

Ширина запрещенной зоны и концентрация собственных носителей в твердых растворах HgCdMnTe и HgCdZnTe

© О.А. Боднарук, А.В. Марков, С.Э. Остапов[¶], И.М. Раренко, А.Ф. Слонецкий

Черновицкий государственный университет им. Ю. Федьковича,
58012 Черновцы, Украина

(Получена 27 апреля 1999 г. Принята к печати 28 октября 1999 г.)

В работе представлены теоретические и экспериментальные исследования основных зонных параметров четырехкомпонентных твердых растворов HgCdMnTe и HgCdZnTe, в результате которых предлагаются эмпирические формулы для ширины запрещенной зоны и концентрации собственных носителей данных материалов в широком диапазоне температур и составов. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Твердые растворы HgCdTe обладают рядом уникальных физических свойств, что делает материалы данного типа привлекательными для создания детекторов инфракрасного излучения. Однако их широкому применению препятствует нестабильность данного материала. В работе [1] теоретически было показано, что эта нестабильность вызвана достаточно сильными различиями атомных радиусов Cd и Hg. Следовательно, стабильность материала должна возрастать при введении Mn или Zn, так как их атомный радиус ближе к радиусу атомов Hg.

Несмотря на перспективность таких материалов, как HgCdMnTe и HgCdZnTe, основные их параметры недостаточно хорошо изучены. В первую очередь это можно отнести к ширине запрещенной зоны, концентрации собственных носителей и эффективной массе электронов.

Основные зонные параметры четырехкомпонентных твердых растворов HgCdMnTe и HgCdZnTe могут быть рассчитаны с использованием метода, предложенного в работе [2], где исходный раствор рассматривается как комбинация трех тройных растворов. Однако, поскольку данная методика расчета достаточно громоздка, нами был применен более простой метод [3], в котором четырехкомпонентный материал представляется как совокупность двух тройных. С использованием данной методики формула для ширины запрещенной зоны, например, HgCdMnTe примет вид

$$E_g(\text{Hg}_z\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}) = 0.5E_g(\text{Hg}_{1-u}\text{Cd}_u\text{Te}) + 0.5E_g(\text{Hg}_{1-w}\text{Mn}_w\text{Te}), \quad (1)$$

где $u = 2x$, $w = 2y$, $z = 1 - x - y$. Используя эмпирические формулы ширины запрещенной зоны для HgCdTe [4], HgZnTe [5] и HgMnTe [6], величины для E_g в $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ получим

$$E_g(x, y, T) = -0.302 + 5.125 \cdot 10^{-4}T - (x + 2.287y) \cdot 10^{-3}T + 1.93(x + 2.197y) - 1.62(x^2 + 2.728y^2) + 0.272(12.235x^3 - y^3), \quad (2)$$

а для E_g в $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Te}$ —

$$E_g(x, y, T) = -0.301 + 1.93x + 2.29 \cdot 10^{-2}y^{1/2} + 2.731y - 1.62x^2 + 5.35 \cdot 10^{-4}T \times (1 - 2x - 0.35y^{1/2} - 1.28y) + 3.328x^3 - 1.248y^2 + 2.132y^3. \quad (3)$$

Точность соотношения (2) была проверена путем сравнения с результатами работы [7] при $T = 7$ К (см. рис. 1), а также с результатами [8] при $T = 300$ К. Проверка выражения (3) осуществлялась путем сравнения с данными, полученными в работе [9] для HgCdZnTe (см. табл. 1).

Как следует из рисунка и таблицы, эмпирические формулы (2) и (3) достаточно точно описывают поведение ширины запрещенной зоны для HgCdMnTe и HgCdZnTe при различных составах и температурах.

Используя соотношения (2) и (3), мы рассчитали концентрацию собственных носителей, положение уровня Ферми и эффективную массу электронов для исследуемых материалов. Методика расчетов на основе $k-p$ -метода подробно изложена в работе [6].

Теоретические расчеты концентрации собственных носителей сравнивались с данными холловских измерений, которые были получены на кристаллах HgCdMnTe и HgCdZnTe, выращенных модифицированным методом зонной плавки [10]. Слитки диаметром 12–20 мм и длиной 12–18 см имели на среднем, достаточно однородном участке осевую неоднородность $\Delta x_L \lesssim \pm 0.01$ и

Таблица 1. Сравнение расчетов по формуле (3) с результатами работы [9] для HgCdZnTe при $T = 95$ К

Состав		$E_g, \text{эВ}$		
x	y	расчет [9]	эксперимент [9]	расчет по формуле (3)
0.07	0.17	0.322	0.328	0.301
0.07	0.20	0.382	0.383	0.374
0.12	0.18	0.416	0.409	0.406
0.07	0.16	0.282	0.277	0.276

[¶] E-mail: ostap@chdu.cv.ua

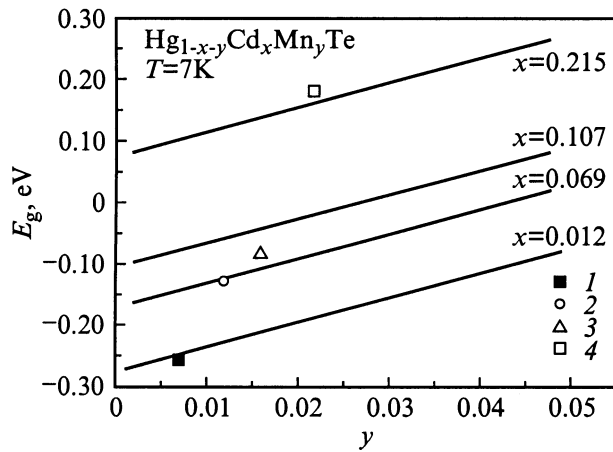


Рис. 1. Зависимости ширины запрещенной зоны HgCdMnTe от содержания Mn. Сплошные линии — расчет по формуле (2), точки — экспериментальные данные из работы [7]. Мольные доли Cd (x) и Mn (y), %: 1 — 12 и 7, 2 — 6.9 и 1.2, 3 — 10.7 и 1.6, 4 — 21.5 и 2.2

радиальную $\Delta x_R \lesssim \pm 0.005$. Механическая и химическая обработка образцов для измерений не отличалась от стандартной обработки пластин HgCdTe, предусматривающей отсутствие нарушенных слоев. Состав контролировался на микроанализаторе "Camscan-4DV" и колебался вдоль образца не более чем на величину $\Delta x = \pm 0.003$.

Результаты расчетов концентрации собственных носителей в сравнении с данными холловских измерений представлены на рис. 2 и 3. Как видно из рисунков, наблюдается достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными в области собственной проводимости материалов. Дополнительное сравнение расчетов с данными работы [9] показало, что, несмотря на различные методы вычисления ширины запрещенной зоны, значения n_i совпадают с точностью до 3–4%.

Проведенные оценки показали, что нестабильность зоны проводимости данных материалов невелика (параболический эквивалент эффективной массы отличается от точных значений не более чем на 30%), что дает нам возможность применить параболическое приближение для расчета концентрации собственных носителей исследуемых материалов. С помощью метода наименьших квадратов были получены следующие эмпирические соотношения для концентрации n_i .

Для $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ (применимо в диапазонах $0 \leq x \leq 0.5$, $0.03 \leq y \leq 0.2$, $50\text{K} \leq T \leq 350\text{K}$)

$$n_i(x, y, T) = [5.84 - 4.42x + 2.87y + 2.53 \cdot 10^{-3} \times (1 + x + y)] \cdot 10^{14} E_g^{0.75} T^{1.5} \exp(-E_g/2kT), \quad (4)$$

и для $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Te}$ (применимо в диапазонах $0 \leq x \leq 0.5$, $0.03 \leq y \leq 0.5$, $50\text{K} \leq T \leq 350\text{K}$)

$$n_i(x, y, T) = [6.48 - 4.42x - 6.54y + 1.42 \cdot 10^{-3} \times (1 + x + y)] \cdot 10^{14} E_g^{0.75} T^{1.5} \exp(-E_g/2kT). \quad (5)$$

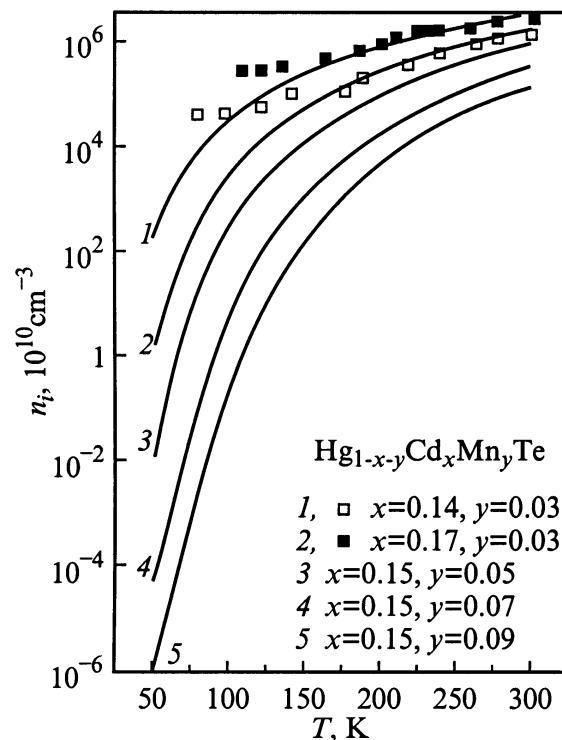


Рис. 2. Расчетные и экспериментальные температурные зависимости концентрации собственных носителей в твердом растворе $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$.

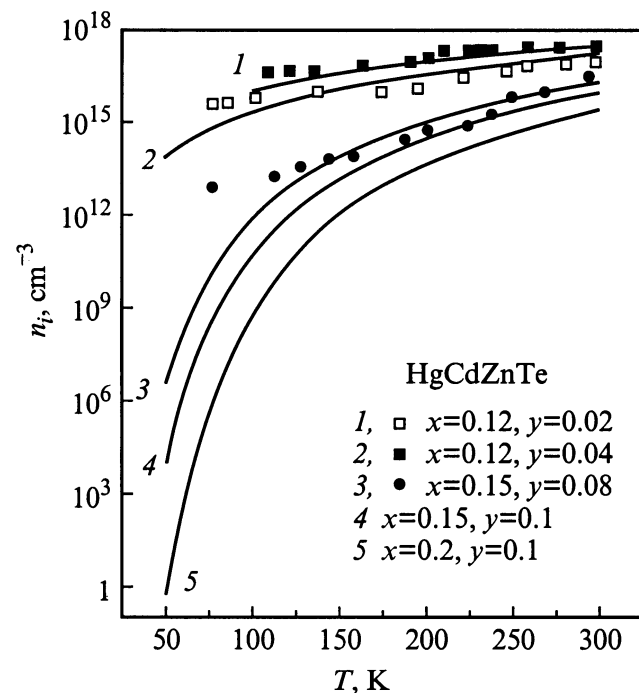


Рис. 3. Расчетные и экспериментальные температурные зависимости концентрации собственных носителей в твердом растворе $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Zn}_y\text{Te}$.

Таблица 2. Коэффициенты A , B , C , D в соотношении (6) для HgCdMnTe и HgCdZnTe

Материал	A	B	C	D
HgCdMnTe	6.48	-4.42	-6.54	$1.42 \cdot 10^{-3}$
HgCdZnTe	5.84	-4.42	2.87	$2.53 \cdot 10^{-3}$

Таким образом, для концентрации собственных носителей в HgCdMnTe и HgCdZnTe в параболическом приближении существует эмпирическая формула вида

$$n_i(x, y, T) = \left[A + Bx + Cy + DT(1 + x + y) \right] \cdot 10^{14} \times E_g^{0.75} T^{1.5} \exp(-E_g/2kT) \quad (6)$$

с коэффициентами A , B , C , D , представленными в табл. 2.

Применение формулы (6) с указанными коэффициентами для вычисления концентрации собственных носителей в HgCdMnTe и HgCdZnTe в параболическом приближении дает погрешность не более 4% в температурном диапазоне 50–350 К для широкого спектра составов.

Список литературы

- [1] A. Sher, A. Chen, W. Spicer, C. Shih. J. Vac. Sci. Technol., **A3**, 105 (1985).
- [2] C.K. Williams, T.H. Glisson, J.R. Hauses, M.A. Littlejohn. J. Electron. Mater., **7**, 639 (1978).
- [3] S.E. Ostapov, O.A. Bodnaruk, I.N. Gorbatiuk, I.M. Rarenko. *School-conf. PPMSS* (Chernivtsi, Ruta, 1995) p. 158.
- [4] G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Cusselman. J. Appl. Phys., **53**, 7099 (1982).
- [5] K. Joswikowski, A. Rogalski. Infr. Phys., **28**, 101 (1988).
- [6] О.А. Боднарук, И.Н. Горбатюк, С.Э. Остапов, И.М. Раренко. ФТП, **26** (3), 468 (1992).
- [7] S. Takeyama, S. Narita. J. Phys. Soc. Japan, **55**, 274 (1986).
- [8] U. Debska, M. Dietl, G. Grabecki, E. Janik, E. Kierzek-Pecold, M. Klimkiewicz. Phys. St. Sol. (a), **64**, 707 (1981).
- [9] N.L. Bazhenov, A.M. Andrukiv, V.I. Ivanov-Omskii. Infr. Phys., **34** (4), 357 (1993).
- [10] О.А. Боднарук, И.Н. Горбатюк, С.Э. Остапов, И.М. Раренко, В.П. Шафранюк, С.В. Ничий. Неорг. матер., **31**(10), 1347 (1995).

Редактор Т.А. Полянская

Energy gaps and intrinsic carrier concentrations in HgCdMnTe and HgCdZnTe

O.A. Bodnaruk, A.V. Markov, S.E. Ostapov, I.M. Rarenko and A.F. Slonetsky

Yu. Fedkovitch chernovtsy State University
58012 Chernovtsy, Ukraine

Abstract Theoretical and experimental investigations of the main zone parameters of quaternary solid solutions HgCdMnTe and HgCdZnTe are presented. As a result of these investigations empirical formulas for the energy gap width and the intrinsic carrier concentration in a wide range of temperatures and compositions are suggested. Results of the theoretical calculations agree well with experimental data.