

О резонансном донорном уровне в *n*-CdTe по данным об электронном транспорте при всестороннем давлении

© М.И. Даунов[¶], А.С. Ковалев^{¶¶}, А.Ю. Моллаев, А.Б. Магомедов

Институт физики Дагестанского научного центра Российской академии наук, 367003 Махачкала, Россия

(Получена 6 мая 2010 г. Принята к печати 2 июля 2010 г.)

Представлены результаты количественного анализа экспериментальных данных о барических (при гидростатическом давлении до $P = 2.5$ ГПа и $T = 300$ К) и температурных (в температурном интервале 15–300 К при атмосферном давлении) зависимостей коэффициента Холла и электропроводности объемных кристаллов *n*-CdTe с концентрацией электронов $10^{15} - 10^{17}$ см⁻³ при $T = 300$ К. Использована четырехуровневая модель: глубокие донорные уровни, расположенные в запрещенной зоне и сплошном спектре зоны проводимости, и мелкие донорный и акцепторный уровни. Определено положение донорных уровней и коэффициенты давления энергетических промежутков между ними и краем зоны проводимости.

1. Введение

Эффективным внешним воздействием, позволяющим исследовать примесный энергетический спектр электронов в полупроводниках, является высокое давление. Особенно целесообразно использовать изотропное сжатие кристаллической решетки полупроводников с резонансными уровнями дефектов (*n*-InAs [1], *n*-HgSe(Fe) [2], *n*-CdTe [3]), так как определить их наличие и расположение в энергетическом спектре другими методами затруднительно.

Сведения о резонансном уровне в *n*-CdTe, расположенном в непрерывном спектре зоны проводимости, как отмечалось в работе [4], носят противоречивый характер. В этой работе справедливо указывалось, что такой уровень не является мелким „водородоподобным“, так как он расположен ниже X-долины и выше валентной зоны на расстоянии ~ 1.5 эВ. По-видимому [5], он является глубоким и связан со всей зоной Бриллюэна. Энергия этих состояний практически не зависит от давления и коэффициент давления $A = (\partial/\partial P)|\epsilon_c^{000} - \epsilon_{dr}|$ должен быть близок к барическому коэффициенту ширины запрещенной зоны $\partial\epsilon_g/\partial P = 75$ мЭВ/ГПа [6]. Однако в действительности коэффициент давления для этих состояний в *n*-CdTe составляет $A = 126$ мЭВ/ГПа $> \partial\epsilon_g/\partial P$ [5]. Ввиду того что в работах [3,4] использована одноуровневая модель, мы сочли целесообразным дать последовательный количественный анализ данных эксперимента [3,4,7], исходя из реальной ситуации, а именно в рамках четырехуровневой модели.

2. Результаты и дискуссия

На рис. 1, 2 и в таблице приведены характерные данные о температурных и барических зависимостях концентрации электронов $n_c = (|R_H|/e)^{-1}$ монокристаллических образцов *n*-CdTe, а на рис. 3–6 результаты

количественного анализа этих данных. Барические зависимости концентрации электронов для образцов *n*-CdTe при $T = 300$ К (рис. 2) получены по зависимостям $\rho(P)$ [3] (ρ — удельное сопротивление) и в приближении независимости подвижности электронов $R_H(\rho)$ [8] от давления.

При атмосферном давлении при низких температурах зависимость $n(T)$ носит экспоненциальный характер (рис. 1), обусловленный наличием мелких доноров с концентрацией N_{sh} . Из рис. 3 видно, что уровень Ферми при $T \rightarrow 0$ К стабилизируется в окрестности уровня энергии мелкого донорного центра. По этим данным определена концентрационная зависимость энергии этого уровня, аналогичная полученной ранее для ZnO [9]:

$$\epsilon_{sh} = (-18.4 + 5.5 \cdot 10^{-5} N_{sh}^{1/3}) \text{ мЭВ.} \quad (1)$$

Здесь и далее энергия отсчитывается от дна зоны проводимости. За положительное направление принято направление в глубь зоны. Нумерация кривых на рисунках соответствует нумерации образцов, приведенных в таблице.

Значение $|\epsilon_{sh}| = 18.4$ мЭВ при $N_{sh} \rightarrow 0$ согласуется с рассчитанной величиной эффективной боровской энергии $\epsilon_B = 14 - 19$ мЭВ согласно известным данным об эффективной массе электронов $m/m_0 = 0.11 - 0.14$ и диэлектрической проницаемости $\chi = 10$ [10]. Отметим, что при $N_{sh} = 4 \cdot 10^{16}$ см⁻³ ионизация мелкого донора $\epsilon_{sh} \approx 0$.

В кристаллах *n*-CdTe с концентрацией электронов $(1 \pm 0.2) \cdot 10^{15}$ см⁻³ при 300 К зависимость $R_H(T)$ выше

Параметры образцов 1–5 при комнатной температуре и атмосферном давлении

Параметры	1	2	3	4	5
$-R_H, \text{ см}^3/\text{Кл}$	3472.2	1562.5	4166.6	520.83	56.81
$\rho, \Omega \cdot \text{см}$	3.472	1.302	3.1	0.255	0.04
$\mu_H, \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	1000	1200	1344	2042	1420.45

[¶] E-mail: i.daunov@mail.ru

^{¶¶} E-mail: ask2007@yandex.ru

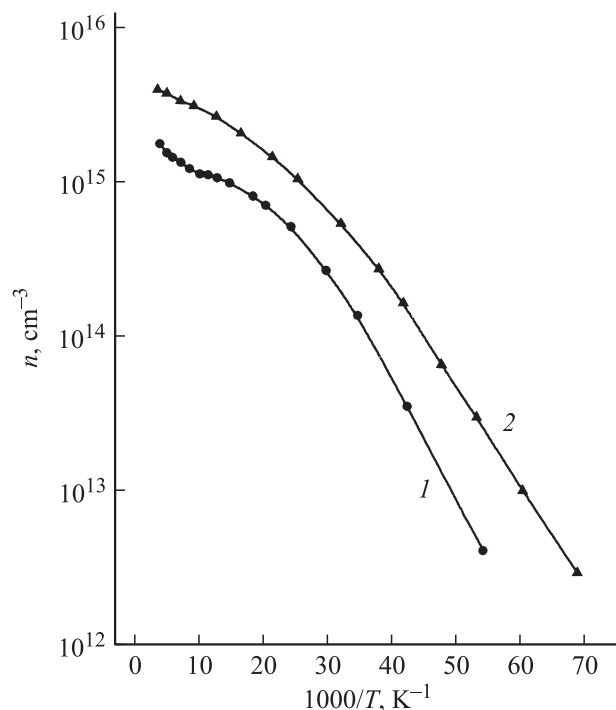


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации электронов $n = (|R_H|/e)^{-1}$ в монокристаллических образцах *n*-CdTe № 1 и 2 (см. таблицу) при атмосферном давлении [7].

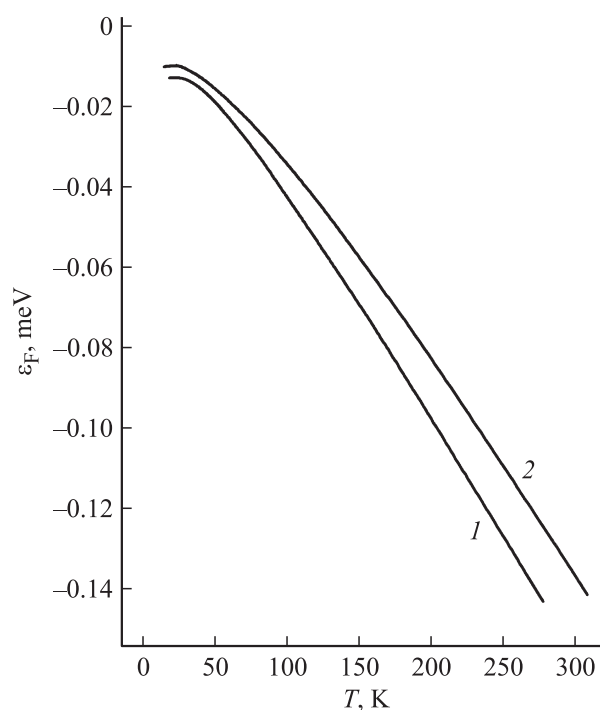


Рис. 3. Температурная зависимость энергии Ферми для образцов *n*-CdTe № 1, 2 при атмосферном давлении.

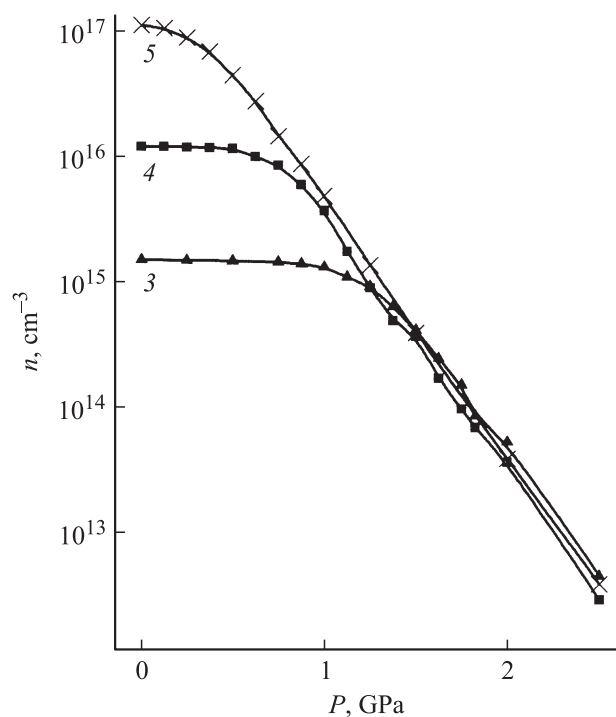


Рис. 2. Барические зависимости концентрации электронов в монокристаллических образцах *n*-CdTe № 3, 4 и 5 (см. таблицу) при комнатной температуре [3].

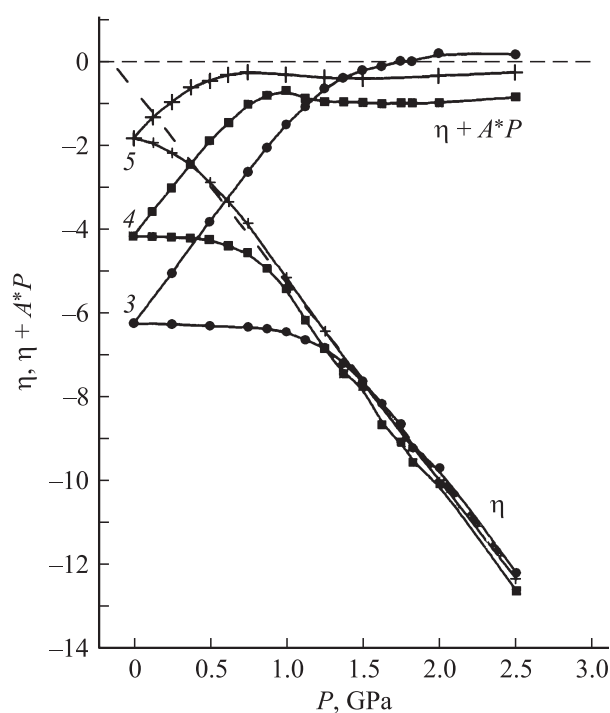


Рис. 4. Барические зависимости приведенной энергии Ферми η и величины $(\eta + A^*P)$ относительно дна зоны проводимости $\varepsilon_c = \varepsilon_{c(0)} + AP$ и $\varepsilon_{c(0)}$ соответственно при комнатной температуре для образцов *n*-CdTe № 3–5.

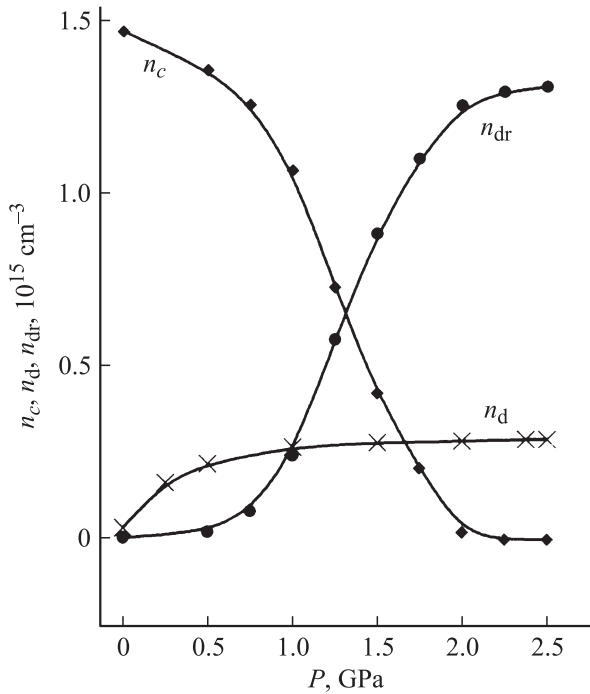


Рис. 5. Барические зависимости концентрации электронов в зоне проводимости (n_c), на глубоких резонансных (n_{dr}) и глубоких донорных (n_d) примесных центрах при комнатной температуре для образца n -CdTe № 3.

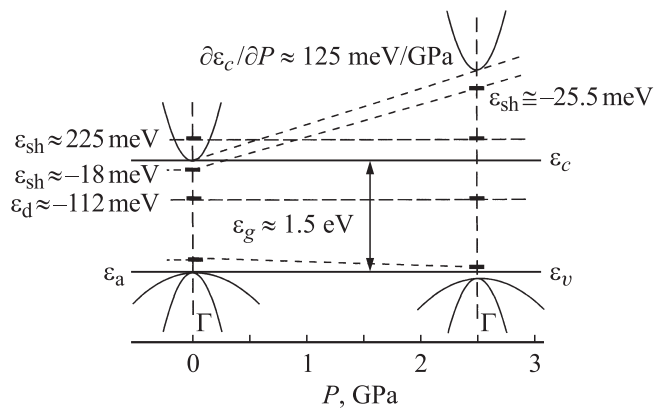


Рис. 6. Перестройка энергетического спектра в n -CdTe при всестороннем давлении до 2.5 ГПа.

50 К выходит на насыщение и выше 100 К вновь становится экспоненциальной (рис. 1). Очевидно, в температурном интервале 50–100 К практически все мелкие доноры ионизованы (область „истощения“). Очевидно также, что выше 100 К наблюдается термическая активация электронов с глубокого донорного уровня в зону проводимости.

Как показали исследования $\rho(P)$ при $T = 300$ К [3,4], в глубине зоны проводимости имеется еще один глубокий донорный уровень. Под воздействием высокого давления край зоны проводимости ϵ_c движется в направлении этого уровня, энергетический зазор между ними со-

кращается и электроны „перетекают“ на эти глубокие примесные центры (рис. 6).

В целом, очевидно, для количественного анализа необходимо использовать следующие соотношения:

$$n_c + n_{sh} + n_d + n_{dr} - n_a = N_{sh} + N_d + N_{dr} - N_a, \quad (2)$$

$$n_{sh} = N_{sh} \{1 + (1/2) \exp[\epsilon_{sh(0)}^* - (\eta + A_{sh}^* P)]\}^{-1}, \quad (3)$$

$$n_d = N_d \{1 + \exp[\epsilon_{d(0)}^* - (\eta + A^* P)]\}^{-1}, \quad (4)$$

$$n_{dr} = N_{dr} \{1 + \exp[\epsilon_{dr(0)}^* - (\eta + A^* P)]\}^{-1}, \quad (5)$$

$$n_a = N_a. \quad (6)$$

Здесь N_{sh} , N_d , N_{dr} — концентрация мелких, глубоких донорных и глубоких резонансных донорных примесных центров соответственно; N_a — концентрация мелких акцепторов, $n_a = N_a$; n_c , n_{sh} , n_d , n_{dr} — концентрация электронов в зоне проводимости на мелких, глубоких и глубоких резонансных донорных примесных центрах соответственно; $\epsilon_{sh(0)}^*$, $\epsilon_{d(0)}^*$, $\epsilon_{dr(0)}^*$ — приведенные энергии мелкого донорного уровня и глубоких донорных уровней в запрещенной зоне и в зоне проводимости при атмосферном давлении соответственно; η — приведенная энергия Ферми; A_{sh}^* , A^* — приведенные барические коэффициенты энергетических зазоров между краем зоны проводимости и мелким и глубокими донорными уровнями соответственно.

Для образца n -CdTe № 1 при атмосферном давлении получено: $\epsilon_{sh(0)} = -12.6$ эВ, $N_{sh} = 1.7 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$. Коэффициент давления $A_{sh} = \partial \epsilon_{sh} / \partial P = -3$ мэВ/ГПа рассчитан с учетом убывания статистической диэлектрической проницаемости и возрастания эффективной массы электронов с ростом всестороннего давления в прямозонных полупроводниках. При температурах выше $T = 300$ К при атмосферном давлении определено положение глубокого донорного центра $\epsilon_{d(0)} = -112$ мэВ и концентрация этих центров $N_d = 6.8 \cdot 10^{14}$ см $^{-3}$.

Как видно из рис. 4, приведенная энергия Ферми $\eta(P)$ относительно дна зоны проводимости $\epsilon_c = \epsilon_{c(0)} + A^* P$ с ростом давления от атмосферного вначале медленно убывает, что обусловлено „вымораживанием“ электронов зоны проводимости на глубокие донорные центры, уровень энергии которых расположен в запрещенной зоне (рис. 5, 6). При дальнейшем увеличении давления убывание η заметно усиливается и зависимость $\eta(P)$ становится линейной ($|\eta| \propto P$). Положение η относительно уровней глубоких донорного и резонансного примесных центров, а также относительно $\epsilon_{c(0)}$ стабилизируется (рис. 4, 6). Из детального количественного анализа зависимости $n_c(P)$ для образца № 3 с учетом приведенных выше данных, полученных при атмосферном давлении, следует: $\epsilon_{dr(0)} = 225$ мэВ, $N_{dr} = 6.7 \cdot 10^{18}$ см $^{-3}$, $\partial \epsilon_{dr} / \partial P \approx -125$ мэВ/ГПа.

Итак, $n_a = N_a$, $N_{dr} \gg N_{sh}$, $N_{dr} \gg N_d$ и $N_{dr} \approx N_a$. Коэффициент заселенности глубокого резонансного уровня $\sim 10^{-3} - 10^{-4}$, концентрация компенсирующих акцепторов $\sim 10^{18}$ см $^{-3}$ и коэффициент компенсации $K \approx 1$ ($N_a \approx N_{dr}$).

3. Заключение

Таким образом, исследование электронного транспорта при всестороннем давлении позволило получить полную информацию о примесном энергетическом спектре. Поскольку кристаллы n -CdTe не были специально легированными, происхождение примесных центров обусловлено технологической предысторией и проблема получения совершенных кристаллов n -CdTe остается нерешенной. Остается неясной причина расхождения в величинах коэффициента $|\partial\varepsilon_{\text{dr}}/\partial P| \approx 125$ мэВ/ГПа и общепринятого значения барического коэффициента ширины запрещенной зоны $\partial\varepsilon_g/\partial P \approx 75$ мэВ/ГПа [6], поскольку проводимость резонансной примесной зоны не должна быть существенной, так как ее заселенность близка к нулю, а влияние хаотического потенциала на электронный транспорт и спектр также должно быть незначительным при комнатной температуре.

Список литературы

- [1] А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габитов, С.Ф. Маренкин. ФТВД, **11** (4), 61 (2001).
- [2] И.М. Цидильковский. *Электронный спектр бесцелевых полупроводников* (Екатеринбург, Наука, 1991).
- [3] A.G. Foyt, R.E. Halsted, W. Paul. Phys. Rev. Lett., **16** (2), 55 (1966).
- [4] В. Пол. *Тр. IX Межд. конф. по физике полупроводников* (июль 1968 г.) (Л., Наука, 1969).
- [5] М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габитов. ФТП, **40** (5), 536 (2006).
- [6] M.D. Froegly, D.S. Dunstan. Phys. Status Solidi B, **211**, 17 (1999).
- [7] V. Segall, M.R. Lorenz, R.E. Halsted. Phys. Rev., **129** (6), 2471 (1963).
- [8] А.Ю. Моллаев, Л.А. Сайпулаева, А.Г. Алибеков. Fizika, Cild № 1–2, 34, (2007).
- [9] М.И. Даунов, Р.К. Арсланов, М.М. Гаджиалиев, Е.В. Кортунова, П.П. Хохлачев, П.П. Шванский. ФТП, **40** (11), 1289 (2006).
- [10] *Справочник. Таблицы физических величин*, под ред. И.К. Кикоина (М., Атомиздат, 1976).

Редактор Т.А. Полянская

On resonance donor level in n -CdTe according to data on electron transport at allround pressure

M.I. Daunov, A.S. Kovalev, A.Yu. Mollaev,
A.B. Magomedov

Daghestan Scientific Center,
Russian Academy of Sciences,
367003 Makhachkala, Russia

Abstract This work presents of results quantitative analysis of experimental data on baric (at hydrostatic pressure up $P = 2.5$ GPa and $T = 300$ K) and temperature (in temperature interval of 15–300 K at atmospheric pressure) dependences of Hall coefficient and conductivity of n -CdTe crystals with electron concentration $10^{15} - 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ at $T = 300$ K. There was applied four-level model: deep donor levels, located in forbidden band and on compact spectrum of conduction band, and shallow donor and acceptor levels. There is also to determine the location of donor levels and pressure coefficients of energy spaces between them and edge of conduction band.