

О.П. Малик, С.В. Сиротюк

Рухливість електронів у твердому розчині $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$): *ab initio* розрахунок

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

У цій роботі проводиться оцінка якості твердого розчину $\text{CdSe}_{0,25}\text{Te}_{0,75}$ шляхом дослідження його властивостей перенесення. Опис кінетичних явищ проводиться на основі хвильової функції та самоузгодженого потенціалу твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,2$), які визначалися з перших принципів, з використанням проекційних приєднаних хвиль, що реалізовано в програмі ABINIT. Процеси розсіяння були розглянуті в рамках близькодійючих моделей розсіяння, де враховувалась взаємодія електронів з полярними та неполярними оптичними фононами, п'єзоелектричними та акустичними фононами, центрами статичної деформації, нейтральними та іонізованими домішками. Елементи матриці переходу були отримані шляхом інтегрування по елементарній комірці з використанням тривимірної В-сплайн інтерполяції. Для кристалів із концентрацією домішок $5.6 \times 10^{15} \div 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ розраховано температурні залежності рухливості електронів та фактора Холла в діапазоні $15 \div 1200 \text{ K}$. Теоретичні криві, отримані в близькодійючому підході, якісно і кількісно відрізняються від тих, що отримані в рамках далекодійючих моделей в наближенні часу релаксації.

Ключові слова: перенесення електронів, точкові дефекти, твердий розчин CdSeTe , *ab initio* розрахунок.

Стаття постуила до редакції 23.10.2019; прийнята до друку 15.12.2019.

Вступ

На теперішній час основним методом підвищення ефективності сонячних комірок на основі телуриду кадмію є використання додаткового поглинаючого шару, створеного на основі потрійних сполук халькогенідів кадмію, зокрема твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ [1-4]. Цей твердий розчин має унікальні фотоелектричні параметри, необхідні для виробництва сонячних комірок [5-14]. Тому дослідження якості цих поглинаючих шарів є актуальною прикладною задачею.

У цій роботі вперше в рамках *ab initio* підходу ми запропонували опис кінетичних властивостей твердого розчину (зокрема $\text{CdSe}_{0,25}\text{Te}_{0,75}$), використовуючи принцип близькодії. Опис кінетичних властивостей проводиться на основі хвильової функції та самоузгодженого потенціалу

твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$), які визначалися з перших принципів, використовуючи проекційно приєднані хвилі, що реалізовано в програмі ABINIT [15]. Опис взаємодії електронів з різними типами точкових дефектів кристалу зроблено за допомогою близькодійючих моделей розсіювання [16-20].

I. Теорія

Спочатку покладемо, що постійна решітки, яка відповідає складу $x = 0,25$ твердого розчину, дорівнює $a_0 = 6.38 \text{ \AA}$. Це значення було використано для розрахунку хвильових функцій та самоузгоджених потенціалів у кристалах CdTe та CdSe . Ці хвильові функції та самоузгоджені потенціали визначалися з перших принципів на

основі проекційно приєднаних хвиль (ППХ) [21]. Базові функції ППХ були згенеровані за допомогою програми AtomPAW [22] для наступних валентних станів: {5s²5p⁰4d¹⁰} для Cd, {4s²5s²4p²5p⁴} для Te та {4s²4p⁴} для Se, відповідно. Обмінно-кореляційний потенціал був обраний у формі РВЕО [23-26], отриманого з функціоналу обмінно-кореляційної енергії.

Для отримання хвильової функції твердого розчину CdSe_xTe_{1-x} було використано наступний розгляд - на основі отриманих хвильових функцій кристалів CdTe та CdSe визначалася хвильова

функція твердого розчину:

$$|\psi(\mathbf{r})_{CdSeTe}|^2 = x|\psi(\mathbf{r})_{CdSe}|^2 + (1-x)|\psi(\mathbf{r})_{CdTe}|^2; x=0.25. \quad (1)$$

Згідно з близькодійними моделями розсіяння ймовірність переходу носія зі стану \mathbf{k} у стан \mathbf{k}' , викликаного взаємодією з полярними оптичними (ПО), неполярними оптичними (НПО), акустичними (АК), п'єзоакустичними (ПАК) та п'єзооптичними (ПОП) фононами, потенціалом статичної деформації (СД) та іонізованою домішкою (ІД), має вигляд [16-20]:

$$W_{ПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^5 A_{PO}^2 e^4}{16 \epsilon_0^2 a_0^8 G} \frac{M_{Cd} + M_x}{M_{Cd} M_x} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ \left. \times d(E' - E + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(E' - E + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (2)$$

$$W_{НПО}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^3 d_0^2}{1152 a_0^2 G} \frac{M_{Cd} + M_x}{M_{Cd} M_x} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ \left. \times d(E' - E + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(E' - E + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (3)$$

$$W_{АК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^3 k_B T E_{AK}^2}{576 \mathbf{h} G [M_{Cd} + M_x]} \left(\frac{1}{c_{\parallel}} + \frac{2}{c_{\perp}} \right)^2 d(E' - E); \quad (4)$$

$$W_{ПАК}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^5 e^2 e_{14}^2 A_{PE}^2 k_B T}{128 \mathbf{h} G e_0^2 a_0^2 [M_{Cd} + M_x]} \left(\frac{1}{c_{\parallel}} + \frac{2}{c_{\perp}} \right)^2 d(E' - E); \quad (5)$$

$$W_{ПОП}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{p^7 e^2 e_{14}^2 A_{PE}^2}{400 \epsilon_0^2 a_0^4 G} \frac{M_{Cd} + M_x}{M_{Cd} M_x} \left\{ \frac{1}{w_{LO}} [N_{LO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{LO}) + (N_{LO} + 1) \times \right. \\ \left. \times d(E' - E + \mathbf{h}w_{LO})] + \frac{2}{w_{TO}} [N_{TO} d(E' - E - \mathbf{h}w_{TO}) + (N_{TO} + 1) d(E' - E + \mathbf{h}w_{TO})] \right\}; \quad (6)$$

$$W_{СД}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2^5 3^4 p^3 C^2 a_0^6 e^2 e_{14}^2 N_{СД}}{V e_0^2 \mathbf{h}} \frac{1}{q^2} d(E' - E); \quad (7)$$

$$W_{ІД}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{Z_i^2 e^4 N_{ІД} A_{ID}^2 a_0^6}{512 e_0^2 \mathbf{h} V} d(E' - E); A_{ID} = \int_{\mathbf{w}} \mathbf{j}^* \frac{1}{r} \mathbf{j} \, d\mathbf{r}, \quad (8)$$

де $M_x = x M_{Se} + (1-x) M_{Te}$; M_{Cd} , M_{Se} , M_{Te} - маси атомів; N_{LO} та N_{TO} позначають кількість поздовжніх (LO) та поперечних (TO) фононів з частотою w_{LO} and w_{TO} відповідно; G - кількість елементарних комірок в об'ємі кристалу; c_{\parallel} and c_{\perp} - поздовжня і поперечна швидкість звуку відповідно; e_{14} - не зникаючий компонент п'єзоелектричного тензору для структури цинкової обманки; \mathbf{j} - хвильова функція електрона; N_{ID} - концентрація іонізованих домішок; Z_i - кратність іонізації домішки; інтегрування в (8) здійснюється по елементарній комірці і значення A_{ID} рівне: $A_{ID} = 0.483 \times 10^{10} \text{ м}^{-1}$; $C \approx 0.1$; $q = |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|$; $N_{СД}$ - концентрація центрів статичної деформації, метод знаходження якої на теперішній час невідомий. Тому ця характеристика матеріалу була використана як

підгінний параметр для узгодження теорії та експерименту.

У рівнянні (2) величина A_{PO} визначається наступним чином:

$$A_{PO} = \int_{\mathbf{j}^*} (R^2 - r^2/3) \mathbf{j} \, d\mathbf{r}; R = \sqrt{3} a_0/2; \quad (9)$$

інтегрування здійснюється по частині об'єму елементарної комірки, де розміщені два атоми різного сорту, шляхом використання тривимірної В-сплайн інтерполяції [27]. Розмір цього об'єму визначається умовою:

$$\partial U_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})/\partial x = \partial U_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})/\partial y = \partial U_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})/\partial z = 0,$$

де $U_0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ - самоузгоджена потенціальна енергія електрону; \mathbf{r} та \mathbf{R} - координати електрона та атома відповідно. Метод обчислення та оцінки похибки величини детально описані в [19]. Тоді можна

отримати $A_{GJ} = 8.32 \times 10^{-20} \text{ м}^2$.

В (3) - (4) d_0 та E_{AK} є константи оптичного та акустичного потенціалу деформації, які виражаються через інтеграли за об'ємом елементарної комірки [19]. Область інтегрування є така ж, як у випадку ПО-розсіювання. В результаті маємо $d_0 = -18.3 \text{ eV}$, $E_{AK} = -2.16 \text{ eV}$.

В (5) - (6) величина $A_{ПЕ} = A_{ПО}$, оскільки координатна залежність потенціальної енергії така ж, як і у випадку ПО-розсіювання, тому інтегрування за елементарною коміркою здійснюється методом, описаним вище.

Розсіювання електронів на нейтральній домішці було описано на основі моделі Ерджінся [28]. Використання принципу близькодії дає наступну формулу для ймовірності переходу [19]:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{100 p^2 a_B \hbar^3 N_{HD}}{V m^* k(E)} d(E' - E), \quad (10)$$

де N_{HD} – концентрація нейтральних домішок; $m^* = \hbar^2 k(E) d k(E) / dE$; a_B – радіус Бора.

II. Температурна залежність рухливості електронів та фактора Холла

Для значень складу $x < 0,5$ твердий розчин $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ має структуру сфалериту. Тому його структура точкових дефектів повинна бути подібною до структури точкових дефектів телуриду кадмію.

Відомо, що в нелегованому CdTe існують власні донорні дефекти з енергією іонізації $E_D \approx 10 \text{ meV}$, які компенсують власні акцепторні дефекти [29]. Following such assumption the electroneutrality equation for calculation the Fermi level was considered: Виходячи з такого припущення, для розрахунку рівня Фермі було використано рівняння електронейтральності:

$$n - p = N_D / \left\{ 1 + 2 \exp\left[\frac{F - E_D}{(k_B T)}\right] \right\} - N_A, \quad (11)$$

де N_D, N_A – концентрація донорів та акцепторів відповідно.

Пошук енергії Фермі проводився для певних рівнів концентрації дефектів, числові значення яких представлені в таблиці 1. Параметри твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$), використаних при розрахунках, представлені в таблиці 2.

Для розрахунку теоретичних температурних залежностей рухливості електронів використовувались два підходи: а) опис розсіювання електронів на основі близькодючих моделей та точного розв'язку стаціонарного кінетичного рівняння Больцмана [45]; б) опис розсіювання електронів на основі далекодіючих моделей та наближення часу релаксації для розв'язку кінетичного рівняння. Теоретичні криві, що відповідають першому підходу, представлені на рисунку 1 (а)-(г). Представлені криві пов'язані з різними значеннями концентрації центрів статичної деформації. Можливі значення цих концентрацій були вибрані аналогічно зразкам CdTe [29] з відповідними концентраціями власних точкових дефектів - донорів та акцепторів (див. Таблицю I).

Таблиця 1

Параметри структури дефектів зразків $\text{CdSe}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$

Зразок	N_D (см ⁻³)	N_A (см ⁻³)	$N_D + N_A$ (см ⁻³)	N_{CD} (см ⁻³)
A	3.2×10^{15}	2.4×10^{15}	5.6×10^{15}	$(2 \div 4) \times 10^{15}$
B	3.0×10^{16}	2.0×10^{16}	5.0×10^{16}	$(1 \div 2) \times 10^{16}$
C	3.0×10^{17}	2.0×10^{17}	5.0×10^{17}	$(4 \div 5) \times 10^{16}$
D	3.0×10^{18}	2.0×10^{18}	5.0×10^{18}	$(6 \div 8) \times 10^{16}$

Таблиця 2

Параметри $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x=0.25$), використані при розрахунках

Параметр матеріалу	Значення
Постійна ґратки, a_0 (м)	$6.38 \cdot 10^{-10} \text{ а}$
Ширина забороненої зони, E_g (eV)	$E_g = x E_{gCdSe} + (1-x) E_{gCdTe} - 0.9 x (1-x)^{b,c,d}$
Енергетичний еквівалент матричного елементу, E_p (eV)	$21 - x^e$
Густина, ρ (кг м ⁻³)	$5.75 \times 10^3 - 95 x^f$
Спін-орбітальне розщеплення, D (eV)	$0.92 - 0.51 x^g$
Оптичний потенціал деформації, d_0 (eV)	-18.3^h
Акустичний потенціал деформації, E_{AK} (eV)	-2.16^h
Частота поперечних оптичних фононів, ω_{TO} (рад с ⁻¹)	$2.63 \cdot 10^{13} + 4.8 \cdot 10^{12} i,j$
Діелектрична стала решітки, ϵ_L	$10.5 - 1.1 x^{j,k}$
Високочастотна діелектрична стала, ϵ_∞	$7.4 - 1.3 x^{j,k}$
Пружні константи ($\times 10^{-10}$, Н м ⁻²): C_l	$6.32 + 1.04 x^{l,m,n}$
	$1.538 - 0.188 x^{l,m,n}$
Компонента пьезоелектричного тензора, e_{14} (Кл м ⁻²)	$(1-x) 0.03457 - 1.39 \times 10^{-5} T + 0.347 x^{o,p}$

^a [30]. ^b [31]. ^c [32]. ^d [33]. ^e [34]. ^f [35]. ^g [36]. ^h Теперішня стаття. ⁱ [37]. ^j [38]. ^k [39]. ^l [40]. ^m [41]. ⁿ [42]. ^o [43]. ^p [44].

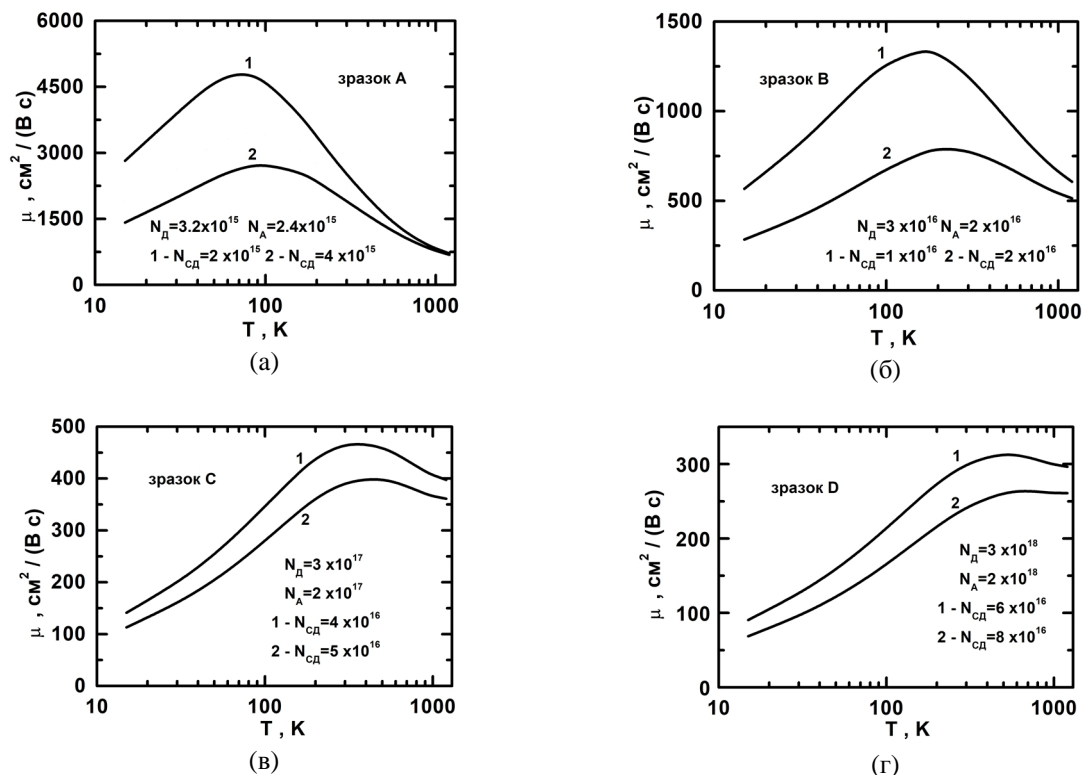


Рис. 1. Температурна залежність рухливості електронів у кристалах CdSe_xTe_{1-x} (x = 0,25) з різною концентрацією дефектів.

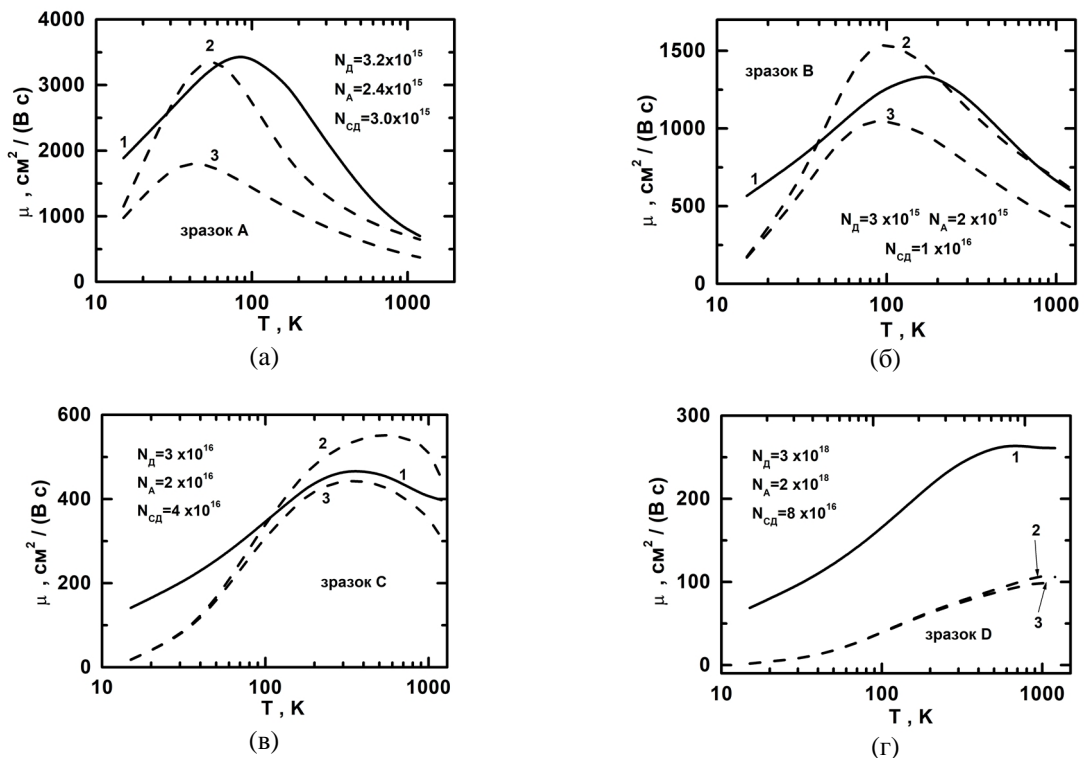


Рис. 2. Залежності $m(T)$, що відповідають різним теоретичним підходам.

Порівняння двох вищезгаданих теоретичних підходів (близькодійучі та далекодійучі моделі розсіяння) зображено на рисунку 2, (а)-(г). Суцільні криві 1 були отримані за допомогою близькодійучих моделей

розсіяння в рамках точного розв'язку кінетичного рівняння Больцмана. Штрихові криві 2 і 3 були отримані в рамках далекодійучих моделей розсіяння і з використанням наближення часу релаксації: крива 2

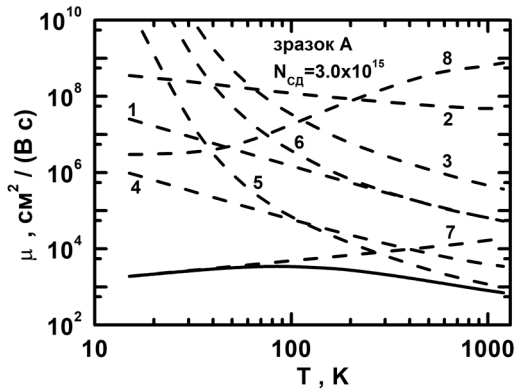


Рис. 3. Внесок різних механізмів розсіяння в рухливість електронів. Суцільна лінія - змішаний механізм розсіяння; 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 - АК-, ІД-, НПО-, ПАК-, ПО-, ПОП-, СД-, НД- механізми розсіяння відповідно.

відноситься до випадку низькотемпературної області $\hbar\omega \gg k_B T$, тоді як крива 3 стосується випадку області високої температури $\hbar\omega \ll k_B T$. Визначення температурної залежності рухливості електронів представлено в іншому місці (див. Додаток В у [19]). Як видно, ці криві демонструють значну якісну та кількісну різницю між температурними залежностями рухливості носія заряду, обчисленими на основі двох підходів, у досліджуваному діапазоні концентрацій дефектів та температур. Однак, лише експеримент повинен визначити, яка з теоретичних моделей може краще описувати експериментальні дані. З літератури авторам відомо лише одне джерело, в якому представлені експериментальні дані щодо вивчення явищ переносу в $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ [46]. Аналіз цих даних показує, що досліджувані зразки є полікристалічними (розмір зерна $\sim 566 \div 755 \text{ \AA}$). Тому вони мають аномально низькі значення рухливості електронів, що свідчить про низьку якість кристалів.

Слід зазначити, що автори стверджують, що підхід, який базується на принципі близькодії, більш точно описує кінетичні властивості твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ порівняно з підходом, який базується на принципі далекодії. Це твердження ґрунтується на тому, що для телуриду кадмію близькодійні моделі дають краще узгодження з експериментом [19]. Оскільки твердий розчин $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x \leq 0,5$) має схожу кристалічну структуру, то слід очікувати подібної ситуації і в цьому випадку.

На рисунку 3 для зразка з мінімальною концентрацією дефектів опис ролі різних механізмів розсіяння електронів представлено пунктирними лініями. Як видно, розсіяння на статичній деформації (крива 7) переважає за низьких температурах ($T < 180 \text{ K}$). В температурному інтервалі $T > 180 \text{ K}$ переважає розсіяння на поляричних оптичних фононах (крива 5). У цьому температурному інтервалі важливу роль також відіграє розсіяння на п'єзоакустичних фононах (крива 4). Інші механізми

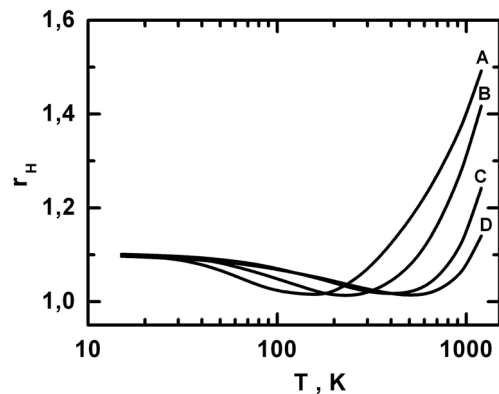


Рис. 4. Температурна залежність фактора Холла електрона в кристалах $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$).

розсіяння дають слабкий внесок у рухливість електронів.

Такий розподіл впливу різних механізмів розсіяння обумовлює температурні залежності фактора Холла електронів для зразків з різною концентрацією дефектів (див. рисунок 4). Ці температурні залежності демонструють мінімуми в області температури, де відбувається перехід від одного механізму розсіювання до іншого. Видно, що більша концентрація дефектів відповідає більш високій температурі, де спостерігається мінімум залежності $r_H(T)$.

Висновок

У даній роботі розглядається проблема оцінки якості кристалів твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$). Ідея запропонованого підходу полягає в аналізі температурної залежності рухливості носія заряду, яка, в свою чергу, визначається структурою точкових дефектів кристалу. Для розрахунку вищезазначеної характеристики твердого розчину $\text{CdSe}_x\text{Te}_{1-x}$ ($x = 0,25$) було використано два наближення: а) близькодійні моделі розсіяння на основі обчисленої хвильової функції та самоузгодженої потенціальної енергії в рамках точного розв'язку рівняння Больцмана; б) далекодійні моделі розсіяння в рамках наближення часу релаксації. Було встановлено, що обидва наближення дають істотно різні теоретичні криві. Питання, яке наближення є кращим, слід вирішити з допомогою експерименту.

Малик О.П. – д.ф.-м.н., доцент, доцент кафедри напівпровідникової електроніки;
Сиротюк С.В. – к.ф.-м.н., доцент кафедри напівпровідникової електроніки.

- [1] A. Kathalingam, M. R. Kim, Y. S. Chae, J. K. Rhee, S. Thanikaikarasan, T. Mahalingam, J. Alloys Compd. 505, 758 (2010) (<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.06.136>).
- [2] Q. Zeng, Z. Chen, Y. Zhao, X. Du, F. Liu, G. Jin, F. Dong, H. Zhang, B. Yang, ACS Appl. Mater. Interfaces 7, 23223 (2015) (<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acsami.5b07197>).
- [3] D.E. Swanson, J.R. Sites, W.S. Sampath, Sol. Energ. Mat. Sol. C. 159, 389 (2017) (<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2016.09.025>).
- [4] A.H. Munshi, J. Kephart, A. Abbas, J. Raguse, J.-N. Beaudry, K. Barth, J. Sites, J. Walls, W. Sampath, IEEE J. Photovolt. 8, 310 (2018) (<https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2017.2775139>).
- [5] S.M. Babu, T. Rajalakshmi, R. Dhanasekaran, P. Ramasamy, J. Cryst. Growth 110, 423 (1991) ([https://doi.org/10.1016/0022-0248\(91\)90278-D](https://doi.org/10.1016/0022-0248(91)90278-D)).
- [6] Z. Loizos, A. Mitsis, N. Spyrellis, M. Froment, G. Maurin, Thin Solid Films 235, 51 (1993) ([https://doi.org/10.1016/0040-6090\(93\)90242-H](https://doi.org/10.1016/0040-6090(93)90242-H)).
- [7] S. Benyettou, S. Saib, N. Bouarissa, Chem. Phys. 457,147 (2015) (<https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.06.004>).
- [8] [8] G. Brill, Y. Chen, P. M. Amirtharaj, W. Sarney, D. Chandler-Horowitz, N. K. Dhar, J. Electron. Mater. 34, 655 (2005) (<https://doi.org/10.1007/s11664-005-0080-y>).
- [9] S. Velumani, X. Mathew, P.J. Sebastian, Sol. Energ. Mat. Sol. C. 76, 359 (2003) ([https://doi.org/10.1016/S0927-0248\(02\)00288-X](https://doi.org/10.1016/S0927-0248(02)00288-X)).
- [10] K.R. Murali, B. Jayasutha, Chalcogenide Lett. 6, 1 (2009).
- [11] B.I. MacDonald, A. Martucci, S. Rubanov, S.E. Watkins, P. Mulvaney, J.J. Jasieniak, ACS Nano 6, 5995 (2012) (<https://doi.org/10.1021/nn3009189>).
- [12] E. Benamar, M. Rami, M. Fahoume, F. Chraïbi, A. Ennaoui, Solid State Sci. 1, 301 (1999) ([https://doi.org/10.1016/S1293-2558\(00\)80084-9](https://doi.org/10.1016/S1293-2558(00)80084-9)).
- [13] N. Muthukumarasamy, S. Jayakumar, M.D. Kannan, R. Balasundaraprabhu, Sol. Energy 83, 522 (2009) (<https://doi.org/10.1016/j.solener.2008.10.004>).
- [14] T.C.M. Santhosh, K.V. Bangera, G.K. Shivakumar, Sol. Energy. 153, 343 (2017) (<https://doi.org/10.1016/j.solener.2017.05.079>).
- [15] X. Gonze, et al., Comput. Phys. Commun. 205, 106 (2016) (<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.04.003>).
- [16] O.P. Malyk, Comput. Mater. Sci. 33, 153 (2005) (<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.12.052>).
- [17] O.P. Malyk, Phys. Status Solidi C 6, S86 (2009) (<https://doi.org/10.1002/pssc.200881315>).
- [18] O.P. Malyk, Can. J. Phys. 92, 1372 (2014) (<https://doi.org/10.1139/cjp-2013-0075>).
- [19] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, Comput. Mater. Sci. 139, 387(2017) (<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.07.039>).
- [20] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, J. Electron. Mater. 47, 4212 (2018)(<https://doi.org/10.1007/s11664-018-6068-1>).
- [21] P.E. Blöchl, Phys. Rev. B. 50, 17953 (1994) (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>).
- [22] N.A.W. Holzwarth, A.R. Tackett, G.E. Matthews, Comput. Phys. Commun. 135, 329 (2001) ([https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(00\)00244-7](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(00)00244-7)).
- [23] M. Ernzerhof, G.E. Scuseria, J. Chem. Phys. 110, 5029 (1999) (<https://doi.org/10.1063/1.478401>).
- [24] P. Novák, J. Kunes, L. Chaput, W.E. Pickett, Phys. Status Solidi B 243, 563 (2006) (<https://doi.org/10.1002/pssb.200541371>).
- [25] E. Tran, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novák, Phys. Rev. B 74, 155108(10) (2006) (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.155108>).
- [26] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Letters 77, 3865 (1996) (<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>).
- [27] C. de Boor, A Practical Guide to Splines, (Springer-Verlag, New York, 1978).
- [28] C. Erginsoy, Phys.Rev. 79, 1013 (1950) (<https://doi.org/10.1103/PhysRev.79.1013>).
- [29] B. Segall, M.R. Lorenz, R.E. Halsted, Phys. Rev. 129, 2471 (1963) (<https://doi.org/10.1103/PhysRev.129.2471>).
- [30] J. Litwin, Phys. Status Solidi 5, 551 (1964) (<https://doi.org/10.1002/pssb.19640050311>).
- [31] G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Casselman, J. Appl. Phys. 53, 7099 (1982) (<https://doi.org/10.1063/1.330018>).
- [32] R. Passler, Phys. Status Solidi B 216, 975 (1999) ([https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(199912\)216:2<975::AID-PSSB975>3.0.CO;2-N](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199912)216:2<975::AID-PSSB975>3.0.CO;2-N)).
- [33] H.C. Poon, Z.C. Feng, Y. P. Feng, M.F. Li, J. Phys.:Condens. Matter 7, 2783 (1995) (<https://doi.org/10.1088/0953-8984/7/14/017>).
- [34] C. Hermann, C. Weisbuch. Phys. Rev. B, 15, 823 (1977) (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.15.823>).
- [35] J. Brice, P. Capper (ed.), EMIS Datareviews Series No 3, (INSPEC, London, 1987).
- [36] W.Gebhardt, G. Schotz, R. Bhargava, (ed.), EMIS Datareviews Series No 17, (INSPEC/IEE London, 1997).
- [37] M. Gorska, W. Nazarewicz, Phys. Status Solidi B 65, 193 (1974) (<https://doi.org/10.1002/pssb.2220650117>).

- [38] J. Baars, F. Sorger, *Solid State Comm.* 10, 875 (1972) ([https://doi.org/10.1016/0038-1098\(72\)90211-6](https://doi.org/10.1016/0038-1098(72)90211-6)).
- [39] R.K. Willardson, A.C. Beer (ed.), *Semiconductors and Semimetals*, (Academic Press, New York, San Francisco, London, 1975).
- [40] Ju.H. Velikov, A.P. Rusakov, *Fiz. Tverd. Tela* 13, 1157 (1971).
- [41] D.L. Rode, J.D. Wiley, *Phys. Status Solidi B* 56, 699 (1973) (<https://doi.org/10.1002/pssb.2220560234>).
- [42] B. Bonello, B. Fernandez, *J. Phys. Chem. Solids* 54, 209 (1993) ([https://doi.org/10.1016/0022-3697\(93\)90310-N](https://doi.org/10.1016/0022-3697(93)90310-N)).
- [43] D. Berlincourt, H. Jaffe, L.R. Shiozawa, *Phys. Rev.* 129, 1009 (1963) (<https://doi.org/10.1103/PhysRev.129.1009>).
- [44] Landolt- Bornstein Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. New Series, (Springer Verlag, Berlin, 1984).
- [45] O.P. Malyk, *J. Alloys Compd.* 371, 146 (2004) (<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2003.07.033>).
- [46] N. Muthukumarasamy, R. Balasundaraprabhu, S. Jayakumar, and M.D. Kannan, *Sol. Energ. Mat. Sol. C.* 92, 851 (2008) (<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2008.02.005>).

O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk

Electron Mobility in CdSe_xTe_{1-x} (x = 0.25) Solid Solution: *Ab Initio* Calculation

Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine, omalyk@ukr.net

In this paper an assessment of the quality of a solid solution of CdSe_xTe_{1-x} is done by study of its transport properties. The description of the kinetic phenomena is carried on the base of the wave function and self-consistent potential for solid solution CdSe_xTe_{1-x} (x=0.25) which were determined from the first principles using the projector augmented waves as implemented in the ABINIT code. The scattering processes were considered in the framework of short-range scattering models where the electron interaction with polar and nonpolar optical phonons, piezoelectric and acoustic phonons, static strain centers, neutral and ionized impurities was taken into account. The transition matrix elements were obtained by integration over the unit cell using three-dimensional B-spline interpolation. For crystals with impurity concentration $5.6 \times 10^{15} - 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ the temperature dependences of electron mobility and Hall factor in the range 15 – 1200 K are calculated. The theoretical curves obtained in the short-range approach differ qualitatively and quantitatively from those obtained within the long-range models in relaxation time approximation.

Keywords: electron transfer, point defects, CdSeTe solid solution, ab initio calculation.