

# Спектр фундаментального отражения и электронная структура CdTe, легированного примесью хлора

© П.Н. Ткачук

Черновицкий государственный университет,  
58012 Черновцы, Украина

E-mail: ptkachuk@chdu.cv.ua

(Поступила в Редакцию 7 марта 2000 г.)

Исследовано влияние примеси хлора на спектр фундаментального отражения и электронную структуру кристаллов теллурида кадмия. При концентрации примеси  $N_{Cl} > 5.0 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  в спектрах отражения появляется пик, обусловленный переходом электронов в X-точке зоны Бриллюэна из верхней расщепленной валентной зоны на уровни Cl, расположенные на 0.05 eV выше Г-минимума зоны проводимости. Другие особенности спектров отражения и электронной структуры объясняются влиянием спин-орбитального расщепления в точке X и непрямыми переходами электронов из уровней Cl в Г-минимум.

Теллурид кадмия является широкозонным полупроводниковым материалом ( $E_g = 1.606 \text{ eV}$  при 4.2 К) с прямыми переходами [1]. Легирование CdTe элементами III и VII группы Периодической системы приводит к их размещению соответственно в узлах подрешеток Cd и Te, где они проявляют донорные свойства. Донорные уровни находятся ниже Г-минимума зоны проводимости (ЗП), являются в основном мелкими (до 0.02 eV) и рассчитываются при помощи водородоподобной модели. В [2] на основе исследования барической зависимости удельного сопротивления и коэффициента Холла монокристаллов CdTe, легированного Ga, In, Cl, Br и другими донорными примесями, предложена модель "не-Г-центра". Данная модель учитывает перестройку решетки вокруг донорных примесей, что приводит к образованию состояний, отличающихся от водородоподобных. Согласно [2], уровни примеси Cl располагаются на 0.05 eV выше минимума ЗП вне точки Г зоны Бриллюэна (ЗБ). При этом симметрия центра не уточнялась. С учетом возможности не прямых переходов данная модель нашла применение для интерпретации экспериментальных данных при исследовании ловушек захвата для электронов в [3] и полос фотолюминесценции (ФЛ) за краем фундаментального поглощения в [4]. В [5] предполагается расположение внецентрового минимума ЗП, ассоциированного с указанными выше примесями, в точке X ЗБ, однако такое уточнение модели "не-Г-центра" нуждается в экспериментальном подтверждении.

Цель настоящей работы — исследование влияния примеси хлора на спектр фундаментального отражения и электронную структуру теллурида кадмия, а также изучение правомочности модели "не-Г-центра".

## 1. Подготовка образцов и методика эксперимента

Монокристаллы CdTe выращивали из расплава методом Бриджмена. Легирование в процессе роста кристаллов проводили путем добавления в ампулу с предвари-

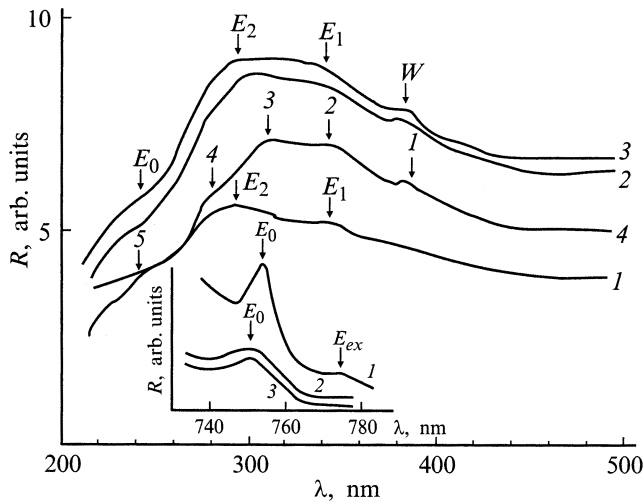
тельно синтезированным CdTe соответствующей навески  $\text{CdCl}_2$ . Концентрация вводимой в расплав примеси хлора находилась в пределах  $10^{18} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .

Измерения электропроводности  $\sigma$  и постоянной Холла  $R_H$  проводили в интервале 300–420 К на механически полированных образцах в форме параллелепипеда с размерами  $1.5 \times 2 \times 8 \text{ mm}$ . Образцы нелегированного CdTe обладали при комнатной температуре дырочной проводимостью с концентрацией носителей  $p \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  и подвижностью  $\mu_p = 80 - 90 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ , образцы CdTe + Cl — электронной проводимостью с  $n \approx 10^6 \text{ cm}^{-3}$  и  $\mu_n = 300 - 400 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ . Для монокристаллов CdTe, компенсированных хлором, характерны постоянство электрофизических параметров и одинаковое спектральное распределение интенсивности низкотемпературной ФЛ по длине слитка [6].

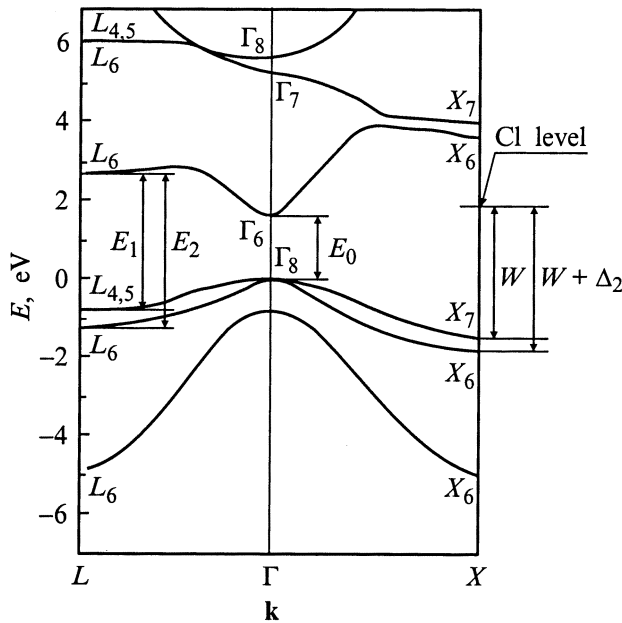
Спектры фундаментального отражения ( $R(\lambda)$ ) измерялись при комнатной температуре с помощью двухлучевого спектрометра (тип 356, фирма "Хитачи", Япония). Измерения проводили с использованием естественных сколов кристаллов при практически нормальном падении лучей света на поверхность исследуемого образца.

## 2. Результаты и их обсуждение

В спектрах  $R(\lambda)$  нелегированного CdTe и CdTe + Cl (вставка на рис. 1) проявляется пик  $E_0$  (переход  $\Gamma_8 - \Gamma_6$  на рис. 2). Значения максимумов при 1.64 и 1.65 eV соответственно коррелируют с теоретическим значением 1.65 eV [1]. Обусловленное примесью хлора коротковолновое смещение пика  $E_0$  на 0.01 eV сопровождается его "размытием", причем пропадает структура свободного экситона  $E_{ex}$  при 1.599 eV. Последнее обстоятельство, вероятнее всего, связано с эффектом диссоциации свободных экситонов в поле большого количества заряженных центров (в нашем случае доноров  $\text{Cl}_{Te}$ ). Смещение пика обусловлено, по-видимому, смещением ЗП в результате сильного взаимодействия электронов с фононами, излучаемыми при не прямых переходах из внецентрового минимума ЗП. В связи с этим отметим большое значение



**Рис. 1.** Фундаментальное отражение в длинноволновой (вставка) и УФ области спектра образцов CdTe (1), CdTe + Cl (2, 3) и Si (4). Концентрация примеси Cl: 2 —  $5.0 \times 10^{19}$ , 3 —  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$ .



**Рис. 2.** Расположение уровней Cl в точке X ЗБ и основные переходы, соответствующие пикам фундаментального отражения в монокристаллах CdTe и CdTe + Cl. Структура зон CdTe взята из [1].

фрелиховской константы ( $\alpha_{\text{ph}} = 0.39$ ) [7], характеризующей взаимодействие электрона ЗП с оптическими фононами в CdTe, а также максимальное значение энергии акустических фононов на краю ЗБ. В пользу предположения о сильном электрон-фононном взаимодействии в кристаллах  $n$ -CdTe + Cl с большой концентрацией примеси хлора говорит анализ зависимостей  $\mu \sim T^\alpha$ . В случае образцов с  $N_{\text{Cl}} = 10^{18} - 10^{19} \text{ cm}^{-3}$   $\alpha = -(1.5 - 1.6)$ .

Такое значение  $\alpha$  является типичным для  $n$ -CdTe [8] и соответствует теоретическому значению  $(-1.5)$ , обусловленному рассеянием на акустических колебаниях решетки. В случае образцов с  $N_{\text{Cl}} = 5.0 \cdot 10^{19} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$   $\alpha = -4.5$ , что свидетельствует о сравнимом вкладе в общую подвижность различных механизмов рассеяния. Видимо, здесь следует учитывать двухфононное рассеяние на акустических колебаниях с  $\alpha = -3$  [9] и рассеяние на оптических колебаниях решетки, при котором  $\alpha$  определяется величиной  $\exp(\hbar\omega_{\text{LO}}/kT - 1)$ . Отметим, что энергетическое положение доноров может обеспечить в результате непрямого перехода образование продольного оптического ( $\hbar\omega_{\text{LO}} = 0.0213 \text{ eV}$  [1]) и двух продольных акустических фононов с максимальной энергией  $\hbar\omega_{\text{LA}} \approx 0.014 \text{ eV}$ . Такая величина  $\hbar\omega_{\text{LA}}$  хорошо согласуется с известными экспериментальными и расчетными значениями энергии LA-фонона на границах ЗБ [1].

В ультрафиолетовой (УФ) области спектра наблюдаются следующие структуры  $R$ . Для CdTe — дублет  $E_1$  и  $E_2$  ( $E_1 + \Delta_1$ ) при 3.64 и 4.27 eV (кривая 1), соответствующий переходам  $L_{4,5} - L_6$  и  $L_6 - L_6$  (рис. 2). Величина спин-орбитального расщепления  $\Delta_1 = 0.63 \text{ eV}$  коррелирует с литературными данными 0.6–0.7 eV [10], однако значения максимумов пиков дублета несколько завышены по сравнению с типичными теоретическими значениями 3.49 и 4.04 eV [1,10]. Согласно [1,10], пик  $E_0$  при 5.16 eV соответствует переходу  $\Delta_5 - \Delta_5$ . Согласно отметить, что сравнительно слабая интенсивность пика  $E_0$  ( $\Delta_5 - \Delta_5$ ) противоречит данным ранних работ по исследованию спектров фундаментального отражения теллурида кадмия, однако согласуется с расчетными данными работ, где предложены более сложные модели природы структур  $R$  за счет переходов в объеме ЗБ [10]. Для CdTe + Cl (кривые 2 и 3) характерным является уравнивание интенсивностей пиков  $E_1$  и  $E_2$ , что приводит к некоторой неопределенности их энергетического положения, а также появление неизвестного в литературе пика  $W$  при 3.23 eV. На первый взгляд, интегральная структура спектра отражения кристаллов CdTe + Cl в УФ области очень похожа на структуру  $R$  для Si (кривая 4). Отметим, что энергетическое положение пиков 1, 2, 3, 4, 5 при 3.2, 3.5, 3.9, 4.5, 5.16 eV коррелирует с энергией основных переходов в кристаллах Si [10]:  $L'_3 - L_1$  (3.2 eV),  $\Gamma'_{25} - \Gamma_{15}$  (3.5 eV),  $X_4 - X_1$  (4.0 eV),  $\Sigma_2 - \Sigma_1$  (4.4 eV),  $L'_3 - L_1$  (5.2 eV). Следовательно, сходство спектров фундаментального отражения обусловлено появлением пика  $W$  и относительно слабой интенсивностью  $R$  в области 5.16–5.20 eV.

Размещение уровней хлора в точке X ЗБ на 0.05 eV выше  $\Gamma$ -минимума (рис. 2) позволяет объяснить природу пика  $W$  в кристаллах с  $N_{\text{Cl}} > 5.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  как переход электронов из точки  $X_{7v}$  во внецентровой минимум ЗП, ассоциированный с донорной примесной зоной. Кроме того, спин-орбитальное расщепление валентной зоны в точке X ( $\Delta_2 = 0.32 - 0.46 \text{ eV}$  [10]) приводит к "наложению" переходов  $L_{4,5} - L_6$  ( $E_1$ ) и  $X_{6v}$ -внецентровому минимуму ( $W + \Delta_2$ ). В результате увеличивается интенсив-

ность пика  $E_1$ , однако сравнительно с нелегированным CdTe возможно его смещение и некоторое "размытие" дублетной структуры  $E_1$  и  $E_2$ .

Таким образом, при достаточно высоком уровне легирования CdTe донорной примесью хлора его зонная структура претерпевает существенные изменения, что выражается в смещении ЗП и образовании донорной примесной зоны с минимумом в точке X ЗБ.

В заключение автор выражает благодарность М.И. Курику и Н.Д. Паранскому за содействие в проведении исследований и участие в обсуждении результатов.

## Список литературы

- [1] K.R. Zanio. In: Semiconductors and semimetals. Vol. 113. Academic press, N.Y.–San Francisco (1978). 235 p.
- [2] G.W. Iseler, J.A. Kafalas, A.J. Strauss, H.F. Macmillan, R.H. Bube. Solid State. Commun. **10**, 619 (1972).
- [3] R.O. Bell, F.V. Wald. IEEE Trans. Nucl. Sci. **NS-22**, 241 (1975).
- [4] P.N. Tkachuk, V.I. Tkachuk, N.D. Korbutjak, A.N. Razansky, D.V. Korbutjak, S.G. Krylyuk. J. Cryst. Growth. **184/185**, 536 (1998).
- [5] R. Legros, Y. Marfaing, R.J. Tribulet. Phys. Chem. Solid. **39**, 179 (1978).
- [6] D.V. Korbutjak, S.G. Krylyuk, P.M. Tkachuk, V.I. Tkachuk, N.D. Korbutjak, M.D. Razansky. J. Cryst. Growth. **197**, 659 (1999).
- [7] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. М. (1989). 328 с.
- [8] А.В. Савицкий, В.И. Ткачук, П.Н. Ткачук. ФТП **26**, 952 (1992).
- [9] Е.В. Кучис. Методы исследования эффекта Холла. Советское радио, М. (1974). 328 с.
- [10] В.В. Соболев, В.В. Немошкаленко. Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронная структура полупроводников. Наук. думка, Киев (1988). 424 с.