V.371/1-2. P.146-149.
- 76. Малик О.П., Кеньо Г.В. Непружна електрон-фононна взаємодія в HgTe/ О.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Елементи теорії та прилади твердоті лої електроніки ". – 2002. - № 454. - С 28-37.
- Малик О.П., Кеньо Г.В. Непружне розсіювання дірок на оптичних коливаннях кристалічної гратки в HgTe/ О.П. Малик // Вісник НУ "Львівська політехніка". Сер. "Електроніка ". – 2002. - № 455. – С. 166-171.
- 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.
- 79. Malyk O.P. Construction of the exact solution of the stationary Boltzmann equation for the semiconductor with isotropic dispersion law /O.P. Malyk // WSEAS Transactions on Mathematics.- 2004. Issue 2. Vol. 3. P. 354-357.
- 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.
- 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.
- 82. Курош А.Г. Курс высшей алгебры/А.Г. Курош-Москва: Наука, 1971.-432 с.
- Bubowski J.J. Disorder scattering in Cd_xHg_{1-x}Te mixed crystals/J.J. Dubowski //Phys. Stat. Sol. (b).- 1978.-V.85.- P.663-672.
- Litwin-Staszewska E. Scattering on short-range potentials in semiconductors with a narrow energy gap /E. Litwin-Staszewska, W. Szymanska // Phys. Stat. Sol. (b).- 1976.-V.74, N 3.- P.K89-K92.

- Litwin-Staszewska E. Scattering on short-range potentials in InSb/E. Litwin-Staszewska, S. Porowski, A.S. Filipchenko // Phys. Stat. Sol. (b).- 1971.-V.48, N 2.- P.525- 530.
- 86. Берченко Н.Н. Ширина запрещенной зоны Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te при высокой температуре/ Н.Н. Берченко, О.П. Малык //Физическая электроника.–1989.– Т.38. – С. 72-76.
- Schmit J.L. Temperature and alloy compositional dependence of energy gap in Hg_{1-x}Cd_xTe/ J.L. Schmit, E.L. Stelzer//J. Appl. Phys.–1969.–V.40,N 12.– P.4865-4869.
- Kinch M.A. Far infrared cyclotron resonance in Hg_{1-x}Cd_xTe/M.A. Kinch, D.D. Buss // Proc. Conf. Phys. Semimetals and Narrow-gap Semiconductors. Dallas. – 1971.- P.461-470.
- 89. Scott M.W. Energy gap in Hg_{1-x}Cd_xTe by optical absorption /M.W. Scott J.
 //Appl. Phys. 1969. V.40, N 10. P.4077-4081.
- 90. Triboulet R., CdTe and CdTe: Hg alloys crystal growth using stoichoimetric and off- stoichoimetric zone passing technique /R. Triboulet // Revue Phys. Appl. – 1977. – V.12, N 2. – P.123-128.
- 91. Wiley J.D. Helicons and nonresonant cyclotron absorption in semiconductors Hg_{1-x}Cd_xTe/ Wiley J.D., Dexter R.N. // Phys. Rev. 1969. V.181, N 2. P.1181-1190.
- 92. Weiler M.H. Interband magnetoreflectance in semi-conducting Hg_{1-x}Cd_xTe alloys/M.H. Weiler, R.L. Aggarwal, B. Lax // Phys. Rev. 1977. V.B16, N 8. P.3603-3607.
- 93. Dobrowolska M. Determination of temperature dependence of energy gap in HgTe by oscillatory magnetotransmission measurements/M. Dobrowolska, A. Mycielski, W. Dobrowolski//Solid State Commun.–1978.–V.27,N 11.–P.1233-1236.

- 94. Guldner I. Magnetooptical investigation of Hg_{1-x}Cd_xTe mixed crystals. I. Semimetalic configuration /I. Guldner, A. Mycielski, C. Rigaux [et al.] // Phys. Stat. Sol.(b). 1977. V.81, N 2. P.615-627.
- 95. Stankiewiez J. Pressure and temperature dependence of energy gap in Cd_xHg_{1-x}Te/J. Stankiewiez, W. Giriat//Phys. Stat. Sol.(b).–1972.–V.49,N 1.– P. 387-393.
- 96. Dietl T. Temperature dependence of the band structure parameters in HgTe from thermomagnetic measurements/T. Dietl, A. Jedrzeyjczak // Phys. Stat. Sol.(b). – 1975. – V.71, N 1. – P. K39-K43.
- 97. Finkman E. Determination of band-gap parameters of Hg_{1-x}Cd_xTe based on high temperature carrier concentration /E. Finkman // J. Appl. Phys. – 1983. – V.54, N 4. – P.883-886.
- 98. Antcliff G.A. Effective mass and spin-splitting in Hg_{1-x}Cd_xTe /G.A. Antcliff // Phys. Rev. – 1970.- V.B2, N 2. – P.345-351.
- 99. Elliot C.T. Carrier freeze-out and acceptor energies in p-type Hg_{1-x}Cd_xTe/C.T. Elliot, J. Melngailis, T.C. Harman // J. Phys. Chem. Solids. 1972. V.33, N 8. P.1527-1531.
- 100. Photo- and cathode-luminescence of Cd_{0.3}Hg_{0.7}Te alloys /V.I. Ivanov-Omskii, V.A. Maltseva,A.D. Britov [et al.]//Phys.Stat.Sol.(a).–1978.–V.46,N1.– P.77-80.
- 101. Hunter A.T. Luminescence from HgCdTe alloys /A.T. Hunter, T.C. McGill //J. Appl. Phys. 1981. V.52, N 9. P. 5779-5785.
- 102. Hansen G.L. Energy gap versus alloy composition and temperature in Hg₁₋ _xCd_xTe/G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Casselman // J. Appl. Phys. – 1982. – V.53, N 10. – P.7099- 7101.
- 103. Малык О.П. Рассеяние электронов в Cd_xHg_{1-x}Te при высокой температуре / О.П. Малик // УФЖ. 1990. Т.35, № 9. С. 1374-1376.
- 104. Magnetophonon effect in Hg_{1-x}Cd_xTe/ R.G. Mani, J.R. Anderson, J.B. Choi [et al.] // Phys. Rev. B. 1987. –V.36, N 17. P. 9146-9149.
- 105. Baars J. Reststrahlen spectra of HgTe and Cd_xHg_{1-x}Te /J. Baars, F. Sorger // Solid State Comm. – 1972. – V.10, N 9. – P. 875-878.

- 106. Wepfer G.G. Calculated spin-orbit splitting of some group IV, III-V and II-VI semiconductors/G.G. Wepfer, T.C. Collins, R.N. Euwema // Phys. Rev. B. 1971.- V.4, N 4. P.1296-1306.
- 107. Pidgeon C.R. Interband magnetoreflection of Cd_xHg_{1-x}Te/C.R. Pidgeon, T.C. Harman, S.H. Groves // Bull. Am. Phys. Soc. 1971. V.16, N 3. P. 417.
- 108. Mektiev M.A. Theory of optical absorption of Cd_xHg_{1-x}Te solid solution with account of the contribution of quasilocal acceptor level /M.A. Mektiev, T.G. Ismailov // Phys. Stat. Sol.(b). 1980. V.99, N 2. P. 507-516.
- 109. Jedrzeyjczak A. Thermomagnetic properties of n-type and p-type HgTe /A. Jedrzeyjczak, T. Dietl // Phys. Stat. Sol.(b). 1976. V.76, N 2. P. 737-751.
- Mroczkowski J.A. Optical absorption below the absorption edge in Hg_{1-x}Cd_xTe
 /J.A. Mroczkowski, D.A. Nelson//J. Appl. Phys.–1983.–V.54,N4.– P.2041-2051.
- 111. The valence band of HgTe/I.I. Ivanov-Omskii, B.T. Kolomiets, A.A. Malkova [et al.] // Phys. Stat. Sol.(b).–1969.–V.32,N1.– P. K83-K86.
- 112. Nemirovsky Y. Intrinsic carrier concentration of Hg_{1-x}Cd_xTe/Y. Nemirovsky, E. Finkman // J. Appl. Phys. 1979. V.50, N 12. P.8107-8111.
- 113. Lawaetz P. Valence-band parameters in cubic semiconductors /P. Lawaetz // Phys. Rev. B. 1971.- V.4, N 10. P.3460-3467.
- 114. Эффективная масса тяжелых дырок в твердых растворах Cd_xHg_{1-x}Te/A.И. Белогорохов, А.Т Белов, Г.М. Зингер[и др.]//ФТП.–1987.–Т.21,№3.–С. 568-570.
- 115. Galazka R.R. Heavy-hole effective mass of Cd_{0.1}Hg_{0.9}Te /R.R. Galazka, T. Sosnovsky // Phys. Stat. Sol. 1967. V.23, N 1. P. K39-K43.
- 116. Grynberg M. Dielectric function in HgTe between 8 and 300 K /M. Grynberg, R. Le-Toullec, M. Balkanski // Phys. Rev. B. 1974.- V.9, N 2. P.517-526.
- 117. Potz W. Theory of optical-phonon deformation potentials in tetrahedral semiconductors/W. Potz, P. Vogl // Phys. Rev.B. - 1981. - V.24, N 4. - P. 2025-2037.
- 118. EMIS Datareviews Series No 3 : [J. Brice, P. Capper].- London: INSPEC, 1987.

- 119. Alper T. The elastic constants of mercury telluride /T. Alper, G. Saunders // J. Phys. Chem. Solids. 1967. V.28, N 9. P. 1637-1642.
- 120. Великов Ю.Х. Упругие постоянные и характеристики динамики решетки некоторых соединений А²В⁶ / Ю.Х. Великов, А.П. Русаков //ФТТ. – 1971. – Т.13, №4. – С.1157-1162.
- 121. Русаков А.П. Упругие постоянные HgTe / А.П. Русаков //ФТТ. 1971. Т.13, №2. – С.623-626.
- 122. Rode D.L. Electron transport in zinc-blende semimetals /D.L. Rode, J.D. Wiley// Phys. Stat. Sol.(b). 1973. V.56, N 2. P. 699-706.
- 123. Landolt- Bornstein Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. (New Series). V. III/11. – Berlin: Springer Verlag, 1984.
- 124. Berlincourt D. Electroelastic properties of the sulfides, selenides and tellurides of zinc and cadmium /D. Berlincourt, H. Jaffe, L.R. Shiozawa // Phys. Rev. -1963. - V.129, №3. - P.1009-1017.
- 125. Dornhaus R. The properties and applications of the Hg_{1-x}Cd_xTe alloy system /R. Dornhaus, G. Nimtz // Springer Tracts Mod. Phys. 1983. P.166.
- 126. Electron scattering in Cd_xHg_{1-x}Te /J.J. Dubowski, T. Dietl, W. Szymanska [et al.] //J. Phys. Chem. Solids. 1981. -V. 42. P.351-362.
- 127. Scott W. Electron mobility in Hg_{1-x}Cd_xTe / W. Scott //J. Appl. Phys. -1972. V.43, N 3.-P.1055-1062.
- 128. Segall B. Electrical properties of n-type CdTe /B. Segall, M.R. Lorenz, R.E. Halsted // Phys. Rev. 1963. V.129, N 6. P.2471-2481.
- 129. Szymanska W. Electron scattering and transport phenomena in small-gap zincblende semiconductors /W. Szymanska, T. Dietl// J. Phys. Chem. Solids.- 1978.-V.39. - P.1025-1040.
- 130. Гальваномагнитные свойства теллурида ртути/ В.И. Иванов-Омский, Б.Т. Коломиец, А.А. Малькова [и др.]// Phys.Stat. Sol. 1965. V.8. Р. 613-618.
- 131. Scott W. Electrical and far-infrared optical properties of p-type Hg_{1-x}Cd_xTe / W. Scott, E.L. Stelzer, R.H. Hager //J. Appl. Phys.-1976.–V.47,N4.-P.1408-1414.

- 132. Gold M.C. /M.C .Gold,D.A. Nelson// J. Vac. Sci. Technol.-1986.-V.A4.-P.2040-2045.
- 133. Meyer J.R. Majority-carrier mobility in p-type Hg_{1-x}Cd_xTe/J.R. Meyer, F.J. Bartoli, C.A. Hoffman//J. Vac. Sci. Technol.-1987. V.A5, N 5. P. 3035-3039.
- 134. Малик О.П., Собчук І.С. Моделювання локальної взаємодії важких дірок з потенціалом дефектів в HgTe / О.П. Малик // Вісник НУ «Львівська політехніка». Сер. «Фізико-математичні науки». - 2007. - № .601. - С. 78-81.
- 135. 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.
- 136. 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),18-21 June 2007.-Book of Abstracts.-Arlington, 2007.- P.38.
- 137. 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.
- 138. 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.
- 139. 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.
- 140. Малик О.П. Взаємодія важких дірок з близькодіючим потенціалом дефектів кристалічної гратки в телуриді ртуті/ О.П. Малик // ІІІ Українська наукова конференція з фізики напівпровідників, 17-22 червня 2007. -Збірник тез доповідей.- Одеса, 2007. - С. 408.

- 141. Kalb A. The miscibility gap of the system CdSe-HgSe /A. Kalb, V. Leute //Phys. Stat. Sol. (a). 1971. V.5, N 3. P. K199-K201.
- 142. Realna struktura polprzewodnikowych krysztalow zwiazkow rteci w swietle badan rentgenowskich i elektrono-mikroskopowych /J. Auleytner, J. Bak, Z. Furmanik [et al.] // Postepy Fizyki. - 1975. - V.26. - P. 487-510.
- 143. Slodowy P. A. The dependence of the energy gap on the composition in the mixed crystals CdHgSe /P.A. Slodowy, W. Giriat // Phys. Stat. Sol. (b).- 1971. V. 48, N 2. P. 463-466.
- 144. Stankiewicz J. Shubnikov-de Haas Oscillations in Cd_xHg_{1-x}Se /J. Stankiewicz,
 W. Giriat, W. Dobrowolski//Phys. Stat. Sol.(b).-1974.–V.61,N1.–P.267-276.
- 145. Galazka R.R. /R.R. Galazka , W.M. Becker, D.G. Seiler // Physics of semimetals and narrow-gap semiconductors. New York: Pergamon Press, 1975. P. 481.
- 146. Temperature-dependent electrical properties of HgSe /S.L. Lehoczky, J.G. Broerman, D.A. Nelson [et al.]//Phys. Rev.B.–1974.- V.9, N 4.– P. 1598 1620.
- 147. Devlin S.S. Transport properties /S.S. Devlin // Physics and Chemistry of II-VI Compounds. - North Holland, Amsterdam. - 1967. – P. 418-464.
- 148. Dietl T. Temperature dependence of the band structure parameters in HgSe from thermomagnetic measurements /T. Dietl, A. Jdrzejczak // Phys. Stat. Sol. (b). – 1975. – V. 71, N 1. – P. K39-K44.
- 149. Dietl T. Electron scattering in HgSe /T. Dietl, W. Szymanska // J. Phys. Chem. Solids. – 1978. – V. 39. – P. 1041-1057.
- 150. Iwanowski R.J. Electron mobility and electron scattering in Cd_xHg_{1-x}Se mixed crystals /R.J. Iwanowski,T. Dietl, W. Szymanska // J. Phys. Chem. Solids. 1978. V. 39. P. 1059-1070.
- 151. Electron transport in the Hg_{1-x}Cd_xSe alloy system /D. Nelson, J.G. Broerman,
 C.J. Summers [et al.]//Phys. Rev. B.–1978.–V.18, N4.– P.1658-1672 .
- 152. Manabe A. Infrared Lattice Reflection Spectra of II-VI Compounds/A. Manabe, A. Mitsiushi, H. Yoshinaga//Japan.J.Appl.Phys.-1967.-V.6,N5.-P.593-600.

- 153. Gorska M. Application of the random-element isodisplacement model to longwavelength optical phonons in CdSe_xTe_{1-x} mixed crystals /M. Gorska, W. Nazarewicz // Phys. Stat. Sol. (b). – 1974. – V. 65, N 1. – P. 193-202.
- 154. Manabe A. Far-infrared reflection spectra of HgSe /A. Manabe, A. Mitsiushi //Solid State Comm. 1975. V. 16, N 6. P. 743-745.
- 155. Seiler D.G. Effect of uniaxial stress on Shubnikov-de Haas oscillations in HgSe
 /D.G. Seiler, R.L. Hathcox// Phys. Rev. B.– 1974. V.9, N 2. P.648-657.
- 156. Rode D. L. Electron mobility in II-VI semiconductors /D.L. Rode //Phys. Rev.
 B. 1970. V.2, N 10. P. 4036 4044.
- 157. Lehoczky A. Elastic constants of mercury selenide /A. Lehoczky, D. A. Nelson,
 C. R. Whitsett // Phys. Rev. 1969. V. 188, N. 3 P. 1069 1073.
- 158. Упругие постоянные селенида ртути/О.М. Красильни-ков, Ю.Х. Векилов,
 В.М. Безборова [и др.]//ФТП.–1970.–Т.4,№11–Р.2122-2127.
- 159. Kumazaki K. Elastic constants and ionicity of semimetallic HgSe /K. Kumazaki
 // Phys. Stat. Sol. (a). 1975. V.29, N 1. K55-K58.
- 160. Yee S. Current saturation and oscillation in CdSe/S Yee, A. Kawai, M. L. Neudorfer // Solid-State Electronics. 1969. V. 12, N 3. P. 191-199.
- 161. Malyk O.P. The local electron interaction with crystal lattice defects in CdHgSe solid solution /O.P. Malyk // Phys. Stat. Sol. (c).- 2009.- V.6, N S1. P.S86-S89.
- 162. 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.
- 163. 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.
- 164. Semiconductors for Room Temperature Nuclear Detector Applications /R.B.
 James, T.E. Schlesinger, J. Lund [et al.] // Semiconductors and Semimetals. –
 Acad. Press., 1995. V. 43. P. 335.

- 165. Triboulet R. Growth and characterization of the complete Cd_{1-x}Zn_xTe alloy series/R. Triboulet, G. Neu, B. Fotouhi//J. Cryst. Growth.–1983.–V.65.– P.262-269.
- 166. Eisen Y. CdTe and CdZnTe materials for room-temperature X-ray and gamma ray detectors /Y. Eisen, A. Shor // J. Cryst. Growth.- 1998. – V. 184-185, N 2. – P. 1302-1312.
- 167. Gamal G.A. Transport properties of Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te crystals /G.A. Gamal, M. Abou Zied, A.A. Ebnalwaled // Physica B. – 2007. – V. 393. – P. 285-291.
- 168. X-ray spectroscopy and charge transport properties of CdZnTe grown by the vertical Bridgman method /M.C. Veale, P.J. Sellin, A. Lohstroh [et al.]// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. – 2007.– V.576. – P. 90-94.
- 169. Charge-carrier mobilities in Cd_{0.8}Zn_{0.2}Te single crystals used as nuclear radiation detectors /Z. Burshtein, H. N. Jayatirtha, A. Burger [et al.] // Appl. Phys. Lett. 1993. V.63, N 1. P.102-105.
- 170. Радауцан С.И. Некоторые электрические и оптические свойства монокристаллов твердых растворов системы Zn_xCd_{1-x}Te/ С.И. Радауцан, А.Е. Цуркан, О.Г. Максимова // Сложные полупроводники и их физические свойства. – Кишинев: Штииница, 1971. - С.12-25.
- 171. Спектры электроотражения монокристаллов Zn_xCd_{1-x}Te/B.A. Тягий, Снитко О.В., Бондаренко В.Н. [и др.]// ФТТ.– 1974. Т.16. –С.1373.
- 172. Гросс Е.Ф. / Е.Ф.Гросс, Е.М. Григорович, В.Г. Средин [и др.] // ФТТ. –
 1970. Т.12, №10. С. 2913-2917.
- 173. Montegu B. Spin-orbit splitting in Mn_xZn_{1-x}Te alloys /B. Montegu, A. Laugier,
 D. Barbier //Phys. Rev. B. 1979. V. 19, N 4. P.1920-1925.
- 174. Yi-Gao Sha Intrinsic carrier concentration and electron effective mass in Hg_{1-x}Zn_xTe / Yi-Gao Sha, Ching-Hua Su, S. L. Lehoczky // J. Appl. Phys. 1997. V.81, N 5. P.2245-2249.
- 175. Roth V.L. Crystallography/ V.L. Roth // Physics and Chemistry of II-VI Compounds. North Holland, Amsterdam. 1967. P. 97-134.

- 176. Marple D.T.F. Refractive Index of ZnSe, ZnTe, and CdTe/ D.T.F. Marple // J. Appl. Phys. 1964. V.35, N 3. P.539 -542.
- 177. Potz W. Theory of optical-phonon deformation potentials in tetrahedral semiconductors /W. Potz, P. Vogl // Phys. Rev.B. - 1981. - V.24, N 4.- P. 2025-2037.
- 178. Calleja J.M. Raman scattering efficiencies of some zincblende and fluorite-type materials/ J.M. Calleja, H. Vogt, M. Cardona // Phyl. Mag. - 1982. - V. A45, N 2. - P. 239-254.
- 179. Photoelastic trends for amorphous and crystalline solids of different network dimensionality / B.A. Weinstein, R. Zallen, M.L. Slade [et al.] // Phys. Rev.B . 1981. V.24, N 8. P. 4652-4665.
- 180. Spin exchange in excitions, the quasicubic model and deformation potentials in II-VI semiconductors/ D.W. Langer, R.N. Euwema, K. Era [et al.] // Phys. Rev.B. - 1970. - V.2, N 10. - P. 4005-4022.
- 181. Meseguer F. Resonant Raman scattering in CuCl in the region of the edge excitions /F. Meseguer, J.C. Merle, M. Cardona // Solid State Commun. - 1984. -V. 50, N 8. - P.709-712.
- 182. Blacha A. Deformation potential of k=0 states of tetrahedral semiconductors/A. Blacha, H. Presting, M. Cardona// Phys. Stat. Sol.(b).-1984.-V.126,N 1.-P.11-36.
- 183. Yamada S. On the electrical and optical properties of p-type cadmium telluride crystals /S. Yamada // J. Phys. Soc. Japan. 1960. –V. 15, N 11. P. 1940-1944.
- 184. Aven M. Carrier mobility and shallow impurity states in ZnSe and ZnTe /M. Aven, B. Segall // Phys. Rev. 1963. V.130, N 1. –P. 81-91.
- 185. 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. 1-4.
- 186. 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.

- 187. 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-ХІІ), 18-23 травня 2009. - Матеріали конференції.- Івано-Франківськ, 2009. - Т. 2. - С. 219-221.
- 188. 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.
- 189. Growth and characterization of bulk HgZnTe crystals /R. Triboulet, A. Lasbley,
 B. Toulouse [et al.] // J. Cryst. Growth. 1986. V. 79. 695-700.
- 190. Jozwikowski K. Intrinsic carrier concentrations and effective masses in the potential infrared detector material Hg_{1-x}Zn_xTe /K. Jozwikowski, A. Rogalski // Infrared Phys.- 1988. – V. 28, N 2. – P. 101-107.
- 191. P-to-n conversion in Hg_{1-x}Zn_xTe /S. Rolland, K. Karrari, R. Granger [et al.] // Semicond. Sci. Technol. – 1999. – V. 14. – P. 335-340.
- 192. Granger R. A prediction of the electron mobility in medium gap HgCdTe and HgZnTe/ R. Granger, C.M. Pelletier//J. Cryst. Growth.-1994.-V.138.-P.486-492.
- 193. Rogalski A. Hg_{1-x}Zn_xTe as a potential infrared detector material/ A. Rogalski // Prog. Quant. Electr. – 1989. – V.13. – P.299-353.
- 194. Band gap in Hg_{1-x}Zn_xTe solid solutions /B. Toulouse, R. Granger, S. Rolland [et al.] // J. Physique. 1987. V.48, N 2. P. 247-251.
- 195. Mechanisms of current carrier scattering in Zn_xHg_{1-x}Se/ N.P. Gavaleshko , P.N. Gorley, V.V. Khomyak [et al.]// Phys. Stat. Sol.(b)-1980.-V.98, N 2. -P.463-471.
- 196. Theis D. Wavelength-modulated reflectivity spectra of ZnSe and ZnS from 2.5 to 8 eV /D. Theis // Phys. Stat. Sol. (b). 1977. V.79, N 1. P.125-130.
- 197. Optical absorption in doped and undoped ZnSe crystals/J. Baillon, J. Daunay, P. Bugnet [et al.]//J. Phys. Chem. Solids.- 1980.- V.41,N 3.- P.295-300.

- 198. Hermann C. k-p perturbation theory in III-V compounds and alloys: a reexamination/C. Hermann, C. Weissbuch// Phys. Rev.B. - 1977. - V.15, N 2. -P.823-833.
- 199. Cardona M. Fundamental Reflectivity Spectrum of Semiconductors with Zinc-Blende Structure/M. Cardona//J. Appl. Phys.-1961. -V.32, N 10. - P.2151-2155.
- 200. Sondergeld M. Two-photon absorption by envelope-hole coupled exciton states in cubic ZnSe /M. Sondergeld//Phys. Stat. Sol.(b).- 1977.-V.81, N1. P.253-262.
- 201. Gust W.H. Shock induced transition stresses for zinc sulfide and zinc selenide /W.H. Gust // J. Appl. Phys. 1982. V. 53, N 7. P. 4843-4846.
- 202. House G.L. High pressure studies of interimpurity (donor-acceptor) luminescence in ZnS and ZnSe phosphors /G.L. House, H.G. Drickamer // J. Chem. Phys. 1977. -V.67,N 7. P.3221-3226.
- 203. Hadni A. Spectres d'absorption et ee reflaxion, dans e'infrarouge contain, de ZnSe, ZnTe et CdSe a basse temperature /A. Hadni, J. Claudel, P. Strimer // Phys. Stat. Sol. 1968. V. 26, N 1. P. 241-252.
- 204. Irving J.C. Phonon Dispersion in ZnSe /J.C. Irving, J. LaCombe // Can. J. Phys. -1972. - V.50. - P.2596- 2604.
- 205. Miles P.A. Temperature dependence of multiphonon absorption in zinc selenide /P.A. Miles // Appl. Opt. 1977. V.16, N 11. P. 2891- 2896.
- 206. Кусков В.И. Упругие постоянные ZnSe / В.И. Кусков, А.П. Русаков, А.М. Менцер // ФТТ. 1972. Т. 14, № 7. С.1881-1883.
- 207. Galvanomagnetic phenomena in Zn_xHg_{1-x}Se /G.A. Potapov, A. I. Ponomarev, N.
 P. Gavaleshko [et al.] // Fiz. Tekh. Poluprov. 1979 . V.13, N 5. P. 881-886.
- 208. 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.
- 209. 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.

- 210. 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.
- 211. 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.
- 212. 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.
- 213. 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.
- 214. 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.
- 215. Growth of high optical and electrical quality GaN layers using low-pressure metalorganic chemical vapor deposition / M.A. Khan, J.N. Kuznia, J.M.Van Hove [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 1991. – V.58.– P.526-527.
- 216. Strite S. GaN, AlN, and InN: a review/ S. Strite, H. Morkoc // J. Vac. Sci. Technol. B.– 1992.–V.10.– P. 1237-1266.
- 217. Nakamura S. In situ monitoring and Hall measurements of GaN grown with GaN buffer layers/ S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh // J. Appl. Phys.– 1992.– V.71.– P. 5543-5549.

- 218. Nakamura S. Si- and Ge-doped GaN films grown with GaN buffer layers/ S. Nakamura, T. Mukai, M. Senoh // Jpn. J. Appl. Phys.– 1992.– V.31.–P. 2883-2888.
- 219. Activation energies of Si donors in GaN/ W. Gotz, N.M. Johnson, C. Chen [et al.] //Appl. Phys. Lett.- 1996.-V.68.-P. 3144-3146.
- 220. Gaskill D.K. Electrical transport properties of AlN, GaN and AlGaN /D.K. Gaskill, L.B. Rowland, K. Doverspike // Properties of group III nitrides, EMIS datareviews series.–London, 1995.–V.11– P.101-116.
- 221. Growth by molecular beam epitaxy and electrical characterization of Si-doped zinc blende GaN films deposited on β-SiC coated (001) Si substrates / J.G. Kim, A.C. Frenkel, H. Liu [et al.] //Appl. Phys. Lett.– 1994.–V.65.–P. 91-93.
- 222. Levinshtein M.E. Properties of advanced semiconductor materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe/ M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, M.S. Shur – New York: John Wiley & Sons Inc., 2001.
- 223. Efficient p-type doping of GaN films by plasma-assisted molecular beam epitaxy / A. Bhattacharyya, W. Li, J. Cabalu [et al.] // Appl. Phys. Lett. 2004. V.85. P. 4956-4958.
- 224. p-type gallium nitride by reactive ion-beam molecular beam epitaxy with ion implantation, diffusion, or coevaporation of Mg / M. Rubin, N. Newman, J. S. Chan [et al.] // Appl. Phys. Lett.– 1994.–V.64.– P.64-66.
- 225. Heavy doping effects in Mg-doped GaN / P. Kozodoy, Huili Xing, S. P. DenBaars [et al.]// J. Appl. Phys.- 2000.-V. 87.- P.1832-1835.
- 226. Look D.C. Dislocation scattering in GaN / D. C. Look, J. R. Sizelove// Phys. Rev. Lett.- 1999.-V. 82.-P.1237-1240.
- 227. Look D.C. Predicted maximum mobility in bulk GaN / D. C. Look, J. R. Sizelove // Appl. Phys. Lett. 2001. V.79. P.1133-1135.
- 228. Aydogu S. The investigation of mole fraction dependence of mobility for In_xGa_{1-x}N alloy / S. Aydogu, O. Ozbas // Mater. Sci. Semicond. Proc. 2005.–V.8.– P. 536-539.

- 229. Dhar S. Low field electron mobility in GaN / S. Dhar, S. Ghosh // J. Appl. Phys.- 1999.-V. 86 P. 2668-2676.
- 230. Accurate mobility and carrier concentration analysis for GaN / D.C. Look, J.R. Sizelove, S. Keller [et al.] // Solid State Commun.– 1997.–V.102.– P. 297-300.
- 231. Chin V.W.L. Alloy-scattering dependence of electron mobility in the ternary gallium, indium, and aluminum nitrides / V.W.L. Chin, Bing Zhou, T.L. Tansley [et al.] // J. Appl. Phys.– 1995.– V.77.– P. 6064-6066.
- 232. Chin V.W.L. Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides / V.
 W. L. Chin, T. L. Tansley, T. Osotchan // J. Appl. Phys.– 1994.–V. 75.– P. 7365-7372.
- 233. Electron transport characteristics of GaN for high temperature device modeling /
 J. D. Albrecht, R. P. Wang, P. P. Ruden [et al.] // J. Appl. Phys.– 1998.–V. 83.–
 P. 4777-4781.
- 234. Malyk O.P. Electron scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in gallium nitride /O.P. Malyk // Phys. Stat. Sol. (c) .- 2012.- V.9 , N 3-4.
 P. 842-846.
- 235. 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.
- 236. 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.
- 237. 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.-New York, USA. - P. 5.
- 238. 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.

- 239. Chtchekine D.G. Temperature-varied photoluminescence and magnetospectroscopy study of near-band-edge emissions in GaN / D.G. Chtchekine, Z.C. Feng, S.J. Chua [et al.] // Phys. Rev. B.– 2001.– V. 63. P. 125211.
- 240. Shields P.A. Free carrier effects in gallium nitride epilayers: the valence band dispersion / P.A. Shields, R.J. Nicholas, F.M. Peeters [et al.] // Phys. Rev. B.– 2001.– V.64.– P. R081203.
- 241. Suzuki M. First-principles calculation of effective mass parameters of gallium nitride / M. Suzuki, T. Uenoyama // Jpn. J. Appl. Phys..–1995.–Part 1,V.34.–P. 3442-3446.
- 242. Kasic A. Free-carrier and phonon properties of *n* and *p*-type hexagonal GaN films measured by infrared ellipsometry / A. Kasic, M. Schubert, S. Einfeldt [et al.] // Phys. Rev. B.– 2000.– V. 62.–P. 7365-7377.
- 243. Im J.S. Radiative carrier lifetime, momentum matrix element, and hole effective mass in GaN / J.S. Im, A. Moritz, F. Steuber [et al.] // Appl. Phys. Lett.– 1997.– V. 70.– P. 631-633.
- 244. Zook J.D. Piezoelectric scattering in semiconductors / J.D. Zook // Phys. Rev.-1964.-V. 136.- P. A869-A878.
- 245. Mohammad S.N. Progress and prospects of group-III nitride semiconductors / S.
 N. Mohammad, H. Morkoc // Prog. Quant. Electr. 1996. V. 20. P. 361-525.
- 246. Bechstedt F. Energy gap and optical properties of In_xGa_{1-x}N / F. Bechstedt, J. Furthmuller, M. Ferhat // Phys. Status Solidi A.– 2003.–V.195.– P. 628-633.
- 247. Morkoc H. Nitride semiconductors and devices / H. Morkoc Berlin: Springer, 1999.
- 248. Malyk O.P. Charge carrier mobility in gallium nitride /O.P. Malyk // Diamond Relat. Mater. 2012. V.23 , N 3 . P.23-27.

- 249. Look D. C. Production and annealing of electron irradiation damage in ZnO /D.
 C. Look, D. C. Reynolds, J. W. Hemski, R. L. Jones, J. R. Sizelove// Appl. Phys.
 Lett. 1999.– V.75, N 6. P.811-813.
- 250. Polyakov A. Y. Proton implantation effects on electrical and recombination properties of undoped ZnO / A. Y. Polyakov, N. B. Smirnov, A. V. Govorkov, E. A. Kozhukhova, V. I. Vdovin, K. Ip, M. E. Overberg, Y. W. Heo, D. P. Norton, S. J. Pearton, J. M. Zavada, V. A. Dravin // J. Appl. Phys.– 2003.– V. 94, N 5.– P.2895-2900.
- 251. Kucheyev S. O. Ion-beam-produced structural defects in ZnO/ S. O. Kucheyev,
 J. S. Williams, C. Jagadish, J. Zou, C. Evans, A. J.Nelson, A. V. Hamza// Phys.
 Rev. B.-2003.–V. 67,.–P. 094115.
- 252. Gu X. GaN epitaxy on thermally treated *c*-plane bulk ZnO substrates with O and Zn faces/ X. Gu, M. A. Reshchikov, A. Teke, D. Johnstone, H. Morkoc, B. Nemeth, J. Nause// Appl. Phys. Lett.– 2004.–V. 84, N 13.–P.2268-2270.
- 253. Hamdani F. Microstructure and optical properties of epitaxial GaN on ZnO (0001) grown by reactive molecular beam epitaxy/ F. Hamdani, M. Yeadon, D. J. Smith, H. Tang, W. Kim, A. Salvador, A. E. Botchkarev, J. M. Gibson, A. Y. Polyakov, M. Skowronski, H. Morkoc// J. Appl. Phys.– 1998.–V. 83, N 2.– P.983-990.
- 254. Dietl T. Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors / T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand// Science –2000.– V.287.– P.1019-1022.
- 255. Pearton S.J. Wide bandgap GaN-based semiconductors for spintronics / S. J. Pearton, C. R. Abernathy, G. T. Thaler, R. M. Frazier, D. P. Norton, F. Ren, Y. D. Park, J. M. Zavada, I. A. Buyanova, W. M. Chen, A. F. Hebard// J. Phys.: Condens. Matter –2004.– V.16. P.R209-R245.
- 256. Pearton S.J. Dilute magnetic semiconducting oxides / S. J. Pearton, W. H. Heo,
 M. Ivill, D. P. Norton, T. Steiner// Semicond. Sci. Technol. 2004. V.19, N
 10.– P. R59-R74.

- 257. Hutson A.R. Hall Effect Studies of Doped Zinc Oxide Single Crystals / A.R. Hutson // Phys. Rev. –1957.– V.108.– P.222–230.
- 258. Hutson A.R. Electronic properties of ZnO / A.R. Hutson // J. Phys. Chem. Solids.- 1959.-V.8.- P.467-472.
- 259. Look D.C. Electrical properties of bulk ZnO / D.C. Look, D.C. Reynolds, J.R. Sizelove, R.L. Jones, C.W. Litton, G. Cantwell, W.C. Harsch // Solid State Commun.–1998.– V.105.– P.399-401.
- 260. Edahiro T. Formation of two-dimensional electron gas and the magnetotransport behavior of ZnMnO/ZnO heterostructure/ T. Edahiro, N. Fujimura, T. Ito // J. Appl. Phys.-2003.- V.93, N 10.- P.7673-7675.
- 261. Kaidashev E.M. High electron mobility of epitaxial ZnO thin films on c-plane sapphire grown by multistep pulsed-laser deposition / E. M. Kaidashev, M. Lorenz, H. von Wenckstern, A. Rahm, H.-C. Semmelhack, K.-H. Han, G. Benndorf, C. Bundesmann, H. Hochmuth, M. Grundmann // Appl. Phys.Lett. – 2003.– V.82, N 22.– P.3901-3903.
- 262. Miyamoto K. Effects of ZnO/MgO Double Buffer Layers on Structural Quality and Electron Mobility of ZnO Epitaxial Films Grown on *c*-Plane Sapphire / K. Miyamoto, M. Sano, H. Kato, T. Yao // Jpn. J. Appl. Phys.–2002.– V.41.– P.L1203-L1205.
- 263. Kato H. Effect of O/Zn Flux Ratio on Crystalline Quality of ZnO Films Grown by Plasma-Assisted Molecular Beam Epitaxy / H. Kato, M. Sano, K. Miyamoto, T. Yao // Jpn. J. Appl. Phys.–2003.– V.42.–P.2241-2244.
- 264. Miyamoto K. High-electron-mobility ZnO epilayers grown by plasma-assisted molecular beam epitaxy / K. Miyamoto, M. Sano, H. Kato, T. Yao // J. Cryst. Growth –2004.– V.265.–P. 34-40.
- 265. Makino T. Electron transport in ZnO thin films / T. Makino, Y. Segawa, A. Tsukazaki, A. Ohtomo, M. Kawasaki // Appl. Phys. Lett.-2005.- V.87.-P. 022101.

- 266. Albrecht J.D. High field electron transport properties of bulk ZnO / J. D. Albrecht, P. P. Ruden, S. Limpijumnong, W. R. L. Lambrecht, K. F. Brennan // J. Appl. Phys.– V.86.–P. 6864-6867.
- 267. Geurts J. Crystal Structure, Chemical Binding, and Lattice Properties / J. Geurts
 // Zinc Oxide. From Fundamental Properties Towards Novel Applications.
 Springer Series in Materials Science.–Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg , 2010
 V. 120, Chapter. 2–P.7-38.
- 268. Coleman V.A. Basic Properties and Applications of ZnO / V.A. Coleman, C. Jagadish // Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures Processing, Properties and Applications, edited by C. Jagadish and S. Pearton. Elsevier Ltd., 2006 Chapter 1.– P.1-20.
- 269. Baer W. S. Faraday Rotation in ZnO: Determination of the electron effective mass / W. S. Baer // Phys. Rev. –1967.– V.**154.–** P.785-788.
- 270. Bateman T.B. Elastic moduli of single-crystal zinc oxide / T. B. Bateman // J. Appl. Phys.–1962.–V. 33.– P.3309-3311.
- 271. Cusco K. Temperature dependence of Raman scattering in ZnO / R. Cusco, E. Alarcon-Llado, J. Ibanez, L. Artus , J. Jimenez, B. Wang, M. J. Callahan // Phys. Rev. B–2007.– V.75.– P.165202.
- 272. Carlotti G. Acoustic investigation of the elastic properties of ZnO films / G. Carlotti, G. Socino, A. Petri, E. Verona // Appl. Phys. Lett. -1987.-V. 51.- P.1889 -1891.
- 273. 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.– P. 1372-1379.
- 274. 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. 9. Poster 111.
- 275. О.Р. Malyk. Electron mobility in zinc oxide /O.P. Malyk// VIII міжнародна школа-конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників», 25-28 червня 2013. -. Тези доповідей.- Дрогобич, Україна. - С. 94.

- 276. 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.
- 277. 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.
- 278. 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.
- 279. Агринская Н.В. О механизме рассеяния носителей тока в кристаллах теллурида кадмия, легированных хлором / Н.В. Агринская, М.В. Алексеенко, О.А. Матвеев. // ФТП.– 1981.– Т.5.–С.1029-1031.
- 280. 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.
- 281. Meysing D.M. Properties of reactively sputtered oxygenated cadmium sulfide (CdS:O) and their impact on CdTe solar cell performance./D.M. Meysing, C.A. Wolden, M.M. Griffith [et al.]//J. Vac.Sci. Technol. A.-2015.- V. 33.- P. 021203.
- 282. Moualkia H. Influence of the film thickness on the photovoltaic properties of chemically deposited CdS thin films: Application to the photodegradation of orange II. /H. Moualkia, G.Rekhila, M.Izerrouken [et al.] //Mat. Sci. Semicon. Proc. -2014.-V.21.- P.186-193.
- 283. Podor B. Electron concentration and mobility in CdS single crystals./ B. Podor, J. Balazs, M. Harsy.// Phys. Status Solidi A.-1971.- V.8.-P. 613-624.
- 284. Boone J.L. Electrical properties of pure CdS./ J.L. Boone ,G. Cantwell, J.Appl. Phys. -1985.-V.57.-P. 1171-1175.

- 285. Sova H.On the mechanism of the pressure-induced wurtzite- to NaCl-type phase transition in CdS:an X-ray diffraction study./Sova H.//SolidState Sci.-2005.-V. 7.-P.73-78.
- 286. Imada A. Photoreflectance spectroscopy of wurtzite CdS./A. Imada, S. Ozaki S. Adachi, J. Appl. Phys.- 2002.-V.92.-P.1793.
- 287. C.D. Hodgman, editor //Handbook of Chemistry and Physics.-1962.-Chemical Rubber Publishing Company Co., Cleveland, Ohio.
- 288. Abrikosov N.Kh. et al.//Semiconducting II-VI, IV-VI and V-VI Compounds.-1969.-Plenum, New York.- P.27.
- 289. Wicksted J. Resonant Brillouin scattering in CdS. I. Experiment.// . Wicksted et al.// Phys. Rev. B.-1984.-V.29.-P.3350.
- 290. Karazhanov S. Zh. Ab initio studies of the band parameters of III–V and II–VI zinc-blende semiconductors./ S. Zh. Karazhanov, L. C. Lew Yan Voon.//Semi-conductors.-2005.-V.39.-P.161-173.
- 291. Goede O. Fine structure of P excitons in CuBr./O. Goede, D. Hennig, L. John.// Phys. Status Solidi B.-1979.-V. 96.- P.189-200.
- 292. Debernardi A. Lattice dynamics of wurtzite CdS: Neutron scattering and abinitio calculations./A. Debernardi et al.// Solid State Commun.-1997.-V.103.-297-301.
- 293. Kobiakov I.B. Elastic, piezoelectric and dielectric properties of ZnO and CdS single crystals in a wide range of temperatures. /I.B. Kobiakov//Solid State Commun.-1980.-V.35.- P.305-310.
- 294. 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.
- 295. 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.
- 296. 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.

- 297. 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.
- 298. Look D.C. Donor and acceptor concentrations in degenerate InN./D. C. Look et al.// Appl. Phys. Lett. 2002. V. 80. P. 258-260.
- 299. Ikuta K. / K. Ikuta, Y. Inoue, O. Takai. // Thin Solid Films.-1998.- V.334.-P.49-53.
- 300. Kasic A. Effective electron mass and phonon modes in *n*-type hexagonal InN. /A. Kasic et al.// Phys. Rev. B.–2002.–V.65.– 115206.
- 301. Jain S.C. III–nitrides: Growth, characterization, and properties./ Jain, M. Willander, J. Narayan, R.Van Overstraeten.//J. Appl. Phys.–2000.–V. 87.– P.965-1006.
- 302. Matsuoka T.Optical bandgap energy of wurtzite InN./T. Matsuoka, H. Okamoto,M. Nakao, H. Harima, E. Kurimoto.//Appl. Phys. Lett.-2002.- 81.-P.1246-1248.
- 303. O'Leary S.K. Electron transport in wurtzite indium nitride. / S. K. O'Leary et al. // J. Appl. Phys.–1998.– V.83.– P.826-829.
- 304. Nag B.R. Electron mobility in indium nitride./B.R. Nag.//J.Cryst.Growth. 2004.–V.269.–P.35-40.
- 305. Thakur J.S. Temperature dependence of mobility and carrier density in InN films. / J. S. Thakur et al. // J. Appl. Phys.–2006.–V.99.– 023504.
- 306. Chin V.W.L. Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrldes./ V.W.L. Chin, T.L.Tansley, T. Osotchan.// J.Appl.Phys.-1994.-V.75.-P.7365-7372.
- 307. Wu J. Temperature dependence of the fundamental band gap of InN. /J. Wu et al.// J. Appl. Phys.-2003.-V.94.- P.4457-4460.
- 308. H. Morkoc.// Nitride semiconductors and devices.-1999,-Berlin, Heidelberg, New York. Springer.

- 309. Kaczmarczyk G. Lattice dynamics of hexagonal and cubic InN: Ramanscattering experiments and calculations./G. Kaczmarczyk et al.// Appl. Phys. Lett.-2000.-V.76-P.2122.
- 310. Vurgaftmana I. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. /I. Vurgaftmana, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan.//J. Appl. Phys.-2003.-V.89.-P. 5815.
- 311. Butcher K.S.A. Nitrogen-rich indium nitride. /K. S. A. Butcher et al.// J. Appl. Phys.-2004.-V.95.-P. 6124.
- 312. Малик О. Р. 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.
- 313. 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.
- 314. 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.
- 315. Rogalski A. Infrared detectors: an overview./A. Rogalski // Infrared Physics & Technology.-2002.-V. 43.- P.187–210.
- 316. Fang Z.M. Photoluminescence of InSb, InAs, and InAsSb grown by organometallic vapor phase epitaxy./ Z.M. Fang et al.// J. Appl. Phys.-1990.-V.67.-P.7034.
- 317. Landolt- Bornstein Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. V.17a.-Berlin, Heidelberg, New-York: Springer Verlag.- 1982.
- 318. Sari S.O. Landau transitions at higher gaps in InSb and GaSb. /S.O. Sari//Solid State Commun.-1973.-V.12.- P.705-708.
- 319. Straumanis M.E. Lattice Parameters, Thermal Expansion Coefficients, Phase Width, and Perfection of the Structure of GaSb and InSb. /M.E Straumanis, C.D. Kim.// J. Appl. Phys.- 1965.-V.36.-P. 3822.

- 320. Rode D.L. Electron Transport in InSb, InAs, and InP./D.L. Rode. //Phys. Rev. B.-1971.-V.3.-P.3287.
- 321. Drabble J.R. The third-order elastic constants of indium antimonide. /J. R. Drabble, A. J. Brammer. //Proc. Phys.Soc.- 1967.-V. 91.-P. 959.
- 322. Aoki K. Dependence of Raman frequencies and scattering intensities on pressure in GaSb, InAs, and InSb semiconductors. /K. Aoki, E. Anastassakis, M. Cardona.// Phys. Rev.B.- 1984.-V.30.-P. 681.
- 323. Arlt G. Piezoelectricity in iii-v compounds with a phenomenological analysis of the piezoelectric effect (pages 323–330). /G. Arlt, P. Quadflieg.// Phys. Status Solidi B.- 1968.-V. 25.- P.323-330.
- 324. Яременко Н.Г, Электропроводность и эффект Холла в сильно компенсированном n-InSb при низких температурах./Н.Г. Яременко, В.Т. Потапов, В.С. Ивлева.//ФТП.-1972.-Т.6.-С.1238-1247.
- 325. Hrostowski H.J. Hall ESect and Conductivity of InSb. /H.J. Hrostowski et al.// Phys. Rev.- 1955.- V.100.- P.1672 -1676.
- 326. 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.
- 327. 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.
- 328. 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: Alternative semiconductor integration in Si microelectronics: materials, tech-niques & applications.-16-20 September 2013.-Warsaw, Poland.-Program.-Abstract A9.

- 329. Malyk O.P. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on first-principle wave function. / O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk // Comp. Mater. Sci. – 2017. – V. 139. – P. 387–394.
- 330. Kim J.G. Growth by molecular beam epitaxy and electrical characterization of Si-doped zinc blende GaN films deposited on PSiC coated (001) Si substrates./J.
 G. Kim, A. C. Frenkel, H. Liu, R. M. Park// Appl. Phys. Lett. –1994.– V.65.– P. 91-93.
- 331. 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.
ДОДАТОК Список публікацій здобувача

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

- 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.
- 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.
- 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.
- 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_xHg₁₋ _xTe/ 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.
- 16.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,N 3-4.-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., Syrotyuk S.V. New scheme for calculating the kinetic coefficients in CdTe based on first-principle wave function. / O.P. Malyk // Comp. Mater. Sci. – 2017. – V. 139. – P. 387–394.
- 25. Malyk O.P., Syrotyuk S.V.// Electron scattering on the short-range potential of the point defects in sphalerite GaN: calculation from the first principles. // 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. (заочна участь)
- 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. Р. Е-18. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (очна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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 кон-

ференція з фізики напівпровідників, 20-24 вересня 2004. - Тези доповідей. -Чернівці, 2004 - С.164. (заочна участь)

- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 35.Malyk O.P. The model of short-range inelastic electron-polar optical phonon inter-action 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. (заочна участь)
- 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 напівпро-відників», 27-30 червня 2005 р.- Тези доповідей.- Дрогобич, 2005. С. 119. (заочна участь)
- 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. Р.59. (заочна участь)

- 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. (заочна участь)
- 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. Р.297. (заочна участь)
- 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.- Р.38. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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.-Сгітеа, 2007.- Р.465. (заочна участь)

- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 47.Малик О.П. Взаємодія електронів 3 близькодіючим потенціалом дефектів розчині CdHgTe кристалічних У твердому при низькій температурі/О.П. Малик//З-я Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросис-темні технології», 2-6 червня 2008.-Тези доповідей.- Одеса, 2008- С.199. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 49. Малик О.П. Розсіяння електронів на близькодіючому потенціалі кристалічних дефектів в твердому розчині Cd_xHg_{1-x}Se/O.П. Малик // VI Міжнародна школа-конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників", 23 26 вересня 2008. Тези доповідей.- Дрогобич, 2008. С. 129. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. – Р. 313-314. (заочна участь)

- 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. (заочна участь)
- 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. – Р. 66. (заочна участь)
- 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. – Р. 6. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. - Р. 76. (заочна участь)
- 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.- Р.50. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)

- 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 Semi-conductors (ICDS-26), 17-22 July 2011.-Program.-Nelson, New-Zealand, 2011. P.11. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 63.О.Р. Malyk. Electron mobility in zinc oxide /O.Р. Malyk// VIII міжнародна школа- конференція «Актуальні проблеми фізики напівпровідників», 25-28 червня 2013. -. Тези доповідей. Дрогобич, Україна. С. 94. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)

- 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.- Солference book.- Р.290-291. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. Вагсеlona, Spain.- Program.- P. 1. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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. (заочна участь)
- 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: Alternative semiconductor integration in Si microelectronics: materials, techniques & applications.-16-20 September 2013.-Warsaw, Poland.-Program.-Abstract A9. (заочна участь)

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 коливан-нях кристалічної гратки в твердому розчині Cd_x Hg_{1-x} Te/ O.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// Віс-ник 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.