ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 7, № 1 (2003) с. 101–105

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 7, No. 1 (2003) p. 101–105

ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ p-HgMnTe В ДІЛЯНЦІ ЗМІШАНОЇ ПРОВІДНОСТИ

Л. А. Косяченко, А. В. Марков, С. Е. Остапов, І. М. Раренко, В. М. Склярчук, О. Ф. Склярчук
Чернівецький національний університет
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, UA-58012, Україна
(Отримано 14 травня 2002 р.)

Досліджено однорідність та температурну залежність питомої провідности монокристалів $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0.08 \div 0.1$). Виявлено особливості розсіювання носіїв заряду йонізованими домішками, акустичним деформаційним потенціялом й полярними оптичними фононами. Показано, що з температурної залежности провідности в ділянці змішаної провідности можна досить точно визначити склад твердого розчину $Hg_{1-x}Mn_xTe$ та концентрацію леґуючих домішок.

Ключові слова: вузькощілинний напівпровідник, рухливість, електропровідність.

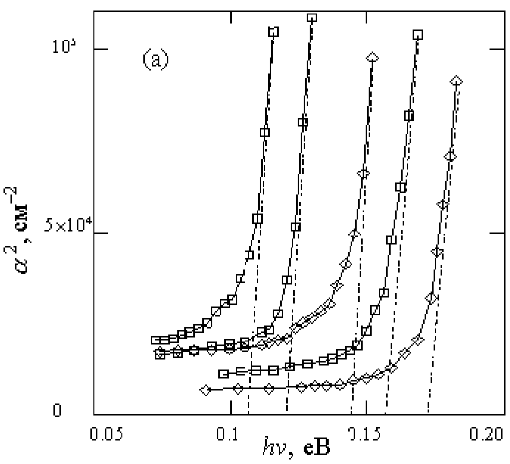
PACS number(s): 72.10.Fk, 72.20.–i, 72.80.Ey

I. ВСТУП

Уже близько двадцяти років досліджують можливості використання твердого розчину $Hg_{1-x}Mn_xTe$ для детектування інфрачервоного випромінювання в спектральному діяпазоні 8–14 мкм [1–4]. Одержано багатонадійні результати щодо ключових параметрів таких детекторів з p-n переходами, зокрема прийнятна для практичного використання їхня виявна здатність [2,4]. Одна з основних проблем, з якими стикаються дослідники, невідтворюваність параметрів детекторів, виготовлених з одного й того ж зливка і навіть однієї пластини, вирізаної з $Hg_{1-x}Mn_xTe$ кристала. Щобільше, в різних частинах пластини помітно відрізняється електрична провідність матеріялу, спостерігаються *якісно відмінні* її температурні залежності. У цій статті зроблено спробу узагальнити спостережувані електричні характеристики $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ($x \approx 0.1$, $E_g \approx 0.1$ еВ при 300 К) і обґрунтувати їх теоретично.

II. ДОСЛІДЖУВАНИЙ МАТЕРІЯЛ

Для дослідження використовували монокристали $Hg_{1-x}Mn_xTe$ p-типу провідности, вирощені модифікованим методом зонної плавки. Уміст марганцю при синтезі задавали таким, щоб при температурі рідкого азоту ширина забороненої зони E_g дорівнювала 0.1 еВ. Неоднорідність складу $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ілюструє рис. 1а, де подано криві оптичного поглинання, знайдені для різних ділянок кристала при кімнатній температурі. Значення коефіцієнта поглинання α розраховані з кривих пропускання (з урахуванням багаторазового відбивання), виміряних при діяметрі пучка 1–2 мм. Вибір координат на рисунку (α^2 від $h\nu$) зумовлений тим, що для напівпровідника з прямими міжзонними переходами, яким є $Hg_{1-x}Mn_xTe$, в ділянці краю власного поглинання можна прийняти $\alpha \sim (h\nu - E_g)^{1/2}$ [5].



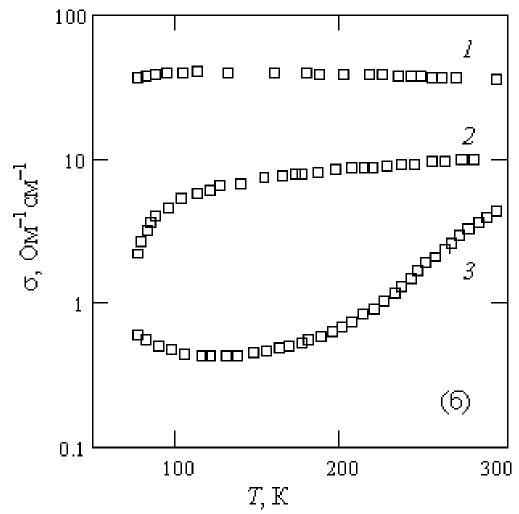


Рис. 1. Криві оптичного поглинання при 300 К (а) і температурні залежності провідности (б), одержані для різних ділянок $Hg_{1-x}Mn_xTe$ кристала.

Як видно з рисунка, значення E_g при 300 К змінюється в інтервалі $0.105 \div 0.17$ еВ, чому, згідно з відомою напівемпіричною формулою [1],

$$E_g(x,T) = -0.253 + 3.446x + 4.9 \times 10^{-4}T - 2.55 \times 10^{-3}xT, \quad (1)$$

відповідає $x = 0.078 \div 0.103$. При 77 К, згідно з цією ж формулою, $E_g = 0.04 \div 0.12$ еВ. Така сильна зміна ширини забороненої зони при відносно слабкій зміні x ($\sim 2\%$ для зливка і $\sim 1\%$ для пластини) пояснюється різкою залежністю E_g від умісту марганцю для вузькозонних складів $Hg_{1-x}Mn_xTe$.

На рис. 1б показано експериментальні залежності провідности від температури $\sigma(T)$ для трьох зразків, вирізаних з того ж зливка (вибрано найхарактерніші). Як видно, провідності різних частин кристала відрізняються не лише кількісно (при 300 К майже на порядок, а при 77 К — на два порядки), але й змінюється характер їх залежности від температури. При зниженні температури від 300 до 77 К провідність може слабо зростати і, досягнувши *максимуму*, спадати (крива 1). Для другого зразка зі зниженням температури величина σ *монотонно* зменшується, спочатку повільно, а потім — швидко. Для третього зразка σ в цьому ж температурному інтервалі зображена кривою з *мінімумом*. Можна припустити, що, завдяки таким якісним відміностям кривих, із експериментальних залежностей $\sigma(T)$ можна отримати конкретну інформацію про матеріял, якщо їх порівняти з розрахованими залежностями $\sigma(T)$ при різних параметрах матеріялу.

III. РОЗРАХУНОК ТЕМПЕРАТУРНОЇ ЗАЛЕЖНОСТИ ПРОВІДНОСТИ

Отримані експериментальні результати можна пояснити в межах моделі змішаної провідности вузькозонного напівпровідника з урахуванням того факту, що електрони й дірки мають рухливості, які сильно відрізняються за величиною [6]. Для розрахунку провідности спочатку скористаємось напівемпіричними формулами для рухливости електронів μ_n і дірок μ_p у $Hg_{1-x}Mn_xTe$ [1]:

$$\mu_n = 9 \times 10^8 \left(\frac{0.095}{x}\right)^{7.5} T^{-2\left(\frac{0.095}{x}\right)^{0.6}}, \quad (2)$$

$$\mu_p = \frac{\mu_n}{100}, \quad (3)$$

а концентрацію електронів n і дірок p знайдемо, розв'язуючи рівняння електронейтральности $n + N_a^- = p + N_d^+$, де N_d^+ і N_a^- — концентрація йонізованих донорів й акцепторів відповідно. Концентрацію вільних носіїв, n і p, з урахуванням можливости виродження електронів визначаємо виразами

$$p = \frac{N_\nu}{\exp\left(\frac{\Delta\mu}{kT}\right) + 1}, \quad (4)$$

$$n = \int\limits_0^\infty \frac{\rho_c(E)}{\exp\left(\frac{E_g - \Delta\mu}{kT}\right) + 1} dE, \quad (5)$$

де $\Delta\mu$ — енерґетична віддаль рівня Фермі від валентної зони, $N_\nu = 2(m_h kT/2\pi\hbar^2)^{3/2}$ — ефективна густина станів у валентній зоні, $\rho_c(E)$ — густина станів у зоні провідности, для якої в наближенні кейнівської моделі можна записати [8]

$$\rho_c(E) = \frac{2m_e^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} E^{1/2} \left(1 + \frac{E}{E_g}\right)^{1/2} \left(1 + 2\frac{E}{E_g}\right), \quad (6)$$

причому

$$m_e = 5.7 \times 10^{-16} \cdot E_g \cdot \frac{m_0}{P^2}, \quad (7)$$

$$m_h = 0.5 m_0, \quad (8)$$

де P — параметр у моделі Кейна, який для $Hg_{1-x}Mn_xTe$ дорівнює $(8.35 - 7.94x) \cdot 10^{-8}$ еВ·см [1].

Задаючи значення x, T, N_a і N_d і розв'язуючи рівняння електронейтральности, можна знайти положення рівня Фермі ($\Delta\mu$), потім n і p і, нарешті, — провідність $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$. Результати комп'ютерного розрахунку σ для різних значень x і N_a подано на рис. 2. Діяпазон зміни $N_a = 10^{16} \div 10^{17}$ см$^{-3}$ відповідає концентрації акцепторів у монокристалах, вирощених методом зонної плавки (найчастіше це повністю йонізовані вакансії ртуті). Концентрація донорів N_d, яка визначається залишковими домішками, була прийнята рівною 10^{15} см$^{-3}$. Цей параметр, на відміну від концентрації нескомпенсованих акцепторів $N_a - N_d$, не є критичним.

Як видно, розраховані залежності $\sigma(T)$ доволі різноманітні і включають криві, схожі з експериментальними, зображеними на рис. 1б. Порівняння експериментальних кривих з результатами розрахунків дозволяє досить легко ідентифікувати матеріял щодо вмісту Mn і концентрації акцепторів. Експериментальна крива 1 на рис. 1а, зокрема, ніяк не узгоджується із залежностями, розрахованими при $N_a = 3 \times 10^{16}$ см$^{-3}$ або 10^{17} см$^{-3}$, але зате близька до розрахованих при $x = 0.07$ і $N_a = 10^{16}$ см$^{-3}$. Крива 2 близька до розрахованих залежностей при $x = 0.08$ і $N_a = (1 \div 3) \cdot 10^{16}$ см$^{-3}$, а крива 3 відповідає $N_a = 3 \times 10^{16}$ см$^{-3}$ і x у межах між 0.08 і 0.09. Усе ж прискіпливіший аналіз показує, що *кількісного* збігу розрахованих кривих з експериментальними не досягаємо. Розраховані абсолютні значення провідности виявляються у 2–5 разів більшими від виміряних, та й розрахований хід $\sigma(T)$ не зовсім точно описує експериментальну залежність. Наприклад, розрахована й експериментальна провідності монотонно зростають із температурою, але діяпазон їх зміни в інтервалі температур 77–300 К дещо відрізняється. Другий приклад: обидві криві, теоретична й експериментальна, мають мінімум, але при різних температурах. Такі розходження можна було очікувати, оскільки формула (2) для рухливости електронів напівемпірична і не враховує всіх можливих механізмів розсіювання, співвідношення $\mu_n/\mu_p = 100$ є наближеним.

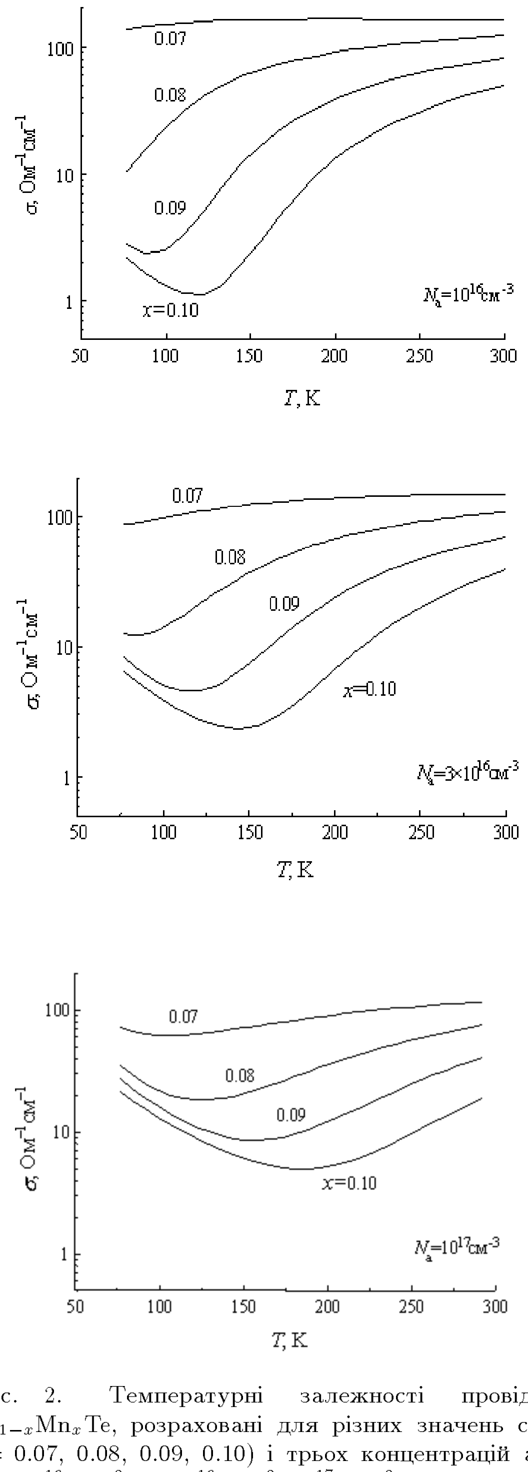


Рис. 2. Температурні залежності провідности p-$Hg_{1-x}Mn_xTe$, розраховані для різних значень складу (x = 0.07, 0.08, 0.09, 0.10) і трьох концентрацій акцепторів (10^{16} см$^{-3}$, 3×10^{16} см$^{-3}$, 10^{17} см$^{-3}$). В усіх випадках $N_d = 10^{15}$ см$^{-3}$.

IV. УРАХУВАННЯ РІЗНИХ МЕХАНІЗМІВ РОЗСІЮВАННЯ

Знаходячи провідність $Hg_{1-x}Mn_xTe$, врахуємо три основні механізми розсіювання носіїв: на йонізованих домішках, полярних оптичних і акустичних фононах.

Хоч розсіювання на йонізованих домішках у досліджуваних кристалах домінує при $T < 80$ К, при вищих температурах його теж необхідно враховувати. Час релаксації для цього механізму розсіювання можна знайти за формулою [6]:

$$\tau_{\text{ion}} = (\varepsilon_s \hbar^{3/2} \pi e^4 N_i)(k^3/m^*)(1/F_{\text{ion}}), \qquad (9)$$

де F_{ion} — функція, яка враховує властивості симетрії хвильових функцій електронів й екранування потенціялу центрів розсіювання вільними носіями, N_i — концентрація йонізованих домішок, ε_s — сума статичної й високочастотної діелектричної проникливости, решта позначень — загальноприйняті.

Розсіювання на оптичних та акустичних фононах у кристалах $Hg_{1-x}Mn_xTe$ (як і у $Hg_{1-x}Cd_xTe$) переважає при температурах, вищих за 80 К, особливо в ділянці власної провідности. При розсіюванні на полярних оптичних фононах вираз для часу релаксації має вигляд:

$$\tau_{\text{op}} = (\varepsilon_{\text{o}} \hbar / 2e^2 k_0 T)(\partial E/\partial k) 1/F_{\text{op}}, \qquad (10)$$

а при розсіюванні на акустичних коливаннях ґратки

$$\tau_{\text{ac}} = (\pi \hbar \rho(x) \nu^2 / E_0^2 k_0 T F_{\text{ac}})(\partial E/\partial k) 1/k^2. \qquad (11)$$

У формулах (10) і (11) $\rho(x)$ — густина кристала, що залежить від умісту марганцю, E_{o} — константа потенціялу деформації, F_{ac} і F_{op} — функції, у якихураховано вплив блохівських множників у моделі розсіювання Кейна відповідно для акустичних й полярних оптичних фононів.

Обчислюючи рухливість носіїв у $Hg_{1-x}Mn_xTe$, необхідно враховувати можливість виродження електронного газу в зоні провідности (дірки можна вважати невиродженими). Ширину забороненої зони розраховували за формулою (1), а концентрацію носіїв визначали з розв'язку рівняння електронейтральности з урахуванням (4) і (5). Усі домішки вважали повністю йонізованими у всьому діяпазоні температур.

Внесок різних механізмів розсіювання у формування температурної залежности рухливости носіїв в $Hg_{1-x}Mn_xTe$ проілюстровано на рис. 3 на прикладі матеріялу з $x = 0.083$.

З рисунка видно, що при вказаних концентраціях домішок рухливість значною мірою визначається розсіюванням на полярних оптичних фононах. Проте в актуальній для практики ділянці температур, нижчих від 100 K, йонізовані домішки теж роблять істотний внесок у рухливість. Вочевидь, що при збільшенні концентрації домішок крива 1 зміститься вниз, і роль цього механізму розсіювання істотно зросте. Водночас посилиться роль розсіювання на акустичному деформаційному потенціялі, так що крива 4 все більше відхиляється від кривої 3. Помітна роль усіх механізмів розсіювання спостерігається і при інших параметрах матеріялу.

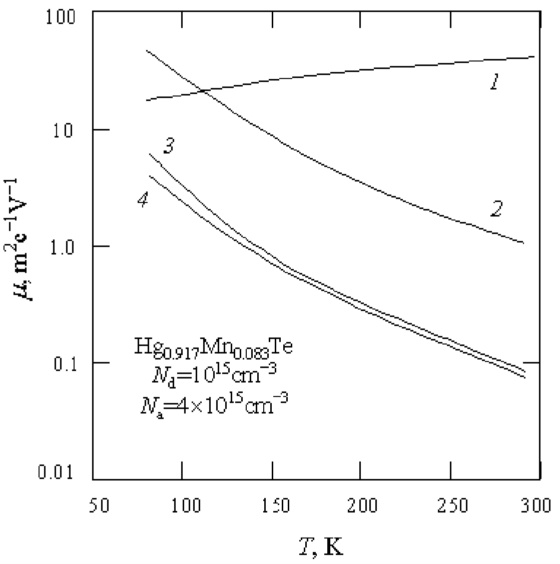


Рис. 3. Температурна залежність рухливости при: 1 — розсіюванні на йонізованих домішках; 2 — акустичних фононах; 3 — полярних оптичних фононах; 4 — із урахуванням усіх трьох механізмів розсіювання.

Результати розрахунків провідности з урахуванням усіх трьох механізмів розсіювання в порівнянні з експериментальними даними подано на рис. 4.

В усіх випадках концентрацію донорів приймали рівною 10^{15} см$^{-3}$. Видно, що завжди узгодження теоретичних кривих з експериментальними даними є цілком задовільним. Крива 1 описує провідність практично безщілинного $Hg_{1-x}Mn_xTe$ (ширина забороненої зони при температурі рідкого азоту 0.033 еВ, концентрація власних носіїв $3 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$). Така концентрація акцепторів, які до того ж повністю йонізовані, визначає провідність при низьких температурах. Звернімо увагу на те, що розрахунки з використанням емпіричних формул для рухливости (2) і (3) дають в кілька разів завищені значення, хоча характер залежностей $\sigma(T)$ зберігається. Зрозуміло, що при точному розрахунку істотний вплив має розсіювання носіїв заряду на йонізованих домішках.

Крива 2 розрахована для складу $x = 0.083$. Як видно, збільшення вмісту марганцю на 1.1% у порівнянні з кривою 1 приводить до якісної зміни в поведінці температурної залежности провідности (навіть якщо не враховувати зміни концентрації акцепторів). Щобільше, поведінка провідности $Hg_{1-x}Mn_xTe$ сильно видозмінюється навіть при зміні $x = 0.083$ до $x = 0.08$. В останньому випадку крива піднімається, максимум на ній набагато яскравіше виражений, а спад спостерігається при вищих температурах. Така чутливість до зміни складу, як уже відзначалося, є характерною рисою $Hg_{1-x}Mn_xTe$ в ділянці змішаної провідности.

Крива 3 на рис. 4 розрахована для $x = 0.1$ і досить високої концентрації акцепторів. Це яскраво виражений матеріял p-типу провідности, що й випливає з її температурної залежности. Концентрація дірок від температури практично не залежить і збігається з N_a, а концентрація електронів відповідає експоненційному законові. На температурній залежності провідности при низьких температурах спостерігається помітний мінімум (його положення і глибина змінюються залежно від концентрації леґуючої акцепторної домішки та інтенсивности розсіювання на йонізованих домішках).

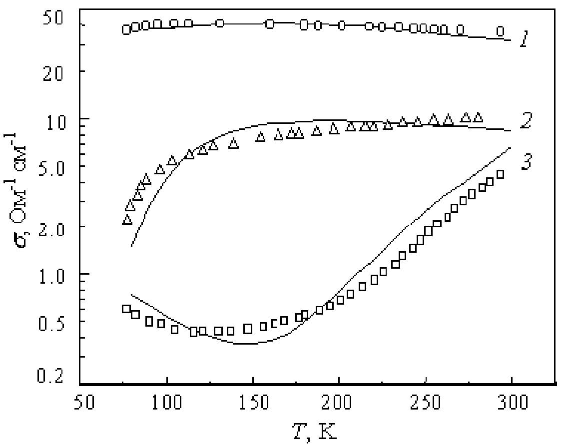


Рис. 4. Температурна залежність провідности для p–$Hg_{1-x}Mn_xTe$ з різним умістом Mn у порівнянні з експериментальними даними: 1 — x = 0.072, $N_a = 6 \times 10^{16}$ см$^{-3}$; 2 — $x = 0.083$, $N_a = 4 \times 10^{15}$ см$^{-3}$; 3 — $x = 0.10$, $N_a = 4 \times 10^{17}$ см$^{-3}$. В усіх випадках концентрацію донорів приймали рівною 10^{15} см$^{-3}$.

Як і передбачалося, для всіх розглянутих випадків концентрація донорів вирішального значення не має, доки вона менша від концентрації акцепторів. Ще раз підкреслимо, що завжди спостерігається висока чутливість температурної залежности провідности до зміни складу матеріялу, що виявляється не лише в кількісних відмінностях, але й у якісній зміні кривої $\sigma(T)$. Саме це дозволяє досить точно визначати склад і рівень леґування з температурної залежности питомої провідности матеріялу. Проте така ідентифікація можлива лише для $Hg_{1-x}Mn_xTe$ з малим умістом марганцю, коли електронна провідність відіграє суттєву роль. Для $x = 0.3$, наприклад, ширина забороненої зони при 300 K становить 0.7 еВ і зі зниженням температури для будь-якої концентрації акцепторів провідність монотонно зростає. У цьому випадку в p-$Hg_{1-x}Mn_xTe$ електрони вже не роблять відчутного внеску в провідність, а концентрація дірок практично не змінюється з температурою. Тому при зниженні температури провідність зростає тільки за рахунок збільшення рухливости носіїв (приблизно в 10 разів в інтервалі $300 \div 77$ K). Монотонне зростання провідности зі зниженням температури спостерігається також у $Hg_{1-x}Mn_xTe$ n-типу при будь-якому x (включаючи малі значення), оскільки, внаслідок більшої рухливости електронів, змішана провідність не проявляється.

На завершення зауважимо, що одержані результати можна застосувати для інших вузькозонних напівпровідників із сильно відмінною рухливістю електронів і дірок, зокрема для широко використовуваного в інфрачервоних детекторів $Hg_{1-x}Cd_xTe$ ($x \approx 0.2$).

V. ВИСНОВКИ

У формуванні температурної залежности провідности $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0.08 \div 0.1$) в інтервалі 77–300 K істотну роль відіграють три механізми розсіювання — на йонізованих домішках, акустичних і полярних оптичних фононах.

Зіставлення експериментальних і розрахованих залежностей провідности від температури дозволяє досить точно визначити вміст марганцю й концентрацію акцепторів у p-$Hg_{1-x}Mn_xTe$.

[1] J. K. Furdyna, Proc. SPIE **409**, 43 (1983).
[2] P. Becla, J. Vac. Sci. Technol. A **4**, 2014 (1986).
[3] A. Rogalski, Infrared Phys. **31**, 117 (1991).
[4] L. A. Kosyachenko, I. M. Rarenko, Sun Weiguo, Lu Zheng Xiong, Solid-State Electron. **44**, 1197 (2000).
[5] L. A. Kosyachenko, I. M. Rarenko, O. O. Bodnaruk, V. M. Frasunyak, V. M. Sklyarchuk, Ye. F. Sklyarchuk, Sun Weiguo, Lu Zheng Xiong, Semicond. Phys. Quant. Electron. & Optoelectron. **2**, 31 (1999).
[6] А. И. Власенко, Я. М. Олих, Р. К. Савкина, Физ. техн. полупр. **34**, 670 (2000).

THE INVESTIGATION OF PHYSICAL PROPERTIES OF p-TYPE HgMnTe IN THE MIXED CONDUCTIVITY REGION

L. A. Kosyachenko, A. V. Markov, S. E. Ostapov, I. M. Rarenko, V. M. Sklyarchuk, O. F. Sklyarchuk
Chernivtsi National University,
2, Kotsyubinski Str., Chernivtsi, UA–58012, Ukraine

The homogeneity and temperature dependence of conductivity in $Hg_{1-x}Mn_xTe$ ($x = 0.08 - 0.1$) single crystals are investigated in this paper. The peculiarities of ionized impurities, acoustic and polar optic phonon scattering are taken into account. It is shown that we can define the composition of $Hg_{1-x}Mn_xTe$ solid solution and doping concentration from the measurements of conductivity temperature dependence.