

Закрепление химического потенциала и электрические свойства облученных сплавов $Cd_xHg_{1-x}Te$

© В.Н. Брудный[†], С.Н. Гриняев

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова,
634050 Томск, Россия

(Получена 5 декабря 2000 г. Принята к печати 27 декабря 2000 г.)

Теоретически исследована композиционная зависимость уровня локальной электронейтральности E_{lnl} в сплавах $Cd_xHg_{1-x}Te$. Показано, что для составов $x < 0.47$ уровень E_{lnl} расположен в области разрешенных энергий зоны проводимости, а для $x > 0.47$ — в верхней половине запрещенной зоны. Из отождествления расчетных значений E_{lnl} и предельного положения уровня Ферми F_{lim} в облученном высокоэнергетическими частицами $Cd_xHg_{1-x}Te$ делается вывод о том, что этим обусловлен соответственно n^+ - или n -тип проводимости такого материала.

Введение

Твердые растворы $Cd_xHg_{1-x}Te$ позволяют в широких пределах (от 1 до 1.6 эВ) варьировать ширину запрещенной зоны за счет изменения состава x при практически неизменном параметре решетки. Именно это сделало их объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, особенно для целей оптоэлектроники.

Согласно современным данным, электрофизические, оптические и рекомбинационные характеристики $Cd_xHg_{1-x}Te$ зависят главным образом от присутствия в решетке структурных дефектов — ростовых дислокаций, малоугловых границ, кластеров собственных дефектов и точечных дефектов (вакансий, антиструктурных дефектов). При этом специально не легированные кристаллы имеют, как правило, p -тип проводимости, что обычно связывается с акцепторными состояниями вакансий Hg. Поэтому одна из проблем физики и технологии — умение управлять ансамблем и концентрацией собственных дефектов решетки в $Cd_xHg_{1-x}Te$. Для этого используются различные методы: выращивание материала в условиях управления парциальными давлениями компонент газовой фазы, гомогенизирующий отжиг материала в насыщенных парах Hg, химическое легирование расплава и т.п., а также внешние высокоэнергетические воздействия (бомбардировка электронами и ионами, лазерное облучение, пластическая деформация, ультразвуковая обработка, гидростатическое сжатие и др.), что позволяет в определенной степени управлять ансамблем структурных нарушений для получения материала с заданными свойствами.

В настоящей работе на основе теоретических исследований анализируются многочисленные экспериментальные данные по влиянию облучения частицами высоких энергий (электроны и ионы) на электрофизические характеристики сплавов $Cd_xHg_{1-x}Te$.

Результаты и их обсуждение

Несмотря на многочисленные экспериментальные исследования, остается не выясненным, почему высокоэнергетическое радиационное воздействие (бомбардировка электронами или ионами при различных температурах) приводит к формированию в $Cd_xHg_{1-x}Te$ областей электронного типа проводимости (n^+ — в случае малых концентраций Cd и n — в остальных случаях), например, [1–4]. Эта особенность поведения данного материала при высокоэнергетическом облучении используется для изменения его электрических свойств, получения материала n -типа проводимости, а также для создания p – n -переходов методами ионной бомбардировки.

Обычно такое поведение $Cd_xHg_{1-x}Te$ при высокоэнергетическом облучении пытаются связать со спецификой образования и накопления дефектов в данном материале, в частности с преимущественным формированием собственных дефектов решетки донорного типа. Мы покажем далее, что электронный тип проводимости облученных образцов $Cd_xHg_{1-x}Te$ определяется не характерным типом вводимых радиационных дефектов в этом материале, а обусловлен особенностями энергетического зонного спектра данного материала и его изменениями при вариации состава твердого раствора.

Исследования, выполненные нами ранее для полупроводников группы алмаза и бинарных соединений группы $A^{III}B^V$, показали, что электрофизические свойства облученных материалов могут быть проанализированы и описаны в рамках концепции локальной электронейтральности. Эта концепция интенсивно развивалась применительно к исследованиям границ раздела металл/полупроводник, гетеропары [5], а в последние годы использовалась при анализе электрофизических свойств объемных облученных полупроводников [6].

В соответствии с экспериментальными данными высокоэнергетическое облучение полупроводника всегда, независимо от условий облучения и предыстории материала, приводит к закреплению электронного химического потенциала (уровня Ферми) в предельном (стационарном) состоянии F_{lim} , характерном для каждого

[†] E-mail: brudnyi@ic.tsu.ru
Fax: (3822) 233034

Расчетные и экспериментальные значения некоторых межзонных зазоров для граничных составов сплава $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, использованные при оценке $E_{\text{inl}}(x)$

Материал	Зонные зазоры, эВ							
	$\Gamma_6^c - \Gamma_8^v$ E_g	$\Gamma_7^c - \Gamma_8^v$ E'_0	$L_6^c - L_{4,5}^v$ E_1	$X_6^c - \Gamma_8^v$ $E_{\Gamma X}$	$L_6^c - \Gamma_8^v$ $E_{\Gamma L}$	$X_6^c - X_7^v$ E_2	$\Gamma_8^v - \Gamma_7^v$ Δ_0	$L_{4,5}^v - L_6^v$ Δ_1
HgTe Расчет	-0.29	4.08	2.01	2.47	1.23	4.51	0.94	0.64
Эксперимент	-0.30 [14]	4.10 [13]	2.15 [10]			4.47 [10]	1.08 [12]	0.63 [10]
CdTe Расчет	1.58	5.46	3.64	3.41	2.88	5.11	0.89	0.54
Эксперимент	1.60 [15]	5.20 [13]	3.29 [10]			5.07 [10]	0.90 [11]	0.58 [10]

Примечание. Экспериментальные данные взяты из работ, указанных в скобках рядом с числами.

кристалла [6,7], а это в свою очередь определяет электронные свойства облученного материала. Было показано также, что стационарное положение уровня Ферми в облученном полупроводнике совпадает с уровнем локальной электронейтральности кристалла E_{inl} , которое может быть рассчитано теоретически. Именно это позволяет оценить ожидаемое стационарное положение уровня Ферми $F_{\text{lim}} \cong E_{\text{inl}}$ в облученном материале и тем самым не только проанализировать экспериментальные результаты, но и *a priori* рассчитать ожидаемые электрофизические параметры облученного полупроводника.

В представленной работе теоретически исследована композиционная и температурная зависимости положения уровня локальной электронейтральности $E_{\text{inl}}(x)$ в сплавах $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в зависимости от их состава. Расчет E_{inl} проведен на основе аналитического выражения [5]

$$\left| \sum_{c\mathbf{k}} \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})}{(E_{c\mathbf{k}} - E_{\text{inl}})} \right| = \left| \sum_{v\mathbf{k}} \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{R})}{(E_{v\mathbf{k}} - E_{\text{inl}})} \right|,$$

которое ранее применялось нами при аналогичных расчетах величины E_{inl} в твердых растворах полупроводников группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ [8]. Здесь $E_{c\mathbf{k}}(E_{v\mathbf{k}})$ — собственные значения энергии зон проводимости (валентных), \mathbf{k} — волновой вектор, \mathbf{R} — радиус-вектор решетки.

Это выражение, полученное как обобщение на трехмерный случай связи уровня E_{inl} с точкой ветвления комплексной зонной структуры одномерного кристалла, дает хорошее соответствие с экспериментальными данными по значениям $F_{\text{lim}} \cong E_{\text{inl}}$ для облученных полупроводников группы $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ и твердых растворов на их основе. Поскольку оценки величины E_{inl} в работе [5] для ряда полупроводников были выполнены на основе зонных спектров, полученных с использованием метода присоединенных плоских волн, который дает невысокую точность значений $E_{c\mathbf{k}}(E_{v\mathbf{k}})$, представлялось интересным провести расчеты положения E_{inl} в твердом растворе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ на основе метода, дающего более адекватное описание зонного спектра кристалла.

В работе при расчете зонного спектра сплава $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ использован метод модельного переносимого псевдопотенциала, который является эффективным с точки зрения полноты и точности получения данных об

электронном спектре кристалла. Детали метода изложены в работе [9], здесь лишь отметим, что по сравнению с [9] были дополнительно учтены нелокальные поправки к псевдопотенциалу, позволившие получить лучшее согласие с экспериментальными данным по энергиям межзонных оптических переходов.

Вычисленные нами количественные параметры некоторых межзонных зазоров для граничных составов твердого раствора $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ совместно с надежными экспериментальными данными подтверждают высокое качество использованных при оценке $E_{\text{inl}}(x)$ зонных спектров материалов (см. таблицу).

Расчетная композиционная зависимость значений первых межзонных переходов в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ представлена на рис. 1. Можно отметить, что концентрационная зависимость ширины запрещенной зоны $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, изученная в [16] на основе методов сильной связи с учетом эффектов химического разупорядочения, выявляет слабую нелинейность E_g $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ в зависимости от состава x , связанную с беспорядком в замещении атомов катионной подрешетки, что обусловлено близостью потенциалов Cd и Te. Эти исследования хорошо подтверждаются экспериментальными данными по зависимости величины зазора $\Gamma_6^c - \Gamma_8^v$ от состава сплава при $T = 2\text{ K}$ [17]. Это

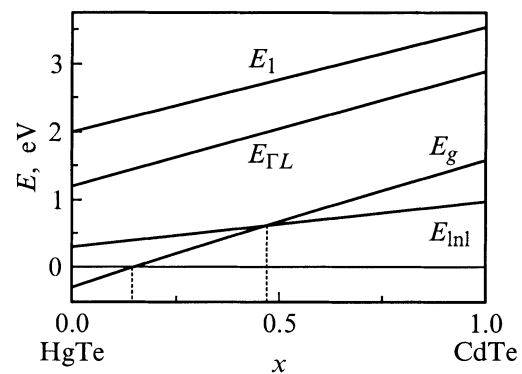


Рис. 1. Расчетная композиционная зависимость межзонных зазоров $\Gamma_6^c - \Gamma_8^v = E_g$, $L_6^c - \Gamma_8^v = E_{\Gamma L}$, $L_6^c - L_{4,5}^v = E_1$ и положения уровня локальной электронейтральности E_{inl} (относительно уровня Γ_8^v) в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($T = 0\text{ K}$).

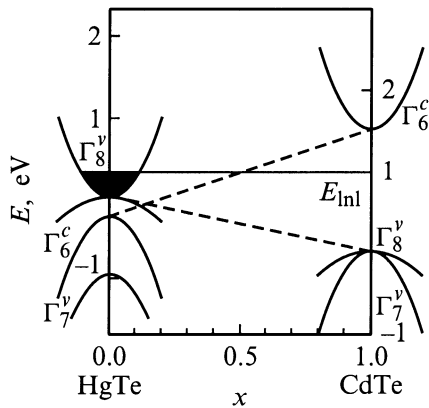


Рис. 2. Изменение положения уровней Γ_6^c , Γ_7^v , Γ_8^v относительно уровня локальной электронейтральности E_{lnl} при изменении содержания Cd в сплаве $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($T = 0\text{ K}$).

позволяет использовать для расчета межзонных зазоров в $Cd_xHg_{1-x}Te$ приближение виртуального кристалла.

Полученные значения расчетных межзонных зазоров в сплаве хорошо согласуются с экспериментальными данными. Так, величина критической концентрации перехода к бесщелевому материалу ($x_c \cong 0.14$) близка к литературным данным. Композиционные зависимости наименьших по энергии прямых переходов $\Gamma_6^c - \Gamma_8^v$, $L_6^c - L_{4,5}^v$ и непрямого перехода $L_6^c - \Gamma_8^v$ получились практически линейными (рис. 1).

Вычисление значений E_{lnl} для различных составов твердого раствора проводилось по методу специальных точек (10 точек) [18] с учетом 100 спин-орбит. Получены (при $T = 0\text{ K}$) расчетные значения $E_{lnl}(HgTe) = E_v + 0.32\text{ эВ}$ и $E_{lnl}(CdTe) = E_v + 0.98\text{ эВ}$, при этом композиционная зависимость $E_{lnl}(x)$ почти линейна. Расчетные композиционные зависимости положения уровней Γ_8^v , Γ_6^c и Γ_7^v относительно уровня локальной электронейтральности E_{lnl} представлены на рис. 2. Эти зависимости могут быть использованы для анализа и прогнозирования электронных свойств облученного $Cd_xHg_{1-x}Te$. Действительно, в соответствии с представленными данными уровень Ферми в облученном $Cd_xHg_{1-x}Te$ закрепляется в зоне проводимости (для $x \leq 0.47$), что соответствует материалу n^+ -типа проводимости, и в верхней половине запрещенной зоны для составов $x > 0.47$, что соответствует материалу n -типа проводимости. Эти расчеты хорошо подтверждаются многочисленными экспериментальными исследованиями облученного $Cd_xHg_{1-x}Te$, например, [1–4].

Таким образом, результаты численных ошибок положения уровня $E_{lnl}(x) \cong F_{lim}(x)$ показывают, что электронный тип проводимости образцов $Cd_xHg_{1-x}Te$, облученных частицами высоких энергий, определяется не характером введенных дефектов, а особенностями электронного спектра данного материала и изменениями этого спектра при вариации состава твердого раствора. При этом, хотя тип вводимых в решетку дефектов мо-

жет зависеть от предыстории материала и условий его облучения, процессы накопления дефектов в кристалле протекают таким образом, чтобы обеспечить эволюцию электронного химического потенциала в направлении E_{lnl} и его закрепление в этом положении при плотности радиационных дефектов (РД), превышающей плотность легирующих примесей или ростовых дефектов. Критические дозы, необходимые для достижения уровнем Ферми своего стационарного положения, определяются исходным уровнем легирования материала.

При этом уравнение электронейтральности для облученного материала, в котором уровень Ферми закреплен вблизи E_{lnl} , может быть записано в виде

$$n_{st}(x) + \sum_j N_j^-(x) \cong p_{st}(x) + \sum_i N_i^+(x),$$

где значками $n_{st}(x)$ и $p_{st}(x)$ обозначены зависимости стационарных концентраций свободных электронов и дырок от состава в облученном материале, $\sum_j N_j^-(x)$ и $\sum_i N_i^+(x)$ — концентрации заряженных акцепторов (j) и доноров (i) соответственно. Здесь мы пренебрегли исходными химическими примесями и ростовыми дефектами в условиях, когда плотность РД в материале выше плотности исходных легирующих примесей или ростовых дефектов. При этом, как и в облученных полупроводниках группы алмаза и группы соединений $A^{III}B^V$, стабилизация уровня Ферми в $Cd_xHg_{1-x}Te$ при радиационном воздействии должна обеспечиваться за счет одновременного введения РД как донорного, так и акцепторного типа. Детальные исследования этого вопроса проведены для InAs, в котором в результате облучения уровень Ферми закрепляется в области разрешенных энергий зоны проводимости, так же как и в $Cd_xHg_{1-x}Te$ для составов $x < 0.47$, а для составов $x > 0.47$, соответствующих закреплению уровня Ферми в запрещенной зоне, исследованы на примере GaAs [19,20]. Это означает, что в облученном твердом растворе $Cd_xHg_{1-x}Te$ именно разностная концентрация заряженных доноров и акцепторов радиационного происхождения определяет стационарную концентрацию свободных электронов и задает электронный тип проводимости такого материала.

Заключение

Высокоэнергетическое радиационное воздействие приводит к стабилизации уровня Ферми вблизи уровня локальной электронейтральности твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$, что соответствует его положению в зоне проводимости для составов $x < 0.47$ и в верхней половине запрещенной зоны для остальных составов, что и определяет n^+ - или n -тип проводимости облученного материала соответственно. Эффект радиационного воздействия проявляется в компенсации исходной проводимости материала, при этом электронные свойства облученного $Cd_xHg_{1-x}Te$ определяются минимальным

энергетическим зазором между $E_{\text{inl}}(x) \cong F_{\text{lim}}(x)$ и ближайшим экстремумом в зонном спектре идеального кристалла и изменяются при варьировании состава раствора от материала n^+ -типа проводимости в случае граничного состава HgTe до высокоомных образцов n -типа проводимости в случае CdTe.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта Министерства образования РФ "Фундаментальные исследования в области ядерной физики и физики пучков ионизирующих излучений" (№ 97-12-9, 2-2).

Список литературы

- [1] J. Meingailis, J.L. Ryan, T.C. Herman. Appl. Phys. Lett., **44**, 2647 (1973).
- [2] В.Н. Брудный, А.В. Войцеховский, З.Г. Гречух, М.А. Кривов, Ю.В. Лиленко, Л.И. Лимаренко, М.В. Пашковский. ФТП, **11**, 1540 (1977).
- [3] А.В. Войцеховский, А.Г. Коротчаев, А.П. Коханенко. ФТП, **30**, 1565 (1996).
- [4] А.В. Войцеховский, А.П. Коханенко. Изв. ТПУ, Томск, **3-3(2)**, 104 (2000).
- [5] J. Tersoff. Surf. Sci., **168**, 275 (1986).
- [6] V.N. Brudnyi, S.N. Grinyaev, V.E. Stepanov. Physica B: Cond. Matter., **212**, 429 (1995).
- [7] В.Н. Брудный. Изв. вузов. Физика, **29(8)**, 84 (1986).
- [8] В.Н. Брудный, С.Н. Гриняев. ФТП, **32**, 315 (1998).
- [9] S.N. Grinyaev, S.G. Kataev. Physica B: Cond. Matter., **191**, 317 (1993).
- [10] L. Vina, C. Umbach, M. Cardona et al. Phys. Rev. B, **29**, 6752 (1984).
- [11] D.T. Marple, H. Ehrenreich. Phys. Rev. Lett., **8**, 87 (1962).
- [12] P.M. Amirtharaj, F.H. Pollak, J.K. Furduna. Sol. St. Commun., **39**, 35 (1981).
- [13] Shin-ichi Katsuki, Manoto Kunimune. J. Phys. Soc. Japan, **31**, 337 (1971).
- [14] J. Guldner, C. Rigaux, M. Grynberg, A. Mycielski. Phys. Rev. B, **8**, 3875 (1973).
- [15] M. Nawrocki, A. Twardowski. Phys. St. Sol. (b), **97**, K61 (1980).
- [16] K.C. Hass, H. Ehrenreich, B. Velerhy. Phys. Rev. B, **27**, 1088 (1983).
- [17] J. Camassel, J.P. Laurenti, A. Bouhemadou, R. Legros, A. Lusson, B. Toulouse. Phys. Rev. B, **38**, 3948 (1988).
- [18] D.J. Chadi, M.L. Cohen. Phys. Rev., **8**, 5747 (1973).
- [19] Н.Г. Колин, В.Б. Освенский, Н.С. Рытова, У.С. Юрова. ФТП, **21**, 521 (1987).
- [20] V.N. Brudnyi, V.M. Diamond. Sol. St. Commun., **54**, 355 (1985).

Редактор Т.А. Полянская

The pinning of the chemical potential and electrical properties of irradiated $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ alloys

V.N. Brudnyi, S.N. Grinyaev

V.D. Kuznetsov Siberian Physical Technical Institute, 634050 Tomsk, Russia

Abstract The composition dependence on the local neutrality level E_{inl} in $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ alloys has been investigated using the numerical calculations. It has been revealed that for the composition $x < 0.47$ the E_{inl} -energy is within the range of the conduction band energies while for $x > 0.47$ — in the upper half of the forbidden gap. Proceeding from identification of the E_{inl} -energy with the Fermi-level limit position (F_{lim}) in a semiconductor irradiated by particles with the high energy, it has been concluded the high energy particle bombardment leads to the n^+ - or n -type conductivity of $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ alloys.