

ПОДВИЖНОСТЬ И МЕХАНИЗМЫ РАССЕЙНИЯ ДЫРОК

В $Pb_{0,92}Sn_{0,08}S_{0,8}Se_{0,2}$

Гарасим В. И., Горлей П. Н., Деркач Н. И., Заячук Д. М.

Исследованы концентрационная и температурная зависимости подвижности дырок в монокристаллах твердого раствора $Pb_{0,92}Sn_{0,08}S_{0,8}Se_{0,2}$, выращенных методом Бриджмена. На основании теоретического анализа полученных результатов установлено, что в исследуемом материале основным механизмом рассеяния дырок, когда последние находятся в невырожденном состоянии, является рассеяние на полярных оптических фононах и сплавном потенциале. При температурах порядка комнатной заметную роль в рассеянии, кроме того, играют акустические фононы, в области азотных температур — ионизированные примеси.

В ряду сложных систем на основе соединений $A^{IV}B^{VI}$ четырехкомпонентные твердые растворы типа $Pb_{1-x}Sn_xS_{1-y}Se_y$ являются одними из наименее изученных. В то же время это весьма перспективные полупроводники хотя бы в том отношении, что для них существует возможность при определенных соотношениях компонентов непосредственно в процессе выращивания получать материал с низкой концентрацией носителей заряда, что важно во многих практических приложениях. К таким, в частности, относится твердый раствор $Pb_{0,92}Sn_{0,08}S_{0,8}Se_{0,2}$ [1], свойства которого изучались ранее в работах [2, 3]. Образцы кристаллов данного состава условно можно разбить на две группы — «нормальные», свойства которых в основном типичны для материалов $A^{IV}B^{VI}$, и «аномальные» — образцы с различного рода особенностями в поведении целого ряда физических характеристик. Свойства кристаллов последней группы исследовались в работе [3]. Настоящая работа посвящена изучению концентрационной и температурной зависимостей подвижности дырок и оценке вклада в нее различных механизмов рассеяния в кристаллах $Pb_{0,92}Sn_{0,08}S_{0,8}Se_{0,2}$ первой группы.

Экспериментальные исследования подвижности дырок были проведены на большом количестве образцов, выращенных методом Бриджмена из стехиометрической пихты при различных технологических условиях. Результаты исследований показаны на рис. 1 и 2.

Как видно из приведенных на рис. 1 данных, полученных при 77 К, для образцов исследуемого состава с близкими значениями концентрации носителей заряда имеет место очень большой разброс по величине подвижности последних. Огибающая максимальных значений подвижности, которая может служить характеристикой наиболее совершенных образцов, имеет вид плавной кривой, медленно поднимающейся по оси подвижности при росте концентрации дырок до величины $\sim 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. При более высоких концентрациях наблюдается тенденция к снижению подвижности дырок. Если сравнить подвижность дырок исследуемого материала и трехкомпонентных аналогов, например $Pb_{0,92}Sn_{0,08}Se$, то для материала с таким содержанием серы и селена в подрешетке халькогена она оказывается в 2—3 раза ниже, чем для чистого селенида свинца-олова [4].

С увеличением температуры подвижность дырок достаточно быстро понижается (рис. 2). В общем зависимость $\mu(T)$ является степенной функцией, которая характерна для менее сложных систем $A^{IV}B^{VI}$, но с тем различием, что для ис-

следующих кристаллов в данном температурном интервале в логарифмическом масштабе кривая $\mu = f(T)$ имеет не один, а два наклона. Излом на кривых $\mu = f(T)$ наступает при температурах $\sim 170-200$ К. При температурах ниже указанных показатель степени r на зависимости $\mu = \mu_0 T^r$ принимает значения порядка $-(1.8 \div 2.0)$, выше — порядка $-(3.0 \div 3.5)$. Это свидетельствует о том, что при отмеченной температуре либо происходит смена доминирующего механизма рассеяния дырок, либо проявляется действие каких-то иных факторов.

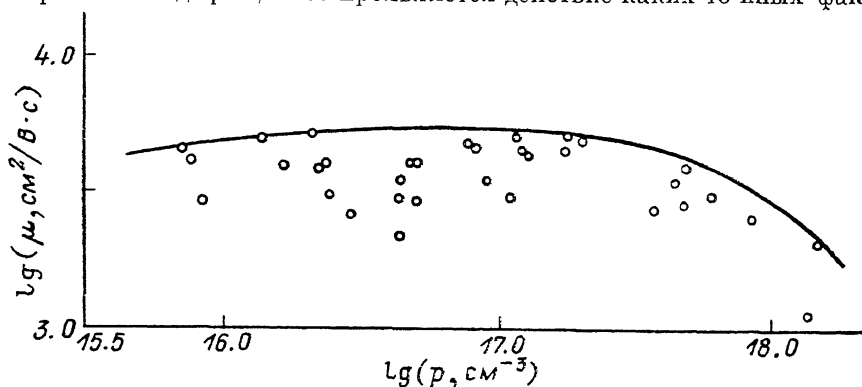


Рис. 1. Концентрационная зависимость подвижности при 77 К.

Более конкретно об этом можно было бы судить на основании количественного анализа полученных результатов. Однако строгое проведение последнего применительно к исследуемому материалу затруднено ввиду неизвестности большинства необходимых для теоретического расчета подвижности параметров. Поэтому нами был проведен качественный анализ результатов эксперимента, когда при расчетах подвижности некоторые параметры, определяющие ее, принимались такими же, как в близких по составу тройных аналогах, другие определялись путем экстраполяций с использованием известных значений для таких аналогов или бинарных соединений. Эффективная масса плотности состояний служила подгоночным параметром.

Значения параметров,
при которых рассчитывалась температурная зависимость подвижности
при совокупном влиянии всех механизмов рассеяния

Параметр	Значение	Примечание
Эффективная масса плотности состояний при 77 К m_d^*	0.14 m_0	Подгоночный параметр
Коэффициент анизотропии эффективной массы K_m	1.6	Типичное значение для сульфидов-селенидов свинца [6,7]
Константа деформационного потенциала E_I	30 эВ	Типичное значение для $A^{IV}B^{VI}$ [6,7]
Высокочастотная диэлектрическая проницаемость ϵ_∞		Значение для $PbS_{0.8}Se_{0.2}$ [8]
при 77 К	20	
при 300 К	18	
Статическая диэлектрическая проницаемость ϵ_0	192.5	Экстраполированное по известным для PbS , $PbSe$, $PbSnSe$ значения [7,9]
Ширина запрещенной зоны при 77 К E_g	0.237 эВ	[2]
Термический коэффициент ширины запрещенной зоны dE_g/dT	$4 \cdot 10^{-4}$ эВ/К	[2]
Температура Дебая θ	178.5 К	[2]
Упругая постоянная C_1	$5.25405 \cdot 10^{23}$ эВ/см ³	Наши данные
Сплавной потенциал $E_x^2x(1-x) + E_y^2y(1-y)$	0.034 эВ ²	По известным значениям E_g для тройных аналогов [5,7,9]

Значения величин, характеризующих процессы рассеяния дырок, при которых производился расчет и при которых расчетные зависимости $\mu(T)$ воспроизводят величину и основные особенности температурного изменения подвижности, приведены в таблице. Принятое при расчетах значение эффективной массы плотности состояний у потолка валентной зоны при 77 К $m_d^* = 0.14 m_0$ находится в разумном согласии с известными [5] значениями для PbSe ($m_d^* = 0.13 m_0$), PbS ($m_d^* = 0.23 m_0$), $Pb_{0.82}Sn_{0.08}Se$ ($m_d^* = 0.082 m_0$), $PbS_{0.8}Se_{0.2}$ ($m_d^* = 0.21 m_0$) и не противоречит исходной предпосылке с невырожденным состоянием

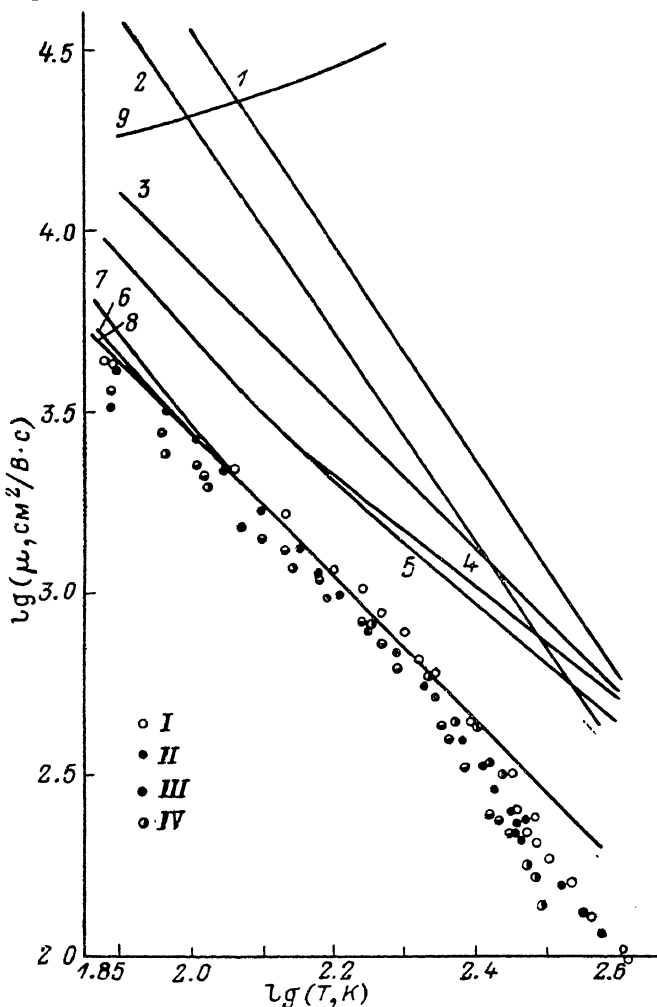


Рис. 2. Температурная зависимость подвижности.

Точки — экспериментальные результаты, сплошные линии — расчетные зависимости. $p \cdot 10^{-16}$, $см^{-3}$: I — 0.74, II — 4.7, III — 8.8, IV — 10. Расчетная подвижность при рассеянии. 1, 2 — на акустических фоновых при деформационном потенциале E_1 30 (1) и 40 эВ (2); 3 — на ситлавном потенциале; 4, 5 — на оптических фонах при $\varepsilon_\infty = \text{const}$ (4) и $\varepsilon_\infty = f(T)$, согласно таблице (5); 9 — на ионах примеси с концентрацией $N_i = 5 \cdot 10^{19} см^{-3}$; 7 — на оптических, акустических фонах и ситлавном потенциале; 6, 8 — всеми механизмами при $N_i = 1.5 \cdot 10^{19}$ (6) и $2 \cdot 10^{19} см^{-3}$ (8).

дырок в образцах, принятой при расчетах подвижности. При такой m_d^* и $T = 77$ К в предположении кейновского закона дисперсии уровень Ферми должен пересекать край валентной зоны при $p \approx 1.5 \cdot 10^{17} см^{-3}$. Это значение в свою очередь хорошо коррелирует с концентрацией $p = 2 \cdot 10^{17} см^{-3}$, при которой, как отмечалось выше, проявляется тенденция к уменьшению подвижности при росте концентрации дырок. Вырождение же, как известно, является одним из факторов, понижающих подвижность носителей при $T = \text{const}$.

Расчет температурной зависимости подвижности дырок производился по формулам работы [6], полученным вариационным методом в предположении

кейнсовского закона дисперсии, невырожденной статистики и записанным для случая, когда учитывается один вариационный параметр. Для качественного анализа такая точность является вполне достаточной. При расчетах учитывались неупругое рассеяние дырок на полярных оптических фононах, а также упругое рассеяние на акустических фононах, ионах примеси и сплавном потенциале. Три последних механизма рассеяния учитывались в приближении времени релаксации.

Результаты расчетов, представленные на рис. 2, свидетельствуют о том, что указанных механизмов рассеяния вполне достаточно, чтобы объяснить температурную зависимость подвижности по крайней мере в области температур ниже 200 К. При этом необходимо допустить весьма существенную зависимость эффективной массы от температуры $m_0^* \sim T^{0.6}$, что, однако, характерно для материалов данного класса [7]. Согласно рис. 2, сделаем следующие выводы.

В наиболее совершенных кристаллах в рассматриваемом диапазоне температур и концентраций основную роль в рассеянии дырок играют оптические фононы. Для корректного учета их влияния на подвижность дырок желательно учитывать температурную зависимость диэлектрической проницаемости.

Весьма существенную роль в ограничении подвижности дырок играет рассеяние на сплавном потенциале. Это может быть одной из причин того, что подвижность дырок в исследуемом четырехкомпонентном твердом растворе меньше соответствующих величин для бинарных соединений PbS, PbSe и их тройных твердых растворов.

При температурах порядка комнатной заметную роль в процессах рассеяния начинают играть акустические фононы, в то время как в области азотных температур необходимо учитывать рассеяние дырок на ионизированных примесях. Концентрация последних в исследуемом материале, по-видимому, на 1—2 порядка выше концентрации дырок, что можно связать с его склонностью к самокомпенсации [1]. Большой разброс экспериментальных значений подвижности дырок различных образцов, скорее всего, и связан с различной степенью компенсации электрически активных структурных дефектов.

В области температур выше температуры излома зависимости $\mu(T)$ между теоретическими и экспериментальными результатами имеется существенное расхождение, которое не удастся устранить увеличением в разумных пределах значения константы деформационного потенциала. В принципе можно указать много причин, которые могли бы усилить зависимость $\mu(T)$ в указанной области температур. В частности, к этому могли бы привести усиление температурной зависимости эффективной массы, включение в процессы переноса тяжелых дырок и т. п. Однако имеющихся на данный момент сведений об исследуемом материале явно недостаточно, чтобы сделать обоснованное заключение о факторах, дополнительно ограничивающих величину подвижности в указанной области температур.

Список литературы

- [1] Гарасим В. И., Драпак З. Т., Заячук Д. М. и др. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1985. Т. 21. В. 6. С. 910—913.
- [2] Гарасим В. И., Заячук Д. М., Лотоцкий В. Б., Старик П. М. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1988. Т. 24. В. 11. С. 1775—1778.
- [3] Garasim V. I., Zayachuk D. M., Ivanchuk R. D. et al. // Phys. St. Sol. (a). 1989. V. 111. P. K99.
- [4] Вершигора З. К., Гуцуляк В. Г., Орлецкий В. Б. // Физические основы полупроводникового материаловедения. Киев, 1982. С. 59—66.
- [5] Prier H. // Appl. Phys. 1979. V. 20. N 1. P. 189—206.
- [6] Гавалешко Н. П., Горлей Н. П., Шендеровский В. А. Узкозонные полупроводники. Получение и физические свойства. Киев, 1984. 288 с.
- [7] Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS. М., 1968. 383 с.
- [8] Сиятинский А. А., Шотов А. П. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 12. С. 2187—2190.
- [9] Rogalski A., Larkowski W. // Biul. WAN. J. Dabrowskiego. 1985. V. 34. N 5. P. 55—66.

Черновицкий государственный
университет

Получена 1.02.1990
Принята к печати 15.08.1990