

КОНЦЕНТРАЦИЯ СОБСТВЕННЫХ НОСИТЕЛЕЙ И ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНОВ В $Mn_xHg_{1-x}Te$

Боднарук О. А., Горбатюк И. Н., Остапов С. Э., Раренко И. М.

Рассчитаны концентрация собственных носителей, эффективная масса электронов и энергия Ферми в твердом растворе $Mn_xHg_{1-x}Te$ ($0.07 < x < 0.2$) при температурах $50 < T < 300$ К. Расчеты проведены к-р-методом. Предлагаются эмпирические выражения для ширины запрещенной зоны и концентрации собственных носителей в $Mn_xHg_{1-x}Te$.

Введение. Перспективность $Mn_xHg_{1-x}Te$ (МРТ) как альтернативного $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) материала для изготовления детекторов ИК излучения хорошо известна [1-2]. Марганец здесь, как и кадмий в КРТ, является двухвалентным положительным ионом. Ионный радиус Mn^{2+} несколько меньше, чем Hg^{2+} , и, вероятно, этот факт является причиной более высокого кристаллического совершенства [3] и, как следствие, большей стабильности МРТ по сравнению с КРТ [4]. Возможно, по этой же причине в МРТ наблюдается меньшая плотность поверхностных состояний [5].

Несмотря, однако, на всю перспективность материала, многие фундаментальные параметры МРТ вследствие сложности получения чистых и качественных кристаллов недостаточно хорошо изучены. В частности, это относится к ширине запрещенной зоны и концентрации собственных носителей.

В настоящее время авторам известны три различные зависимости $E_g(x, T)$:

$$а) E_g(x, T) = -0.305 + 5.5 \cdot 10^{-4}T + 4.4x, \quad (1)$$

опубликованная в [6];

$$б) E_g(x, T) = -250 + 34.88x + (0.52 + 0.0206x)T, \quad (2)$$

опубликованная Яником и Карчевским [7] (а также см. [8]);

$$в) E_g(x, T) = -0.253 + 3.446x + 4.9 \cdot 10^{-4}T - 2.55 \cdot 10^{-3}xT. \quad (3)$$

В формулах (1)–(3) x — стехиометрическое соотношение компонентов, T — температура, причем (1) и (3) дают E_g в эВ (если x — в долях), а (2) — в мэВ (где x — в процентах). Как видим, все три формулы описывают линейную зависимость $E_g(x, T)$ и имеют значительные расхождения в значениях.

1. Метод расчета

Поскольку валентная зона, как и зона проводимости в МРТ, непараболична, нами в расчетах использовалась модель Кейна.

Концентрация электронов n вычислялась из выражения, полученного Шмитом [9]:

$$n = \frac{2N_c}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{z^{1/2} (1+z+\Phi)^{1/2} (1+2z+\Phi) dz}{1+\exp(z-\eta)}, \quad (4)$$

где N_c — эффективная плотность состояний в зоне проводимости; $z = \left\{ -E_g + [E_g^2 + E_g (h^2 k^2 / 2m_{e0}^*)]^{1/2} \right\} / 2k_B T$ — переменная интегрирования; $\Phi = -E_g / k_B T$ — приведенная ширина запрещенной зоны; $\eta = E_F / k_B T$ — приведенная энергия Ферми; k_B — постоянная Больцмана; k — волновой вектор. Эффективная масса у дна зоны проводимости

$$\frac{1}{m_{e0}^*} = \frac{4P^2(x)}{3h^2 E_g} \frac{\Delta + 3/2 E_g}{\Delta + E_g}. \quad (5)$$

Влияние спин-орбитального расщепления Δ на m_{e0}^* существенно лишь при больших x , когда $\Delta \approx E_g$. Мы принимали $\Delta = 1.08$ эВ, а матричный элемент $P(x) = (8.35 - 7.94x) \cdot 10^{-8}$ эВ · см [8].

Расчет концентрации дырок в валентной зоне проводился по формуле [9, 10]

$$p = 4\pi \left(\frac{2k_B m_{hh}^* T}{h^2} \right)^{3/2} F_{1/2}(\eta + \Phi), \quad (6)$$

где $F_{1/2}(\eta + \Phi)$ — функция Ферми—Дирака. Зона тяжелых дырок принималась параболической, а $m_{hh}^* = 0.55 m_0$ [7, 8], где m_0 — масса свободного электрона.

Методика расчета была следующей. Для определенных значений x и T вычислялась $E_g(x, T)$. Затем для произвольного η рассчитывались значения n и p с точностью до 0.1 % и решалось уравнение $n - p = 0$ методом дихотомии. Значение η , при котором $n = p$, принималось за истинное значение приведенного уровня Ферми, а $n_i = n = p$.

Результаты расчетов концентрации собственных носителей в МРТ использовались для вычисления параболического эквивалента эффективной массы электрона m_{ep}^* [9]:

$$\frac{m_{ep}^*}{m} = \exp \left[\frac{4}{3} \ln \left(\frac{n_i h^3}{2 (2\pi k_B T)^{3/2} m_{hh}^*{}^{3/4} \exp(-E_g / 2k_B T)} \right) \right] \quad (7)$$

и зависимости эффективной массы от n_i в случае сильного вырождения [10]:

$$\left(\frac{m_e^*}{1 - m_e^*} \right)^2 = 32.5 \cdot 10^{-32} E_g^2 / P^4 + 8.27 \cdot 10^{-30} n_i^{2/3} / P^2. \quad (8)$$

2. Экспериментальные результаты

Теоретические вычисления концентрации собственных носителей, представленные в настоящей работе, сравнивались с экспериментальными результатами, выполненными на кристаллах МРТ, выращенных модифицированным методом зонной плавки [11]. Полученные слитки диаметром $12 \div 20$ мм и длиной $12 \div 18$ см имели на среднем однородном участке осевую неоднородность $\Delta x_L \leq \pm 0.01$ и радиальную $\Delta x_r \leq \pm 0.005$.

Образцы для исследования в виде параллелепипедов размерами $(0.6 \div 1) \times (1.2 \div 1.5) \times (8 \div 10)$ мм вырезались из кристаллических пластин, отрезанных от слитка перпендикулярно оси роста. Кристаллические пластины выбранного состава переводились в n -тип проводимости путем низкотемпературного ($T \leq 300$ °C) отжига в насыщенных парах ртути. Механическая и химическая обработка образцов не отличалась от стандартной, применяемой обычно при изготовлении образцов КРТ, и предусматривала отсутствие нарушенных слоев. Состав

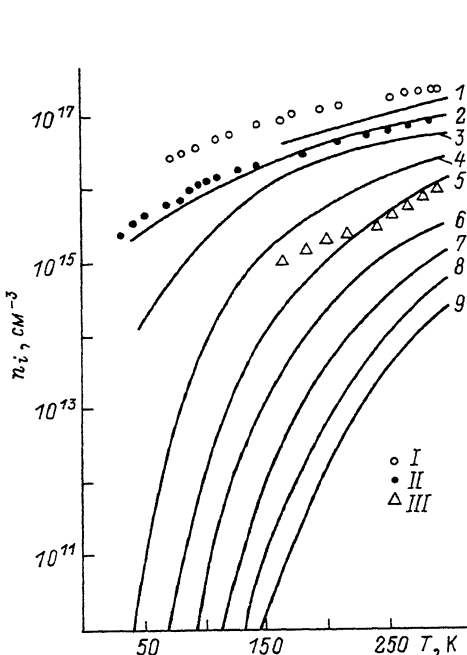


Рис. 1. Температурная зависимость концентрации собственных носителей в $Mn_xHg_{1-x}Te$.

I—III — экспериментальные результаты; x : 1 — 0.06, 2 — 0.07, 3 — 0.08, 4 — 0.1, 5 — 0.12, 6 — 0.14, 7 — 0.16, 8 — 0.18, 9 — 0.2.

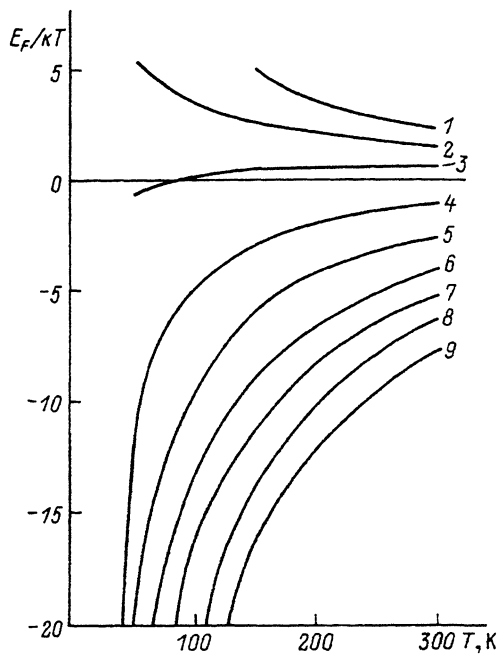


Рис. 2. Температурная зависимость приведенного уровня Ферми для различных составов $Mn_xHg_{1-x}Te$.

Обозначения те же, что на рис. 1.

образцов контролировался на микроанализаторе «Camscan-4DV» и не отличался вдоль образца более чем на $\Delta x = \pm 0.003$.

3. Обсуждение результатов

Результаты расчетов $n_i(x, T)$ и сравнение их с нашими экспериментальными данными показали, что формулы (1) и (2) дают несколько завышенные значения E_g (в $\sim 1.5 \div 2$ раза) по сравнению с реальными.

Что касается формулы (3), то из приведенных нами она наиболее точна. Этот факт отмечается и авторами работы [8], в которой проведены аналогичные вычисления. Однако в указанной работе отсутствует сравнение с экспериментом, что затрудняет интерпретацию результатов. Как показали проведенные нами расчеты, точность (3) ухудшается для составов $x < 0.1$ и температуры $T < 100$ К.

Исходя из этого, мы предлагаем формулу для вычисления ширины запрещенной зоны в МРТ, с помощью которой было получено наилучшее совпадение проведенных расчетов с экспериментом:

$$E_g(x, T) = -0.302 + 4.9 \cdot 10^{-4} (1 - 4.7x) T + 4.24x - 2.21x^2 - 0.068x^3. \quad (9)$$

Расчитанные с помощью (9) зависимости $n_i(T)$ для составов $0.07 < x < 0.2$ показаны на рис. 1. Видно, что теоретические кривые хорошо совпадают с экспериментальными результатами.

На рис. 2 представлены температурные зависимости приведенной энергии Ферми для того же диапазона составов. Энергия Ферми здесь отсчитывается от дна зоны проводимости. Анализ этих зависимостей показывает, что МРТ остается

Рис. 3. Температурная зависимость параболического эквивалента эффективной массы электронов в $Mn_xHg_{1-x}Te$.

невырожденным при температурах $T \geq 50$ К для составов $x \geq 0.1$, что согласуется с выводами работы [8].

Температурная зависимость m_{ep}^* показана на рис. 3. Как показывают оценки, значения m_{ep}^* отличаются от определенных по формуле (5) не более чем на 30 %.

Зависимости эффективной массы электрона от концентрации носителей в случае сильного вырождения изображены на рис. 4, 5. Как видно из рисунков, в области составов, представляющих практический интерес (правая часть рисунков), эффективная масса прямо пропорциональна ширине запрещенной зоны.

Из всего вышесказанного следует, что поскольку непараболическость зон, определяемая разностью между m_{ep}^* и m_{e0}^* , невелика, мы можем описать $n_i(x, T)$ в приближении параболических зон:

$$n_i(x, T) = (5.14 - 1.4x + 0.0095T - 0.45xT + 36.23x^2) \times 10^{14} E_g^{3/4} T^{3/2} (-E_g / 2k_B T). \quad (10)$$

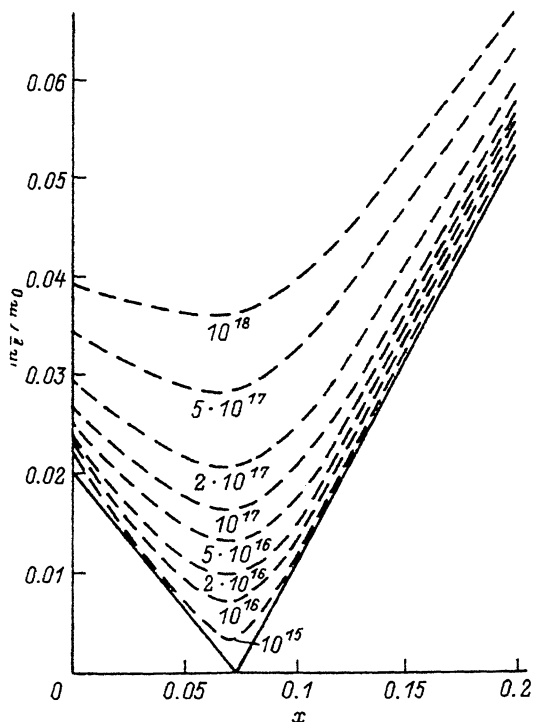
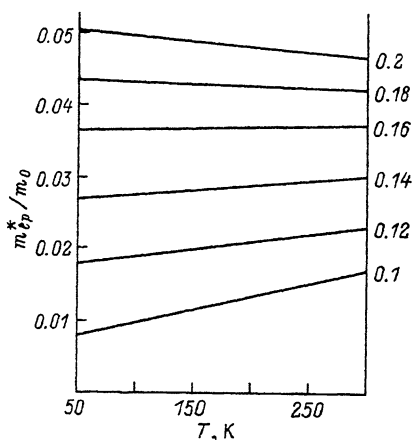


Рис. 4. Зависимость эффективной массы электронов от состава в вырожденном $Mn_xHg_{1-x}Te$ ($T = 77$ К).

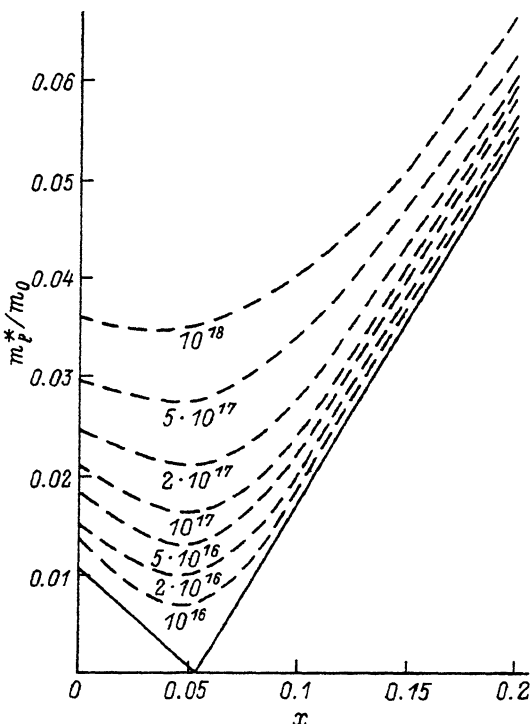


Рис. 5. Зависимость эффективной массы электронов от состава в вырожденном $Mn_xHg_{1-x}Te$ ($T = 300$ К).

Это выражение описывает концентрацию свободных носителей для $0.08 \leq x \leq 0.2$ и $50 \leq T \leq 300$ К. Погрешность вычислений n_i по формуле (10) составляет в среднем 7 %. Минимальная погрешность ≤ 3 % достигается для составов $x = 0.1 \div 0.12$, максимальная — 26 % — для $x = 0.18$ при температуре 300 К.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Furdyna J. K. // Proc. Soc. Photo-Opt. Instrum. Eng. 1983. V. 409. P. 43—52.
- [2] Furdyna J. K. // J. Vac. Sci. Techn. 1986. V. A4. N 4. P. 2002—2009.
- [3] Боднарук О. А., Горбатюк И. Н. и др. // Матер. Всес. конф. «Фотоэлектрические явления в полупроводниках». Ташкент, 24—26 октября 1989 г. Киев, 1989. С. 346—347.
- [4] Горбатюк И. Н., Каленик В. И., Остапов С. Э. и др. // Матер. II Всес. сем. «Примеси и дефекты в узкозонных полупроводниках». Павлодар, 1989. Ч. 1. С. 99—102.
- [5] Золотарев С. В., Горбатюк И. Н., Каленик В. И. и др. // Тез. докл. III Респ. школы-конференции молодых ученых «Актуальные проблемы физики полупроводников». Киев, 1989. С. 62.
- [6] Цидильковский И. М. Электронный спектр бесщелевых полупроводников. Свердловск, 1991. 224 с.
- [7] Janik E., Karczewski G. // Acta Physica Polonica. 1988. V. A73. N 3. P. 439—442.
- [8] Rogalski A., Jozwidowski K. // Phys. St. Sol. (a). 1990. V. 112. N 1. P. K34—K43.
- [9] Schmit J. // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. N 7. P. 2876—2879.
- [10] Wright G. B., Strauss A. J., Harman T. C. // Phys. Rev. 1962. V. 125. P. 1543.
- [11] Остапов С. Э., Горбатюк И. Н., Раренко А. И. // Тез. докл. III Всес. конф. «Моделирование роста кристаллов». Рига, 1990. Ч. 3. С. 255—256.

Черновицкий государственный университет

Получена 10.07.1991
Принята к печати 22.10.1991