

Анализ температурной зависимости концентрации электронов в монокристаллах CdGeAs₂

© С.И. Борисенко

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

(Получена 30 октября 2001 г. Принята к печати 31 января 2001 г.)

Проведен анализ температурной зависимости концентрации электронов в монокристаллах CdGeAs₂, выращенных новым методом. Вычислено значение концентрации собственных дефектов и энергия активации. Показано, что энергия активации имеет резонансный характер, а концентрация собственных дефектов в исследуемой области температур 10–500 К существенно превышает концентрацию электронов.

В работе [1] исследована температурная зависимость рекордной подвижности электронов в монокристаллах CdGeAs₂, выращенных новым методом низкотемпературной кристаллизации из нестехиометрических растворов–расплавов [2]. В качестве основных механизмов рассеяния учитывалось рассеяние на одночастично заряженных собственных дефектах с экранированным потенциалом кулоновского типа, на полярных оптических фононах и на плазменных колебаниях газа свободных электронов. Учет последнего механизма рассеяния позволил согласовать экспериментальные данные по холловской подвижности [2] и расчетные. Однако невыясненным остался вопрос о природе собственных дефектов в данных монокристаллах, поставляющих электроны в зону проводимости, их количестве и энергии активации. Чтобы частично решить поставленную задачу, в данной работе проведен численный анализ экспериментальных данных по температурной зависимости коэффициента Холла в монокристаллах CdGeAs₂ с вырожденным электронным газом. В предположении о наличии собственных дефектов донорного типа в модели однозарядовых и двухзарядовых центров, способных в исследуемой области температур поставлять один электрон в зону проводимости, рассчитана концентрация этих дефектов и их энергия активации с учетом "хвоста" плотности состояний зоны проводимости.

Основные формулы

Для исследования температурной зависимости концентрации электронов в зоне проводимости численно решалось уравнение электронейтральности

$$n = n_0 + n_L = p_D, \quad (1)$$

где n_0 и n_L — концентрация свободных электронов, дающих вклад в проводимость, и электронов, локализованных за счет флуктуаций электростатического потенциала ионизованных дефектов,

$$p_D = \frac{N_D}{\sqrt{\pi}V_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-V/\sqrt{2}V_0)}{g \exp\left(\frac{\xi - \varepsilon_D - V}{k_0 T}\right) + 1} dV \quad (2)$$

— концентрация дырок на собственных дефектах, N_D — полная концентрация собственных дефектов, по-

ставляющих электроны в зону проводимости, ε_D — энергия ионизации дефектов, g — эффективный фактор вырождения, ξ — уровень Ферми, отсчитанный от дна "невозмущенной" зоны проводимости,

$$V_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon} (2\pi p_D L_D)^{1/2} \quad (3)$$

— среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии электрона [3],

$$L_D = \left(\frac{e^2}{\varepsilon_0\varepsilon_s} \frac{\partial n_0}{\partial \xi} \right)^{-1/2} \quad (4)$$

— длина экранирования Дебая. В (3) и (4) ε_0 — диэлектрическая постоянная. В приближении сильного вырождения электронного газа с учетом непараболичности энергетического спектра у дна зоны проводимости полная концентрация электронов в зоне проводимости рассчитывалась по формуле

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m^*(\xi)}{\hbar^2} \xi \right)^{3/2}, \quad (5)$$

где

$$m^*(\xi) = \frac{\hbar^2}{2P^2}$$

$$\times \frac{(\xi + \varepsilon_0) \left[(\xi + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta_{so}) (\xi + \varepsilon_0 + \frac{1}{3}\Delta_{so} - \Delta_{cr}) - \frac{2}{9}\Delta_{so}^2 \right]}{(\xi + \varepsilon_0) (\xi + \varepsilon_0 + \frac{2}{3}\Delta_{so}) - \frac{2}{3}\Delta_{cr} (\xi + \varepsilon_0 + \frac{1}{3}\Delta_{so})} \quad (6)$$

— эффективная масса в изотропном приближении для прямозонных алмазоподобных полупроводников с решеткой халькопирита в четырехзонном приближении [3]; P , ε_0 , Δ_{so} , Δ_{cr} — параметры энергетического спектра электронов и дырок в окрестности дна зоны проводимости и вершины валентной зоны [4]. Пренебрежение анизотропией оправдано тем, что для электронов в CdGeAs₂ ее величина невелика [4]. Концентрация локализованных электронов в параболическом приближении для энергетического спектра рассчитывалась по формуле

$$n_L = \int_{-\infty}^0 f_0(E) \rho(E) dE = \frac{4CV_0^{3/2} (m_0^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}, \quad (7)$$

где $m_0^* = m^*(0)$, $\rho(E)$ — плотность состояний в области "хвоста" зоны [3],

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^0 dy \int_{-y}^{\infty} \exp(-x^2) \sqrt{y+x} dx = 0.17046. \quad (8)$$

В работе предполагалось, что концентрация свободных электронов в случае вырожденного электронного газа связана с коэффициентом Холла известным соотношением $n_0 = 1/eR$.

Анализ результатов расчета

Значения искоемых параметров N_D и ε_D рассчитывались самосогласованным способом с учетом формул (1)–(7) при заданном значении g и двух значениях концентрации электронов, полученных из экспериментально измеренного коэффициента Холла для комнатной и азотной температур [2]. В приближении однозарядового дефекта параметр g считался равным 2, а в приближении двухзарядового дефекта в первом зарядовом состоянии $g = 0.5$. Для расчета энергетического спектра в окрестности дна зоны проводимости были использованы следующие значения параметров: $P = 0.92$ эВ·нм, $\varepsilon_0 = 0.74$ эВ, $\Delta_{so} = 0.33$ эВ, $\Delta_{cr} = 0.21$ эВ [4], при которых усредненная по углам эффективная масса на дне зоны согласно (6) равна $0.034 m_0$.

Найденные значения искоемых величин N_D и ε_D , с помощью которых получено хорошее согласие с экспериментальными данными (рис. 1), приведены в таблице. Согласно расчетам донорный уровень собственного дефекта является резонансным. Значение концентрации дефектов существенно зависит от модели дефекта (от параметра g). Концентрация электронов существенно ниже концентрации дефектов, которые при рассматриваемых температурах в основном находятся в нейтральном состоянии. Оценка области локализации электронов на нейтральных дефектах из соотношения неопределенностей Гейзенберга показывает, что ее величина близка к значению среднего расстояния между ними (3–4 нм). Это позволяет предположить наличие слабого квантового расщепления донорного уровня и считать, что примесная зона не образуется. При этом уширение уровня носит чисто классический характер, определяемый величиной среднеквадратичной флуктуации энергии электронов, которая, как и длина экранирования, является функцией температуры (рис. 2). Следует отметить, что согласно

Параметры собственных дефектов в n -CdGeAs₂

g	$N_D, 10^{19} \text{ см}^{-3}$	$N_D^*, 10^{19} \text{ см}^{-3}$	$\varepsilon_D, \text{ мэВ}$	$\varepsilon_D^*, \text{ мэВ}$
0.5	1.2	0.9	60	73
2	5.0	2.9	55	74

Примечание. N_D^* , ε_D^* — результаты получены в приближении отсутствия хвостов плотности состояний.

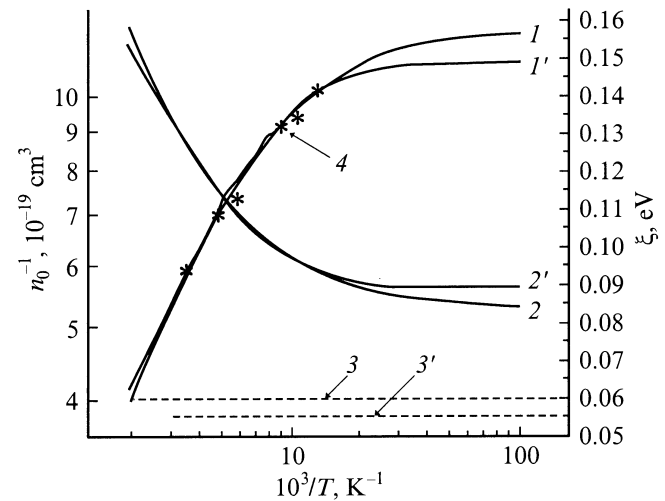


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации нелокализованных электронов n_0 (кривые 1, 1') и уровня Ферми ξ (кривые 2, 2') в n -CdGeAs₂, а также энергии ионизации ε_D (3, 3'); 4 — экспериментальные данные [2]. Расчет выполнен при факторах вырождения g : 1–3 — 0.5, 1'–3' — 2.

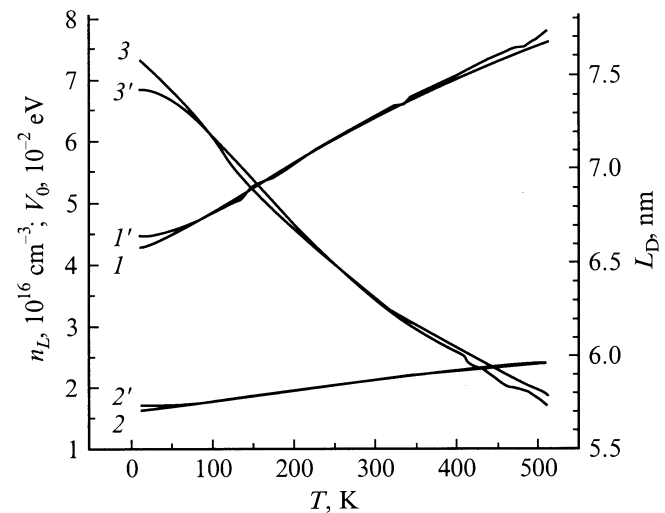


Рис. 2. Температурные зависимости концентрации локализованных электронов n_L (кривые 1, 1') среднеквадратичной флуктуации энергии V_0 (кривые 2, 2') и длины экранирования Дебая L_D (кривые 3, 3'). Расчет выполнен при факторах вырождения g : 1–3 — 0.5, 1'–3' — 2.

более точной теории хвостов плотности состояний [5], в которой параметр V_0 имеет меньшее значение, чем в теории Кейна [3], и является подгоночным, рассчитанное значение энергии ионизации является заниженным, а концентрация дефектов — завышенной, т.е. приведенные в таблице значения с учетом и без учета хвостов плотности состояний являются для величин N_D и ε_D "крайними".

Недостаток экспериментальных данных не дает возможности остановиться на конкретной модели дефекта

и уточнить его зарядовое состояние. Согласно расчету при понижении температуры до 10 К концентрация электронов изменяется слабо, оставаясь на уровне 10^{18} см⁻³, что можно проверить экспериментально и в этой области температур определить значение параметра g (рис. 1).

Список литературы

- [1] С.И. Борисенко, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, В.Г. Тютюрев. ФТП, **35** (6), 720 (2001).
- [2] И.К. Полушина, В.Ю. Рудь, Ю.В. Рудь, Т.Н. Ушакова. ФТТ, **41**, 1190 (1999).
- [3] T.N. Morgan. Phys. Rev. A, **139**, 343 (1965).
- [4] С.И. Борисенко, Г.Ф. Караваев. Изв. вузов. Физика, № 4, 101 (1988).
- [5] H.C. Casey, jr., F. Stern. J. Appl. Phys., **47**, 631 (1976).

Редактор Т.А. Полянская

An analysis of the temperature dependence of the electron density in CdGeAs₂ single crystals

S.I. Borisenko

Siberian Physicotechnical Institute,
634050 Tomsk, Russia

Abstract Analysis of temperature dependence of electron density in single crystals, grown by a new method has been performed. Values of the concentration of as-grown defects and the energy of activation is calculated. It is shown, that the energy of activation has a resonant character, and the concentration of defects in the investigated range of temperatures (10–500 K) considerably exceeds the concentration of electrons.