

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІВ HgCdMnZnTe

І. М. Горбатюк, В. В. Жихаревич, С. Е. Остапов

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012, Україна*

(Отримано 24 січня 2005 р.; в остаточному вигляді – 20 липня 2005 р.)

Досліджено температурні залежності питомої провідності, коефіцієнта Голла та рухливості монокристалів нового напівпровідникового твердого розчину HgCdMnZnTe різного складу. Виявлено особливості розсіювання носіїв заряду йонізованими домішками та полярними оптичними фононами.

Визначено ширину забороненої зони (з оптичних і гальваномагнетних досліджень), оцінено концентрацію та енергію активації акцепторної домішки. Показано, що легких дірок можна не враховувати при моделюванні процесів розсіювання у кристалах цього типу.

Ключові слова: вузькощілинний напівпровідник, явища переносу, гальваномагнетні явища.

PACS number(s): 72.15.-v; 72.15.Qm; 72.20.Mu; 72.80.Ey

ВСТУП

Уже багато років досліджують альтернативні HgCdTe (КРТ) матеріали, які були б позбавлені його недоліків, викликаних слабкістю зв'язку Hg–Te, що приводить до утворення багатьох вакансій ртуті та дифузії атомів ртуті до поверхні при тривалому зберіганні. Наслідками таких процесів є не тільки деградація матеріалу, а й проблеми забезпечення стабільності границь поділу у структурах [1–3].

Розв'язати ці проблеми можна двома шляхами, один з яких — удосконалення технологічних методів отримання високоякісного КРТ, а другий — розробка альтернативних напівпровідникових матеріалів з кращими, ніж у КРТ, параметрами.

Отже, пошук та дослідження альтернативних КРТ матеріалів і далі є актуальною науковою задачею.

Цієї мети можна досягти введенням у твердий розчин елементів із меншим, ніж у кадмію, йонним радіусом, що приведе до стабілізації кристалічного зв'язку Hg–Te. Такими ізовалентними елементами, зокрема, є Mn та Zn, йонні радіуси яких (1.39 Å і 1.3 Å) значно менші, ніж у Cd (1.56 Å) [4–5].

У праці [6] теоретично передбачено збільшення енергії зв'язку Hg–Te за наявності марганцю, але безпосередніх доказів цього факту немає. Однак помічено [7–8], що марганець сприяє не тільки поліпшенню структурної досконалості кристалів, але й властивостей поверхні твердого розчину.

Робота [9], у якій вивчали відпал кристалів $\text{Hg}_{x-1}\text{Zn}_x\text{Te}$ в насиченій парі ртуті, дає підставу вважати, що наявність цинку зменшує коефіцієнт дифузії ртуті порівняно з КРТ.

Ураховуючи зазначене, ми вважаємо, що п'ятикомпонентний твердий розчин $\text{Hg}_{1-x-y-z}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Zn}_z\text{Te}$ (КМЦРТ) з незначною (5–7%) концентрацією марганцю й цинку повинен забезпечити менший коефіцієнт дифузії ртуті, що приведе до кращої структурної досконалості та більшої стабільності матеріалу, а також забезпечить кращі поверхневі властивості.

І. ЗРАЗКИ ТА ВИМІРЮВАННЯ

Кристали КМЦРТ вирощували модифікованим методом зонної плавки з попередньо синтезованих однорідних полікристалічних злитків діаметром 15–20 мм і довжиною 15–18 см. Для синтезу твердих розчинів використовували вихідні компоненти Cd, Te, Zn, Hg, чистотою не гірше 99.9999 мас. %, і Mn, чистотою 99.998 мас. %, додатково очищений подвійною вакуумною дистиляцією.

Модифікація традиційного методу вертикальної зонної плавки зводиться до вирощування кристалів під кутом 30–60° до горизонту з інтенсивним перемішуванням розплаву обертанням ампули навколо своєї осі.

Вирощено два злитки КМЦРТ з різним складом марганцю:

для першого злитка $x=0.14$; $y=0.02$; $z=0.01$;

для другого — $x=0.1$; $y=0.04$; $z=0.01$.

Зразки для дослідження електрофізичних характеристик вирізали із шайб товщиною 500–600 мкм після розрізання злитка перпендикулярно до напрямку вирощування. Дефектний шар видаляли поліруванням алмазними пастами АСМ 2/1, АСМ 1/0. Остаточну обробляли поверхню хеміко-механічним поліруванням. Після вирощування всі кристали мали p -тип провідності.

Вимірювали температурні залежності коефіцієнта Голла та питомої провідності звичайним методом Голла на постійному струмі.

ІІ. ТЕОРЕТИЧНІ РОЗРАХУНКИ

Теоретичні розрахунки температурних залежностей питомої провідності, коефіцієнта Голла та рухливості вузькощілинних напівпровідників типу КРТ досліджували в багатьох працях (див., наприклад,

[10–14]). У більшості з них показано, що для успішного теоретичного моделювання температурних залежностей гальваномagnetних явищ потрібно враховувати лише два механізми розсіювання: на йонізованих домішках та полярних оптичних фонах. У цих роботах отримано добре узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними. Тому ми також враховували розсіювання лише на йонізованих домішках та полярних оптичних фонах.

Час релаксації для цих механізмів розсіювання розраховували за допомогою таких виразів:

$$\tau_{\text{йон}} = \frac{\hbar\chi^2}{2\pi e^4 N_{\text{йон}} F_{\text{йон}}} \kappa^2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial \kappa}, \quad (1)$$

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{\hbar\chi^*}{2e^2 \kappa_0 T F_{\text{опт}}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \kappa}, \quad (2)$$

де $\chi = \chi_s + \chi_\infty$ — сума статичної та височастотної діелектричної проникливості; $\chi^* = \chi_s \chi_\infty / (\chi_s - \chi_\infty)$; $N_{\text{йон}}$ — концентрація йонізованих домішок; $F_{\text{йон}}$, $F_{\text{опт}}$ — функції, що враховують непараболічність зонної структури матеріалу.

Концентрацію носіїв знаходили з розв'язку рівняння електронейтральності:

$$N_d + p_1 + p_2 = n + N_a \left[1 + 4 \exp \left(\frac{(E_a - E_g) - E_F}{k_0 T} \right) \right]^{-1}, \quad (3)$$

де n , p_1 , p_2 , N_d , N_a — відповідно концентрації електронів, тяжких та легких дірок, донорних та акцепторних домішок; E_a , E_g , E_F — відповідно енергія активації акцепторного рівня, ширина забороненої зони та рівень Фермі (енергія відраховується від дна зони провідності).

Загальні вирази для питомої провідності та коефіцієнта Голла у слабких магнетних полях мають вигляд:

$$\sigma = e(n\mu_n + p_1\mu_{p1} + p_2\mu_{p2}), \quad (4)$$

$$R = \frac{1}{e} \frac{(-a_r^{(n)} n\mu_n^2 + a_r^{(p1)} p_1\mu_{p1}^2 + a_r^{(p2)} p_2\mu_{p2}^2)}{(n\mu_n + p_1\mu_{p1} + p_2\mu_{p2})^2}, \quad (5)$$

де μ_n , μ_{p1} , μ_{p2} — рухливості електронів, тяжких та легких дірок відповідно; $a_r^{(n)}$, $a_r^{(p1)}$, $a_r^{(p2)}$ — відповідні голл-фактори.

Обчислювали ширину забороненої зони для КМЦРТ за методикою, викладеною в [15].

Для перевірки правильності нашого підходу до цих кристалів розраховано температурні залежності рухливості для двох зразків з урахуванням лише цих двох механізмів розсіювання. Результати подано на рис. 1.

Як видно з рисунка, рухливість першого зразка (вгорі) при температурах, більших за 100 К, добре описується розсіюванням на оптичних фонах, а на рисунку внизу — в основному, розсіюванням на йонізованих домішках. Отже, і в цьому випадку ми можемо обмежитися лише двома вказаними механізмами розсіювання.

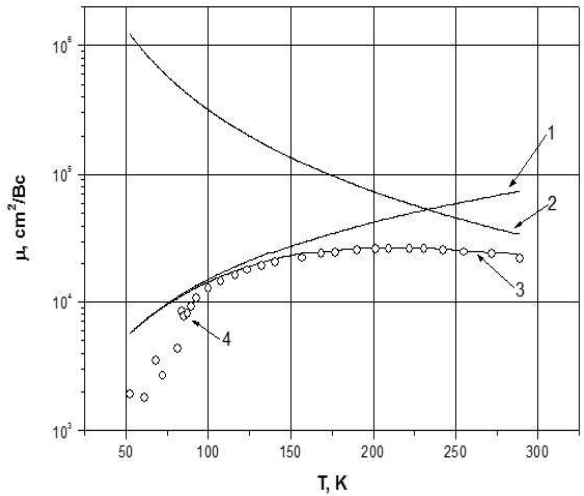
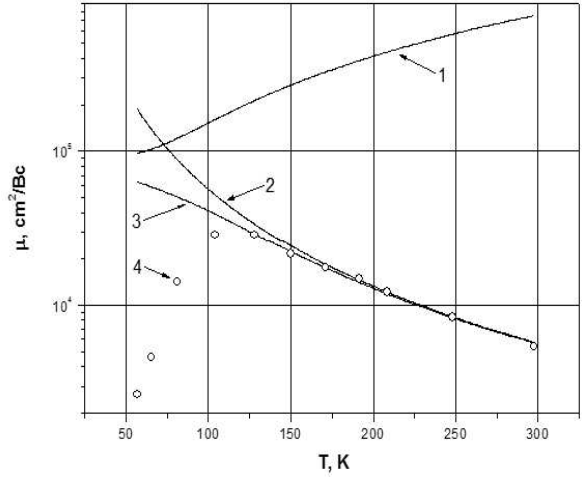


Рис. 1. Порівняння розрахованих температурних залежностей рухливості електронів з експериментальними. 1 — розсіювання на йонізованих домішках; 2 — оптичних фонах; 3 — результуюча рухливість; 4 — експериментальна залежність рухливості від температури (вгорі — зразок № 1.2.2, внизу — зразок № 1.3.3).

III. АНАЛІЗ ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

Для визначення основних параметрів КМЦРТ відібрано 6 зразків, три з яких у всьому дослідженому інтервалі температур демонстрували n -тип провідності (рис. 2, 4, 6), а в інших трьох була інверсія знака коефіцієнта Голла (рис. 3, 5, 7) у діапазоні температур 100–250 К. Оскільки зразки не відпалювалися після вирощування, то, як і в усіх матеріалах типу КРТ,

тут спостерігається змішана провідність. Акцептори виступають власні дефекти матеріалу — вакансії ртуті. Їх концентрація в невідпалених кристалах завжди більша за концентрацію донорних домішок.

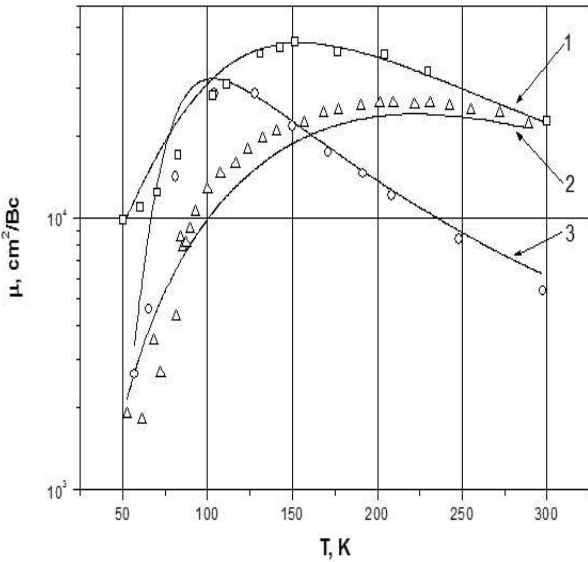


Рис. 2. Температурна залежність рухливості носіїв: 1 — зразок № 1.3.1; 2 — зразок № 1.3.3; 3 — зразок № 1.2.2.

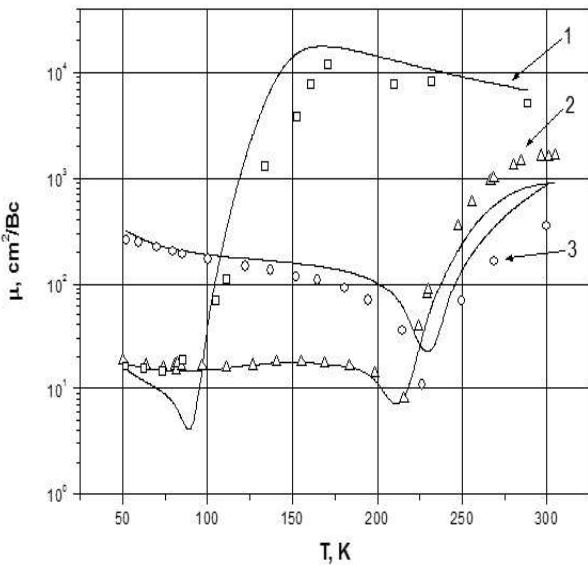


Рис. 3. Температурна залежність рухливості носіїв: 1 — зразок № 1.1.15; 2 — зразок № 2.1.1; 3 — зразок № 2.1.6.

Однак оскільки рухливість електронів провідності в цих матеріалах приблизно в 100 разів більша за рухливість дірок, ми бачимо велику різноманітність характеристик кристалів. У вузькощілинних кристалах, коли концентрація власних електронів матеріалу значна, а концентрація акцепторів не дуже велика, ми маємо електронний тип провідності в усьому до-

слідженому температурному діапазоні (зразки 1–3 на рис. 2, 4, 6).

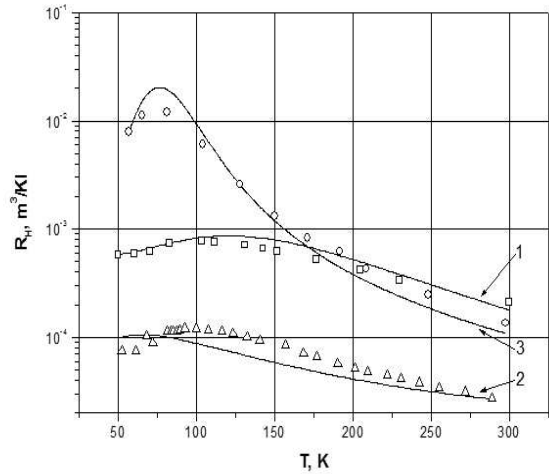


Рис. 4. Температурна залежність коефіцієнта Голла: 1 — зразок № 1.3.1; 2 — зразок № 1.3.3; 3 — зразок № 1.2.2.

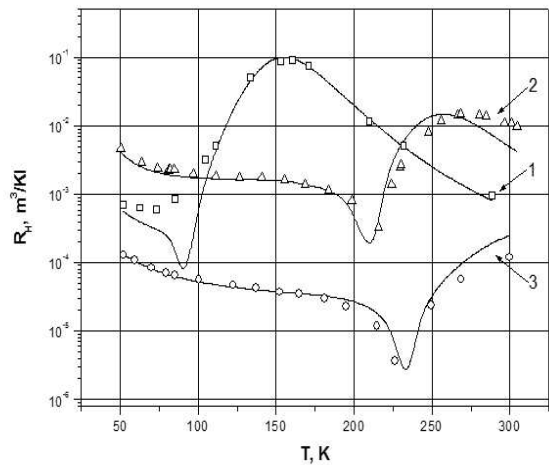


Рис. 5. Температурна залежність коефіцієнта Голла: 1 — зразок № 1.1.15; 2 — зразок № 2.1.1; 3 — зразок № 2.1.6.

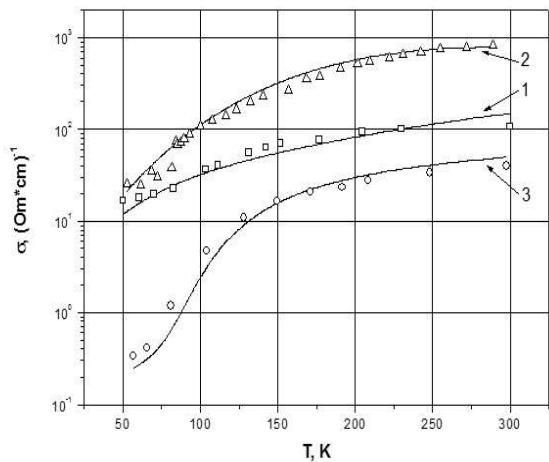


Рис. 6. Температурна залежність питомої електропровідності: 1 — зразок № 1.3.1; 2 — зразок № 1.3.3; 3 — зразок № 1.2.2.

Якщо зразок має значну ширину забороненої зони, то внаслідок малої концентрації власних електронів провідності ми побачимо інверсію коефіцієнта Голла, що й видно на рис. 5.

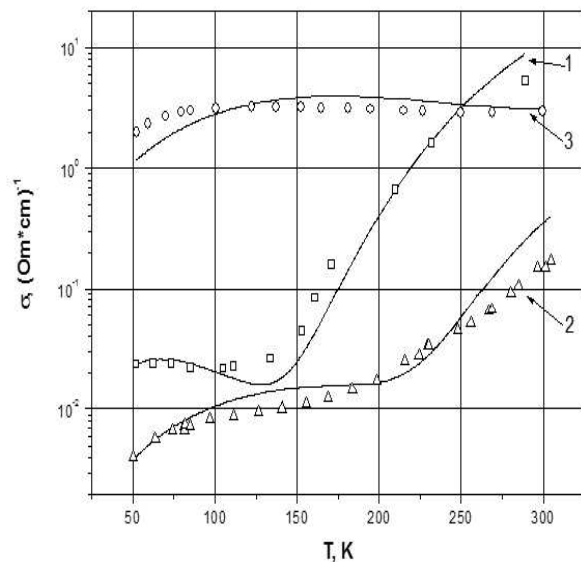


Рис. 7. Температурна залежність питомої електропровідності: 1 — зразок № 1.1.15; 2 — зразок № 2.1.1; 3 — зразок № 2.1.6.

Слід відзначити цілком задовільне узгодження результатів теоретичних розрахунків з експериментальними даними. Знехтування складовою легких дірок під час розрахунків практично не змінило ходу температурних залежностей, отже, вплив легких дірок незначний. Значення параметрів, при яких обчислено теоретичні залежності, занесено в таблицю 1. Концентрацію донорних домішок приймали рівною 10^{15} см^{-3} . У цю ж таблицю для порівняння також занесено результати оптичних вимірювань ширини забороненої зони зразків при кімнатній температурі.

Як видно з таблиці та температурних залежностей коефіцієнта Голла, питомої провідності та рухливості, поведінка досліджених кристалів нового напівпровідникового твердого розчину КМЦРТ одразу після вирошування цілком задовільно пояснюється в межах моделі змішаної провідності. Що стосується зразка 1.3.3 (крива 2 на рис.2,4,6), то хоча він також задовільно описується цією теорією, однак значення E_g та E_a для нього отримуються від'ємними, що малоймовірно.

Аналізуючи наведені результати, можна побачити закономірність, яка полягає в залежності між шириною забороненої зони матеріялу та розташуванням акцепторного рівня щодо стелі валентної зони — чим більша ширина забороненої зони, тим вищий акцепторний рівень та навпаки. Цей факт був також проілюстрований у монографії [16].

Зразок	Склад зразка			Ширина забороненої зони E_g , eV ($T=300 \text{ K}$)		N_a , см^{-3}	E_a , meV
	$\text{Hg}_{1-x-y-z}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Zn}_z\text{Te}$			Теор.	Експер.		
	x	y	z				
1.2.2	0.14	0.014	0.015	0.142	0.157	$1 \cdot 10^{16}$	9
1.3.1	0.1	0.02	0.01	0.0949	—	$3.7 \cdot 10^{17}$	2
1.1.15	0.18	0.025	0.015	0.232	0.228	$2 \cdot 10^{16}$	10
2.1.1	0.23	0.05	0.02	0.3846	0.385	$7 \cdot 10^{15}$	15
2.1.6	0.16	0.04	0.01	0.238	0.244	$2.5 \cdot 10^{17}$	12

Таблиця 1. Параметри зразків КМЦРТ різного складу.

ВИСНОВКИ

Розраховано температурні залежності питомої провідності, коефіцієнта Голла та рухливості носіїв заряду і проведено порівняння з експериментальними даними, які отримані під час гальваноманетних вимірювань зразків п'ятикомпонентного твердого розчину $\text{Hg}_{1-x-y-z}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Zn}_z\text{Te}$.

При розрахунках урахувано розсіювання носіїв

заряду на йонізованих домішках та полярних оптичних фонах.

Отримано задовільне узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними.

Із найкращого узгодження теоретичних розрахунків з експериментальними даними було визначено параметри кристалів КМЦРТ: ширину забороненої зони, концентрацію та енергію активації акцепторів.

Виявлено якісну закономірність між положенням акцепторного рівня та шириною забороненої зони.

- [1] R. Dornhaus, G. Nimtz, Springer Pract. Mod. Phys. **98**, 119(1983).
 [2] G. Nimtz, B. Schlicht, R. Dornhaus, Appl. Phys. Lett. **34**, 490 (1979).
 [3] H. R. Vudynath, J. Electrochem. Soc. **128**, 2609 (1981).
 [4] И. С. Вирт, Н. Н. Григорьев, А. В. Любченко *и др.*, Поверхность. Физика, химия, механика **4**, 60 (1988).
 [5] I. I. Izhmin, Proc. SPIE **3890**, 519 (1998).
 [6] A. Wall, C. Captile, A. Franciosi, J. Vac. Sci. Technol. A **4**, 818 (1986).
 [7] О. А. Боднарук, И. Н. Горбатюк, В. И. Каленик *и др.*, Неорг. матер. **38**, 335 (1992).
 [8] P. M. Bridenbaugh, Materials Lett. **3**, No. 7/8, 287 (1985).
 [9] R. Grangler, A. Lasbley, S. Rolland *et al.*, J. Cryst. Growth **88**, 682 (1988).
 [10] W. Scott, E. Stelzer, J. Hager, J. Appl. Phys. **47**, 1408 (1976).
 [11] A. Rogalski, Infrared Phys. **31**, 117 (1991).
 [12] А. И. Власенко, Я. М. Олих, Р. К. Савкина, Физ. техн. полупр. **34**, 670 (2000).
 [13] Л. А. Косяченко, А. В. Марков, С. Е. Остапов *та ін.*, Журн. фіз. досл. **7**, 101 (2003).
 [14] О. О. Bodnaruk, S. E. Ostapov, I. M. Rarenko *et al.*, J. Alloys Comp. **371**, 93 (2004).
 [15] И. Н. Горбатюк, А. В. Марков, С. Э. Остапов, И. М. Раренко ФТП **38**, 1414 (2004).
 [16] Н. П. Гавалешко, П. Н. Горлей, В. А. Шендеровский, Узкозонные полупроводники. Получение и физические свойства, (Киев, Наукова думка, 1984)

**A STUDY OF ELECTROPHYSICAL PROPERTIES
OF HgCdMnZnTe MONOCRYSTALS**

I. M. Gorbatyk, V. V. Zhiharevich, S. E. Ostapov
*Chernivtsi National University,
 2 Kotsyubinskiy St., Chernivtsi, UA-58012, Ukraine*

This paper presents a study of the temperature dependencies for conductivity, Hall coefficient and mobility in monocrystals of the new semiconductor solid solution HgCdMnZnTe of various composition. We revealed the peculiarity of scattering on ionized impurities and polar optical phonons and defined the energy gap (using optical and galvanomagnetic study) and also gave the estimation of concentration and activation energy of acceptor impurity. It is shown that the influence of light holes is negligible in simulation procedure of scattering processes in the crystals of this type.