

О.П. Малик, С.В. Сиротюк

Розсіювання важких дірок на власних акцепторних дефектах в телуриді кадмію: розрахунок з перших принципів

Національний університет "Львівська політехніка", Львів, Україна, omalyk@ukr.net, svsnp@gmail.com

У цій роботі запропоновано спосіб опису енергетичного спектру, хвильової функції та самоузгодженого потенціалу в напівпровіднику зі структурою сфалериту при заданій температурі. З використанням цього підходу в рамках методу суперкомірки розраховано температурні залежності енергії іонізації власних акцепторних дефектів у телуриді кадмію. Крім того, на основі цього методу встановлені температурні залежності ефективної маси важких дірок, оптичних і акустичних потенціалів деформації, а також параметрів розсіювання важких дірок на іонізованих домішках, полярних оптичних, п'єзооптичних і п'єзоакустичних фонах. У рамках близькодійючих моделей розсіяння розглянуто температурні залежності рухливості важких дірок і фактора Холла в кристалах CdTe з концентрацією дефектів $5 \times 10^{16} \div 5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Ключові слова: явища переносу, дефекти кристалу, CdTe, *Ab initio* розрахунок.

Подано до редакції 26.11.2021; прийнято до друку 27.01.2022.

Вступ

Фізичні властивості телуриду кадмію, а саме необхідна ширина забороненої зони та необхідне значення коефіцієнта поглинання, надають широкі можливості для його використання як фотоелектричного перетворювача сонячної енергії. З іншого боку, електричні та оптичні властивості CdTe значною мірою визначаються структурою дефектів кристалічної решітки, зокрема власних точкових дефектів. Тому вивчення дефектної структури телуриду кадмію є важливим прикладним завданням. Проблемі вивчення дефектної структури телуриду кадмію на основі *ab initio* підходу в літературі присвячено велику кількість робіт [1-7]. Однак основним недоліком цих робіт є відсутність прямої залежності між структурою точкових дефектів і кінетичними властивостями CdTe, які безпосередньо визначають електричні властивості матеріалу. У поточній роботі ця проблема буде вирішуватися в два етапи. На першому етапі з використанням теорії функціоналу електронної густини проводиться розрахунок з перших принципів енергетичних

характеристик кристала: енергетичного спектру, хвильової функції електрона та самоузгодженого потенціалу кристалічної решітки. Зазвичай вважають, що вищезгадані характеристики стосуються основного стану кристала ($T = 0 \text{ K}$). У представленій статті розроблено новий метод розрахунку зазначених вище параметрів напівпровідника зі структурою сфалериту при заданій температурі. За допомогою цього методу для заданої температури розраховуються параметри розсіювання важких дірок на власних акцепторних дефектах телуриду кадмію. На другому етапі методом суперкомірки розраховуються температурні залежності енергій іонізації власних акцепторних дефектів у CdTe. На основі енергій іонізації власних акцепторних дефектів і параметрів розсіювання носіїв заряду можна визначити рівень Фермі i , в свою чергу, кінетичні коефіцієнти телуриду кадмію. В даний час в літературі представлено ряд публікацій, присвячених опису явищ переносу в напівпровідниках, зокрема в CdTe [8], де використовується *ab initio* підхід [9-13]. Однак у цих публікаціях зв'язок між структурою дефекту та кінетичними властивостями не вказано.

I. Розрахунок температурних залежностей хвильової функції, кристалічного потенціалу та ефективної маси важких дірок

Для опису явищ транспорту в телуриді кадмію р-типу були використані близькодючі моделі розсіяння важких дірок [8, 14, 15, 16]. Ці близькодючі моделі розсіювання важких дірок включають в якості параметрів декілька констант розсіювання, які, у свою чергу, вимагають обчислення хвильової функції валентної зони та самоузгодженого кристалічного потенціалу. Використовуючи попередньо вибрані обмінно-кореляційні потенціали (у формалізмі GGA) Cd і Te (псевдопотенціали) і вибираючи певну суміш цих звичайних обмінно-кореляційних потенціалів GGA та обмінного потенціалу Хартрі-Фока (ця суміш визначається параметром "exchmix" програми ABINIT), можна отримати сукупність математичних розв'язків рівняння Шредінгера, що відповідає значенню параметра «exchmix» в межах від 0 до 1. Відомо, що точність і збіжність обчислень значною мірою визначаються певними значеннями параметрів

«esct» і «rawesctdg» програми ABINIT. Вплив параметра «esct» на якість обчислень дуже сильний: чим більше «esct», тим краще збіжність обчислень. Параметр "rawesctdg" визначає граничну енергію для генерування точнішої сітки швидкого перетворення Фур'є (ШПФ), як правило, "rawesctdg" має бути більше або дорівнювати "esct". Для розрахунків було обрано наступні значення цих параметрів: "esct" = 48 Ha, "rawesctdg" = 64 Ha. Додаткове дослідження показало, що збільшення значення цих параметрів призводить до зміни положення енергетичних рівнів електронного спектру на $1 \div 2 \times 10^{-5}$ eV, що значно менше точності експерименту.

За допомогою запропонованого методу розрахунку виконано виділення фізичних розв'язків рівняння Шредінгера з множини математичних розв'язків рівняння Шредінгера. Запропоновано такий критерій вибору фізичних розв'язків рівняння Шредінгера: при заданій температурі теоретична ширина забороненої зони повинна збігатися з її експериментальним значенням, яке було визначено з експериментального виразу для твердого розчину $Hg_{1-x}Cd_xTe$ [17]:

$$E_g(x, T) = -0.302 + 1.93x - 0.81x^2 + 0.832x^3 + 5.35 \times 10^{-4}T(1 - 2x). \quad (1)$$

На основі цього підходу для ідеальної елементарної комірки телуриду кадмію отримано такі значення параметра «exchmix»: exchmix = 0,397 для T = 0 K, exchmix = 0,288 для T = 300 K. Ці значення параметра «exchmix» відповідають певним хвильовим функціям валентної зони і самоузгодженому потенціалу при 0 K і 300 K. Використовуючи близькодючі моделі розсіяння [8, 14, 15, 16], а також на основі отриманих хвильових функцій і кристалічних потенціалів можна розрахувати наступні константи розсіяння при 0 K і 300 K, а саме:

1) Константи розсіювання для взаємодії важких дірок з полярними оптичними (ПО) фононами, важких дірок з п'єзоакустичними (ПАК) фононами і важких дірок з п'єзооптичними (ПОП) фононами:

$$A_{PO} = A_{PAC} = A_{POP} = \int \psi^*(R^2 - r^2/3)\psi dr. \quad (2)$$

Інтегрування здійснюється в об'ємі, який містить два атоми різного роду і який дорівнює 1/8 об'єму

елементарної комірки.

2) d_0 – константа оптичного потенціалу деформації, яку вибирають рівним максимальному значенню серед трьох оптичних констант потенціалу деформації, що відповідають одній поздовжній і двом поперечним гілкам оптичних коливань решітки:

$$d_{0v} = a_0 \int \psi^* \varepsilon_v \cdot \mathbf{V} \psi dr, \quad v = 1,2,3, \quad (3)$$

де область інтегрування така ж, як і у випадку ПО розсіяння; ε_v – унітарний контраваріантний вектор поляризації оптичних коливань; вектор \mathbf{V} виражається через похідні самоузгодженої потенціальної енергії електрона за координатами атомів елементарної комірки [15].

3) E_{AC} – константа акустичного потенціалу деформації, яка була обрана рівною максимальному значенню серед трьох констант потенціалу акустичної деформації, що відповідають одній поздовжній і двом поперечним гілкам акустичних коливань решітки [8]:

$$E_{AC||} = -(-I_1/4 + I_2/2 + I_3/2); E_{AC1\perp} = -(I_1/4 - I_2/4 + I_3/2); E_{AC2\perp} = -(I_1/2 + I_2/2 - I_3/4); \quad (4)$$

де

$$I_1 = \int \psi^* V_1' \psi dr'; I_2 = \int \psi^* V_2' \psi dr'; I_3 = \int \psi^* V_3' \psi dr'; V_1'; V_2'; V_3'$$

– проекції вектора \mathbf{V} у косокутній системі координат, створеній примітивними векторами структури цинкової обманки, і область інтегрування така ж, як і у випадку ПО-розсіяння.

4) Константа розсіювання на іонізованих

домішок:

$$A_{II} = \int_{\Omega} \Psi^* \frac{1}{r} \Psi dr, \quad (5)$$

де інтегрування здійснюється по всій елементарній комірці сфалериту.

Як видно з (2)-(5), ці константи розсіювання виражаються через інтеграли від хвильової функції ψ

та потенціалу кристала U . Використовуючи тривимірну В-сплайн-інтерполяцію та метод кінцевих зміщень [8], можна отримати значення цих інтегралів. Оскільки значення ψ і U залежать від температури, то, відповідно, параметри розсіювання також залежатимуть від температур. Припускаючи найпростішу, лінійну, температурну залежність, можна розрахувати температурні залежності констант розсіювання:

$$A_{PO} = (12.2 + 1.84 \times 10^{-3}T) \times 10^{-20} m^2, \quad (6a)$$

$$d_0 = -43.1 - 0.018 T \text{ eV}, \quad (6b)$$

$$E_{AC} = -3.07 - 2.28 \times 10^{-3}T \text{ eV}, \quad (6c)$$

$$A_{II} = (0.442 - 8.90 \times 10^{-6}T) \times 10^{10} m^{-1}. \quad (6d)$$

На основі рівнянь (6a)-(6d) можна визначити температурні залежності ймовірностей переходу важких дірок і, у свою чергу, кінетичні коефіцієнти телуриду кадмію р-типу.

Визначення ефективної маси важких дірок проводилося на основі закону дисперсії $E(k)$ в околиці точки Γ , який було встановлено на основі *ab initio* розрахунків. Околиця точки Γ була обрана у вигляді куба, ребра якого були паралельні декартовим осям координат і для якого величина хвильового вектора змінювалася від $-0,02$ до $0,02$ (приведені координати в одиницях π/a_0 , a_0 – постійна ґратки). Кожне ребро куба було поділено на вісім проміжків. Використовуючи отриману залежність $E(k)$ та тривимірну В-сплайн інтерполяцію, можна отримати тензор оберненої ефективної маси. Цей тензор був приведений до головних осей (для телуриду кадмію одна з цих осей збігається з напрямком $[100]$). В результаті отримуємо діагональні компоненти оберненого тензора ефективної маси і, відповідно, компоненти ефективної маси важких дірок (при $T = 0$ К):

$m_1 = m_2 = 0.516 m_0$; $m_3 = 0.037 m_0$. Зауважимо, що в літературі є різні числові значення цих параметрів: $m_{hh} = 0.4 m_0$ [18]; $m_{hh} = 0.41 m_0$ [19]; $m_{hh} = 0.63 m_0$ [20]; $m_{hh} = 0.72 m_0$ [21]. Слід відзначити роботу [21], де вимірювання проводилися для напрямку $[100]$. Порівняння цих даних показує, що розрахункові значення компонентів ефективної маси досить близькі до експериментальних значень. Наведений вище метод розрахунку проводили для 0 К і 300 К. Припустивши лінійну залежність, отримаємо температурну залежність ефективної маси важких дірок:

$$m_{hh} = (0.214 + 9.902 \times 10^{-5}T) m_0 \quad (7)$$

Можна відзначити якісну схожість виразу (7) з аналогічним виразом для $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x \sim 0.2$), отриманим шляхом підгонки до експериментальних даних [22].

II. Визначення температурних залежностей енергії іонізації різних типів власних акцепторних дефектів

У запропонованому дослідженні розглядаються власні дефекти акцептора, а саме: $V_{Cd} - Te_{Cd}$, V_{Cd} . Дослідження енергетичного спектру дефектної структури телуриду кадмію проводилося в рамках методу суперкомірки на основі програми ABINIT: для $V_{Cd} - Te_{Cd}$ – суперкомірка $Cd_{14}Te_{17}$ ($2 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалериту); V_{Cd} – суперкомірка Cd_7Te_8 ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалериту). Такі ж розрахунки були проведені для ідеальної суперкомірки Cd_8Te_8 ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалериту) та $Cd_{16}Te_{16}$ ($2 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалериту). Результати розрахунків енергетичних спектрів цих суперкомірок представлені в таблиці 1.

Спочатку розглянемо розрахунок енергії іонізації дефекту V_{Cd} . Видно, що при $T = 0$ К електрони валентної зони з рівня $2 \times (2,541)$ перейдуть на незайнятий нижній рівень $1 \times (2,003)$ (0) дефекту (таким чином, утворюючи дірку в валентній зоні), тобто, відбувається повна іонізація акцепторної домішки. Отже, при $T = 0$ телурид кадмію матиме р-тип провідності. При $T = 0$ і при незначному підвищенні температури відбувається перехід електрона з валентної зони на незаповнений рівень $1 \times (3,733)$ (0) дефекту, утворюючи таким чином дірку у валентній зоні. Енергія іонізації цього процесу дорівнює $\Delta E_A = 1,192$ еВ. Інші електронні переходи (наприклад, перехід від рівня дефекту $1 \times (2,003)$ (2) до рівня зони провідності $1 \times (4,194)$ (0) є малоімовірними через високу енергію іонізації. Аналогічна ситуація спостерігається при $T = 300$ К. Електрон валентної зони ($2 \times (2,620)$ (2) енергетичний рівень) перейде на рівень дефекту $1 \times (3,660)$ (0), утворюючи дірку у валентній зоні. Енергія іонізації цього процесу дорівнює $\Delta E_A = 1.040$ еВ. Після цього, припускаючи лінійну залежність, отримуємо температурну залежність енергії іонізації дефекту:

$$\Delta E_A = 1.192 - 5.067 \times 10^{-4}T. \quad (8a)$$

Дещо інша ситуація має місце для дефекту $V_{Cd} - Te_{Cd}$. При $T = 0$ К відбуваються лише переходи електронів з валентної зони на рівень дефектів $1 \times (2,823)$ (0), що відповідає енергії іонізації 0.345 еВ. Аналогічно при $T = 300$ К енергія іонізації дефекту становитиме 0.290 еВ. В результаті можна отримати:

Таблиця 1

Енергетичний спектр ідеальної та дефектної суперкомірки					
1×1×2 кубічна структура сфалериту					
T = 0, E _g = 1.65 eV, exchmix = 0.09			T = 300 K, E _g = 1.48 eV, exchmix = 0.0182		
Рівні енергії ідеального Cd ₈ Te ₈ , eV	Рівні енергії дефекту, eV	Енергія іонізації акцептора, eV	Рівні енергії ідеального Cd ₈ Te ₈ , eV	Рівні енергії дефекту, eV	Енергія іонізації акцептора, eV
E _c - 1×(4.194) (0) E _v - 2×(2.541) (2)*	V _{Cd} 1×(3.733) (0) 1×(2.003) (0) 1×(2.003) (2)	При T = 0 р-тип. При T ≥ 0 ΔE _A = 1.192	E _c - 1×(4.108) (0) E _v - 2×(2.620) (2)	V _{Cd} 1×(3.660) (0) 1×(2.065) (0) 1×(2.065) (2)	ΔE _A = 1.040
2×1×2 кубічна структура сфалериту					
T = 0, E _g = 1.65 eV, exchmix = 0.076			T = 300 K, E _g = 1.48 eV, exchmix = 0.00571		
Рівні енергії ідеального Cd ₁₆ Te ₁₆ , eV	Рівні енергії дефекту, eV	Енергія іонізації акцептора, eV	Рівні енергії ідеального Cd ₁₆ Te ₁₆ , eV	Рівні енергії дефекту, eV	Енергія іонізації акцептора, eV
E _c - 1×(4.130) (0) E _v - 2×(2.478) (2)	V _{Cd} - Te _{Cd} 1×(2.899) (0) 1×(2.823) (0) 1×(2.421) (2)	ΔE _A = 0.345	E _c - 1×(4.046) (0) E _v - 2×(2.558) (2)	V _{Cd} - Te _{Cd} 1×(2.923) (0) 1×(2.848) (0) 1×(2.454) (2)	ΔE _A = 0.290

*Запис 2×(2.541) (2) означає, що існує 2-кратно вироджений енергетичний рівень з числом заповнення 2.

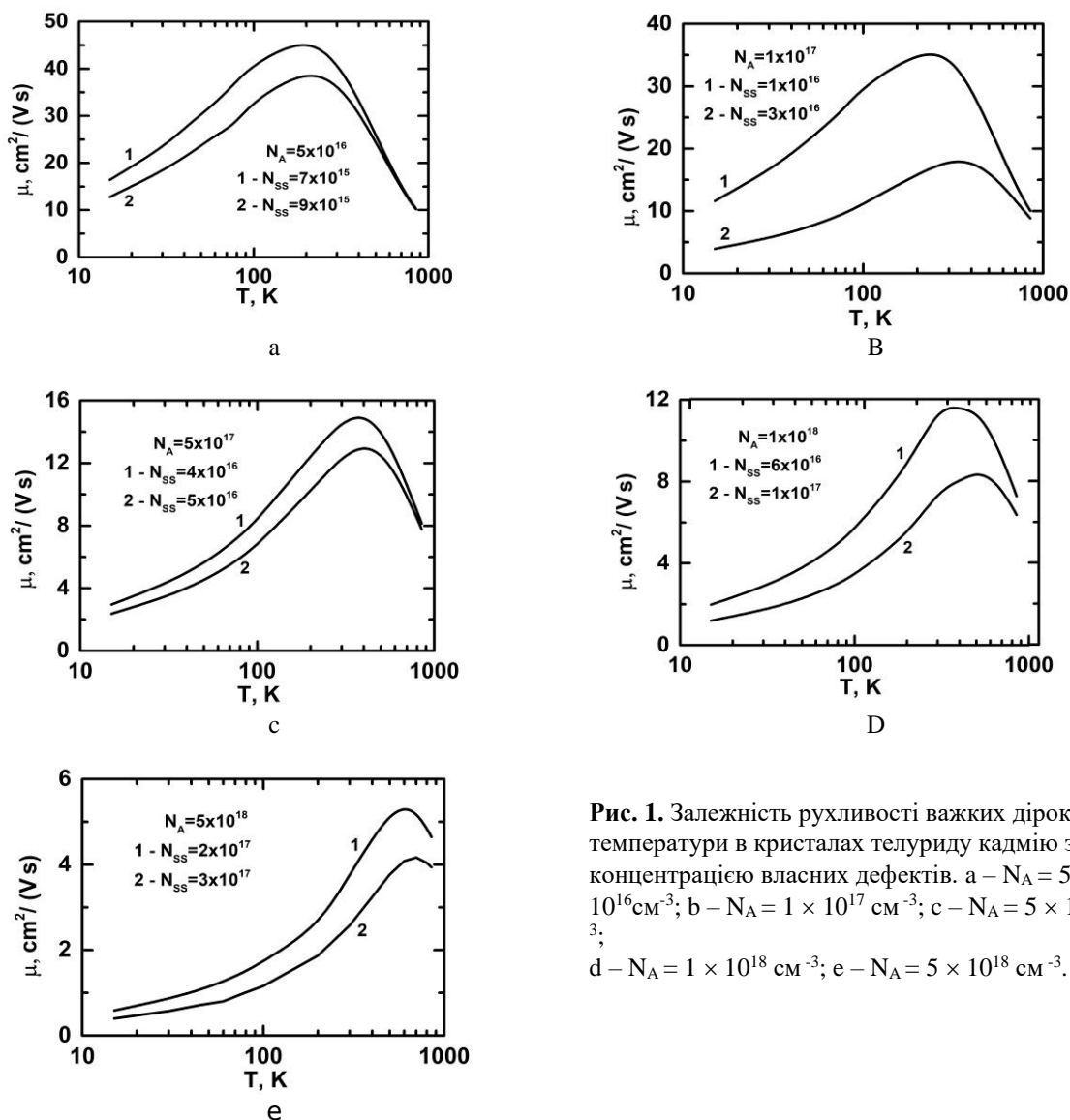


Рис. 1. Залежність рухливості важких дірок від температури в кристалах телуриду кадмію з різною концентрацією власних дефектів. а – $N_A = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; б – $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; в – $N_A = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; д – $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$; е – $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

$$\Delta E_A = 0.345 - 1.833 \times 10^{-4} T. \quad (8 \text{ б})$$

III. Дискусія

Під час розрахунку враховувалися лише дефекти з найменшою енергією іонізації, оскільки вони вносять домінуючий внесок у явища переносу. Відповідно, з рівнянь (8 а) - (8 б) випливає, що дефектом, який дає найбільший внесок, є $V_{Cd} - Te_{Cd}$. Рівень Фермі визначається рівнянням електронейтральності, яке має вигляд:

$$p - n = N_A / \{1 + 2 \exp[(E_A - F)/(k_B T)]\}, \quad (9)$$

де N_A – концентрація власних дефектів і рівень дефекту E_A при заданій температурі вибирають згідно (8 б).

Розрахунок температурних залежностей рухливості носіїв проводили на основі близькодючих моделей розсіювання [8, 14, 15] в рамках точного

розв'язку кінетичного рівняння Больцмана [23]. Параметри телуриду кадмію, використані для розрахунку, представлені в роботі [8]. Розрахунок температурної залежності рухливості важких дірок у кристалах телуриду кадмію проведено для концентрації дефектів $5 \times 10^{16} \div 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ cm}^{-3}$. Результати розрахунку представлені на рис. 1. Для охоплення всіх можливих значень рухливості важких дірок при низькій температурі для кожної концентрації акцепторних дефектів було обрано відповідні значення концентрації центрів статичної деформації (N_{ss}). На жаль, в літературі відсутні експериментальні дані для вищезгаданого інтервалу концентрацій власних акцепторів.

На рис. 2 представлено порівняння двох конкуруючих підходів: близькодючі моделі розсіювання та далекодіючі моделі розсіювання (наближення часу релаксації). Штриховими лініями 1 і 2 зображено результати розрахунку залежності $\mu(T)$, отримані в наближенні часу релаксації: крива 2

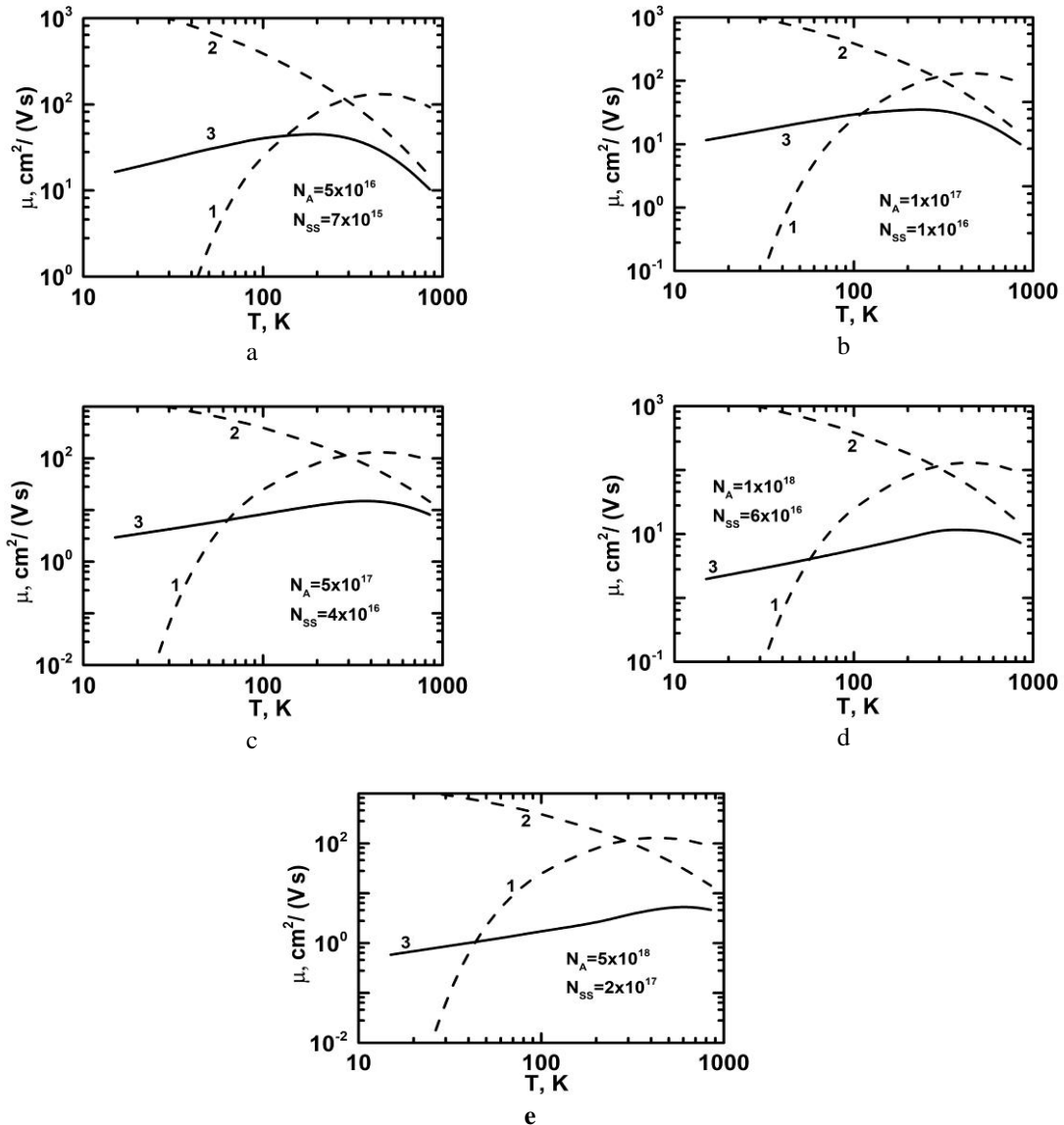


Рис. 2. Порівняння теоретичних кривих, отриманих в рамках далекодіючих (криві 1 і 2) і близькодючих моделей (крива 3) розсіювання.

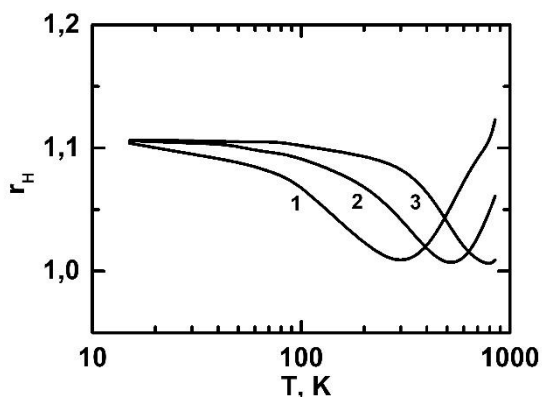


Рис. 3. Температурна залежність фактора Холла важкої дірки. 1 – $N_A = 5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; 2 – $N_A = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; 3 – $N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

описує високотемпературну область ($\hbar \omega < \langle k_B T \rangle$), крива 1 описує низькотемпературну область ($\hbar \omega > \langle k_B T \rangle$). Для телуриду кадмію температура Дебая дорівнює $\theta_D = 239 \text{ K}$. Це означає, що низькотемпературна область буде визначатися умовою $T < 24 \text{ K}$, а високотемпературна – умовою $T > 2400 \text{ K}$. З цієї точки зору застосування наближення часу релаксації (пружного розсіювання) в діапазоні $24 \text{ K} < T < 2400 \text{ K}$ є некоректним. У той же час близькодючі моделі розсіювання дозволяють описувати непружне розсіювання. Таким чином, можна

стверджувати, що близькодючі моделі дають більш адекватний опис фізичної реальності, ніж далекодіючі моделі.

Розраховані на основі запропонованого методу залежності фактора Холла від температури представлені на рис. 3. Видно, що ці залежності мають мінімуми, які розташовані таким чином – чим вище концентрація акцепторних дефектів, тим вище температура мінімуму.

Висновок

Автори пропонують нову схему розрахунку енергетичного спектру, хвильової функції та потенціальної енергії електрона в кристалі при заданій температурі. На основі цього визначено температурні залежності енергій іонізації власних акцепторних дефектів різних типів, а також температурні залежності кінетичних коефіцієнтів. Слід зазначити, що запропонований метод розрахунку можна застосувати до всіх напівпровідників зі структурою сфалериту.

Малик О.П. - професор, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри напівпровідникової електроніки;
Сиротюк С.В. - кандидат фізико-математичних наук, доцент.

- [1] I. Sankin, D. Krasikov, Phys. Status Solidi A 215, 1800887 (2019); <https://doi.org/10.1002/pssa.201800887>.
- [2] Su-Huai Wei, S.B. Zhang, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 66, 155211 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.155211>.
- [3] Jie Ma, Su-Huai Wei, T. A. Gessert, Ken K. Chin, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 83, 245207 (2011); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.245207>.
- [4] Ji-Hui Yang, Wan-Jian Yin, Ji.-Sang. Park, Jie Ma, Su-Huai Wei, Semicond. Sci. Technol. 31, 083002 (2016); <https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/8/083002>.
- [5] D. Krasikov, A. Knizhnik, B. Potapkin, S. Selezneva, T. Sommerer, Thin Solid Films 535, 322 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2012.10.027>.
- [6] W. Orellana, E. Menendez-Proupin, M.A. Flores, Phys. Status Solidi B 256, 1800219 (2019); <https://doi.org/10.1002/pssb.201800219>.
- [7] I. Sankin, D. Krasikov, J. Mater. Chem. A 5, 3503 (2017); <https://doi.org/10.1039/C6TA09155E>.
- [8] O. Malyk, S. Syrotyuk, Comput. Mater. Sci. 139, 387 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.07.039>.
- [9] K. Kaasbjerg, K.S. Thygesen, K.W. Jacobsen, Phys. Rev. B 85, 115317 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115317>.
- [10] O. Restrepo, K. Varga, S. Pantelides, Appl. Phys. Lett. 94, 212103 (2009); <https://doi.org/10.1063/1.3147189>.
- [11] O.D. Restrepo, K.E. Krymowski, J. Goldberger, W. A Windl, New J. Phys. 16, 105009 (2014); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/10/105009>.
- [12] X. Li, J.T. Mullen, Z. Jin, K.M. Borysenko, M. Buongiorno Nardelli, K.W. Kim, Phys. Rev. B 87, 115418 (2013); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115418>.
- [13] Wu. Li, Phys. Rev. B 92, 075405 (2015); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.075405>.
- [14] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, Journal of Elec. Materi. 47, 4212 (2018); <https://doi.org/10.1007/s11664-018-6068-1>.
- [15] O.P. Malyk, Journal of Elec. Materi. 49, 3080 (2020); <https://doi.org/10.1007/s11664-020-07982-6>.
- [16] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, Physics and Chemistry of Solid State. 20(4), 338 (2019); <https://doi.org/10.15330/pcss.20.4.338-344>.
- [17] G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Casselman, J. Appl. Phys. 53, 7099 (1982); <https://doi.org/10.1063/1.330018>.
- [18] B. Segall, D.T.F. Marple, Physics and Chemistry of II-VI Compounds, Eds. M. Aven and J.S. Prener (North Holland, Amsterdam 1967). P. 317.
- [19] D. de Nobel, Philips Res. Rep. 14, 361 (1959).
- [20] S. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. 15, 1940 (1960); <https://doi.org/10.1143/JPSJ.15.1940>.

- [21] L.S. Dang, G. Neu, R. Romestain, Solid State Commun. 44, 1187 (1982); [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(82\)91082-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(82)91082-1).
- [22] O.P. Malyk, Ukr. J. Phys. 35, 1374 (1990).
- [23] O.P. Malyk, J. Alloys Compd. 371(1-2), 146 (2004); <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2003.07.033>.

O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk

Heavy Hole Scattering on Intrinsic Acceptor Defects in Cadmium Telluride: Calculation from the First Principles

Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine, omalyk@ukr.net, svsnpe@gmail.com

In the present paper the way to describe the energy spectrum, the wave function and self-consistent potential in a semiconductor with a sphalerite structure at a predetermined temperature is proposed. Using this approach within the framework of the supercell method the temperature dependences of the ionization energy of intrinsic acceptor defects in cadmium telluride are calculated. In addition, on the basis of this method, the temperature dependences of the heavy holes effective mass, optical and acoustic deformation potentials, as well as of the heavy holes scattering parameters on ionized impurities, polar optical, piezooptic and piezoacoustic phonons were established. Within the framework of short-range scattering models the temperature dependences of the heavy hole mobility and Hall factor in CdTe crystals with defects concentrations $5 \times 10^{16} \div 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ are considered.

Keywords: transport phenomena, crystal defects, CdTe, *Ab initio* calculation.