

ПОВЕДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ, ОБУСЛОВЛЕННОГО ПЕРЕХОДАМИ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ, В CdTe В ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР 5—400 К

А. И. Белогорохов

© 1992

Обнаружено, что в широком температурном интервале от 5 до 400 К спектры пропускания ряда образцов теллурида кадмия пересекаются в одной точке в инфракрасной области волновых чисел $\omega \sim 1500 \text{ см}^{-1}$ (0.186 эВ). Найдено удовлетворительное объяснение этого явления с точки зрения межподзонных переходов с учетом гофрировки потолка валентной зоны.

Теллурид кадмия до сих пор вызывает повышенный интерес исследователей вследствие применения его в качестве подложечного материала для CdHgTe оптоэлектронных приборов, детекторов для изучения ядерных реакций, а также в технологии производства солнечных батарей [1–3]. Наибольшее затруднение при использовании теллурида кадмия для изготовления подложек вызывает высокая плотность дефектов, таких как дислокации, что в свою очередь нежелательным образом влияет на оптические и электрофизические характеристики эпитаксиальных слоев, выращенных на полуизолирующих подложках.

В теллуриде кадмия валентная зона имеет сложную структуру и состоит из подзон легких и тяжелых дырок, которые вырождены в центре зоны Бриллюэна. Поэтому можно ожидать проявления резонансного характера поведения диэлектрической проницаемости, обусловленной переходами дырок между ветвями V_1 и V_2 валентной зоны, в области частот, соответствующих энергетическому расстоянию между ветвями в местах их пересечения с уровнем Ферми. В настоящей работе анализируются экспериментальные спектры оптического пропускания образцов CdTe, полученные в интервале температур от 4.5 К до 400 К; при этом особый интерес уделяется изучению явлений, имеющих место при низких температурах, когда электронные системы близки к вырождению, но тем не менее еще необходимо учитывать конечную температуру носителей заряда.

Поглощение и отражение света определяются комплексной диэлектрической проницаемостью $\epsilon(\omega)$, связанной с фононной и электронной подсистемами, зависящей от частоты. При этом при вычислении $\epsilon(\omega)$, обусловленной свободными дырками, учитывалась гофрированность изоэнергетической поверхности в валентной зоне [4]. Учет гофра позволяет удовлетворительно описать значительные изменения величины коэффициента поглощения и формы его частотной зависимости, а также правильно определить оптическую эффективную массу дырок.

В работе исследовались образцы монокристаллического теллурида кадмия p -типа электропроводности, выращенного по методу Бриджмена, которые имели удельное сопротивление при комнатной температуре порядка $0.5\text{--}2.5 \cdot 10^2 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ и подвижность $40\text{--}80 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Концентрация носителей заряда при $T = 300 \text{ К}$ составляла $10^{15}\text{--}10^{18} \text{ см}^{-3}$. Поверхность образцов перед измерениями

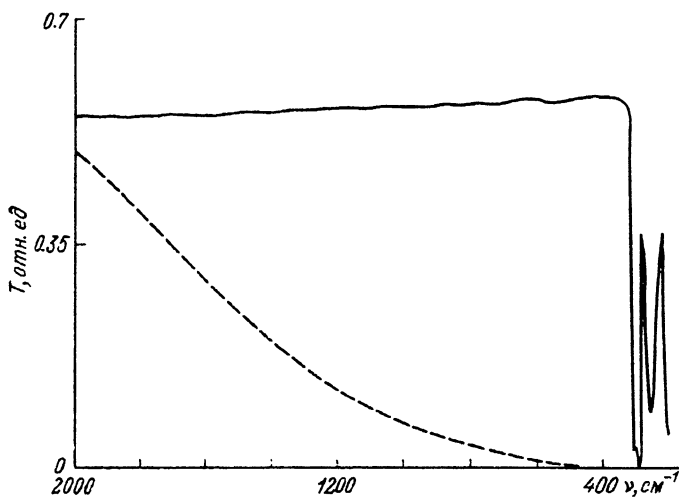


Рис. 1. Экспериментальные спектры пропускания двух различных образцов теллурида кадмия при $T = 5$ К.

подвергалась химико-механической полировке с последующим травлением в растворе $\text{Br}_2/\text{CH}_3\text{OH}$.

Целью работы являлось исследование процессов поглощения в материале p -CdTe. Оптические спектры регистрировались с помощью Фурье-спектрометра IFS-113v («BRÜKER») в диапазоне волновых чисел $20\text{--}5000\text{ см}^{-1}$ с разрешением 1 см^{-1} . Использование оптического гелиевого криостата CF-1100 («OXFORD INSTRUMENTS») позволило проводить низкотемпературные измерения со стабильностью теплового режима не хуже ± 0.1 К.

Исследованные образцы проявляли различный характер поведения в инфракрасных спектрах пропускания (рис. 1). Из этого рисунка видно, что образцы с более низкой концентрацией носителей заряда прозрачны в инфракрасном диапазоне волновых чисел вплоть до полосы поглощения на многофоновых процессах. Образцы же с большей концентрацией, когда ситуация близка к вырождению, но еще необходимо учитывать температуру носителей заряда, проявляют сильное поглощение в полосе $500\text{--}2000\text{ см}^{-1}$. Обращает на себя внимание изменение спектров пропускания таких образцов с понижением температуры: при $T = 4.5\text{--}400$ К они пересекаются практически в области одних и тех же волновых чисел, причем в зависимости от степени вырождения точка пересечения экспериментальных спектров смещается по энергетической шкале. Подобный характер поведения коэффициента поглощения от длины волны, $\alpha(\omega)$ в широком температурном интервале можно объяснить проявлением резонансного характера поведения диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega)$, обусловленного переходами носителей заряда между ветвями легких и тяжелых дырок. Для этого представим $\epsilon(q, \omega)$ при $|q| \rightarrow 0$ в виде

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_0 + \Delta\epsilon_{Lh} + \Delta\epsilon_{hh} + \Delta\epsilon_{\text{inter}} \quad (1)$$

Здесь ϵ_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, а следующие два члена описывают переходы внутри зон легких и тяжелых дырок, последний — вклад межподзонных $V_2 \rightarrow V_1$ -переходов, для которых справедливо следующее соотношение:

$$\Delta\epsilon_{\text{inter}} = 4\pi e^2 \left[\frac{1}{m_2} - \frac{1}{m_1} \right] \sum_k \frac{f(\epsilon_{k_1}) - f(\epsilon_{k_2})}{(\epsilon_{k_1} - \epsilon_{k_2})^2 - \omega^2} \quad (2)$$

Выражения для $\Delta \varepsilon_{Lh}$ и $\Delta \varepsilon_{hh}$ в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, а также рассеянием дырок приведены в работе [4]. Там же приведены соотношения для интегралов перекрытия блоховских амплитуд.

Для анализа экспериментальных данных настоящей работы будем интересоваться случаем низких частот, т. е. когда $\hbar\omega \ll E_0$. Здесь E_0 — характерная энергия дырок: $E_0 = kT$ в невырожденном случае или E_0 совпадает с химическим потенциалом в вырожденном полупроводнике. Выражением для мнимой части $\varepsilon(\omega)$, через которую запишется α , служит

$$\text{Im } \varepsilon(\omega) = \frac{\sqrt{2} e^2}{\hbar \sqrt{\hbar\omega}} \left\langle I(\Omega) \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 - m_2}} [f(a) - f(b)] \right\rangle, \quad (3)$$

где m_1 и m_2 — массы тяжелых и легких дырок, зависящие от углов; угловые скобки с индексом Ω обозначают усреднение по углам, определяющим ориентацию вектора \mathbf{k} ; в формализме Латтинджера величина $I(\Omega)/k^2$ есть интеграл перекрытия [4]

$$I(\Omega) = \frac{1}{g^2} \left(\frac{5}{3} + \gamma - \frac{2}{3} g^2 \right) - \frac{3}{2} \frac{\gamma^2}{g^4} \left\{ \sum_i e_i^6 - \left(\sum_j e_j^4 \right) \right\}. \quad (4)$$

Здесь e_i — проекции единичного вектора $\mathbf{k}/|\mathbf{k}|$ на кристаллические оси,

$$g = \sqrt{1 + 3\gamma (l_x^2 l_y^2 + l_y^2 l_z^2 + l_z^2 l_x^2)},$$

$$\gamma = (\gamma_3^2 - \gamma_2^2) / \gamma_2^2,$$

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — константы гамильтониана Латтинджера,

$$a = \frac{\hbar\omega}{m_1/m_2 - 1}, \quad b = \frac{\hbar\omega}{1 - m_2/m_1}.$$

Коэффициент поглощения связан с мнимой частью $\varepsilon(\omega)$ следующим образом:

$$\alpha = 4\pi k / \lambda, \quad n + ik = \sqrt{\varepsilon}, \quad (5)$$

где α — длина волны (см^{-1}), k — коэффициент экстинкции. Без учета гофрированности валентной зоны $I(\Omega) = 1$. Тогда получается следующий результат для коэффициента поглощения, связанного с переходами между ветвями легких и тяжелых дырок:

$$\alpha_{12}(\omega) = \frac{e^2 \omega^{1/2}}{n c \hbar^{3/2} \left(\frac{1}{2m_2} - \frac{1}{2m_1} \right)} \times$$

$$\times \left\{ \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \frac{\rho}{1-\rho} - \frac{E_f}{kT} \right) + 1 \right]^{-1} - \left[\exp \left(\frac{\omega}{kT} \frac{1}{1-\rho} - \frac{E_f}{kT} \right) + 1 \right]^{-1} \right\}. \quad (6)$$

Здесь ω — частота, k — постоянная Больцмана, $\rho = m_2/m_1$, E_f — уровень Ферми, n — показатель преломления, c — скорость света. Выражение (6) имеет аналогичный полученному в работе [5] спектральный характер поведения и в предельном случае полного вырождения совпадает с результатами работы [5].

Зависимость положения уровня Ферми E_f от температуры аппроксимировалась следующим образом [6]:

$$E_f(T) = E_f(0) \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{E_f(0)} \right)^2 \right]. \quad (7)$$

Учет гофрировки валентной зоны приводит к существенному изменению формы частотной зависимости $\text{Im} \varepsilon(\omega)$, в частности к сильному размытию высокочастотного края полосы поглощения. Если воспользоваться результатами работы [7], то для коэффициентов Латтинджера имеем: $\gamma_1 = 5.3 \pm 0.5$, $\gamma_2 = 1.7 \pm 0.3$, $\gamma_3 = 3.0 \pm 0.3$. Расчеты показывают, что в этом случае при слабом вырождении край поглощения со стороны низких частот имеет довольно резкую границу, так как подзона легких дырок гофрирована слабо. В пределе высоких частот, когда $a > E_0$, можно считать, что $f(b) = 0$, т. е. все состояния в подзоне легких дырок свободны. Тогда если выполняется условие [4]

$$h\omega \gg \frac{8kT(\gamma_2)(1+\gamma)^{3/2}}{\gamma_1\gamma},$$

то гофрированность изоэнергетических поверхностей тяжелых дырок приводит к тому, что дырки возбуждаются из состояний с направлениями квазиимпульсов, соответствующими наибольшей массе. В этом случае, как следует из работы [4],

$$\begin{aligned} \text{Im} \varepsilon(\omega) = & \frac{4\sqrt{2}e^2|\gamma_2|(3+\gamma)kT}{3h(h\omega)^{3/2}\gamma_1\gamma} \sqrt{\frac{(1+\gamma)m_0}{|\gamma_2|}} \times \\ & \times \exp \left\{ \frac{E_f}{kT} - \frac{h\omega}{kT} \left(\frac{m_1^*}{m_2^*} - 1 \right) \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $m_1^* = m_0/(\gamma_1 - 2|\gamma_3|)$, $m_2^* = m_0/(\gamma_1 + 2|\gamma_3|)$ — массы тяжелой и легкой дырок в направлении [111]; m_0 — масса свободного электрона. В нашем случае это приводит к сдвигу длинноволнового края полосы пропускания и является существенным при низких температурах. Расчетные кривые (из соотношения (8)) приведены на рис. 2.

На рис. 3 показаны экспериментальные спектры пропускания одного из образцов CdTe при различных температурах. Наилучшего совпадения экспериментальных и расчетных кривых (согласно соотношению (6)) удалось достичь при следующих параметрах: $P_{cv} = 9.0 \cdot 10^{-8}$ эВ·см, $m_{HH}^* = 0.7m_0$, $E_{f_0} = E_g/25$ в диапазоне температур $5 \text{ К} \leq T \leq 400 \text{ К}$. Здесь P_{cv} — матричный элемент взаимодействия v - и c -зон, m_{HH}^* — эффективная масса тяжелых дырок. В этом же температурном интервале уровень Ферми ведет себя следующим образом: меняет свое положение от 65 мэВ при 5 К до 39 мэВ при 405 К, считая от потолка валентной зоны. Математический расчет показывает, что вариация значений E_{f_0} приводит к существенному сдвигу по шкале волновых чисел точки пересечения кривых поглощения при различных температурах (рис. 4). Как указывалось, выше, эта точка действительно смещается в экспериментальных спектрах для различных образцов. Это вызвано отклонениями в значениях концентрации свободных носителей заряда (КСНЗ). Оценка КСНЗ по положению уровня Ферми дает следующие значения: при $T = 78 \text{ К}$ концентрация легких дырок составляет $8.80 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, тяжелых дырок $1.53 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$; при $T = 295 \text{ К}$ эти значения равны

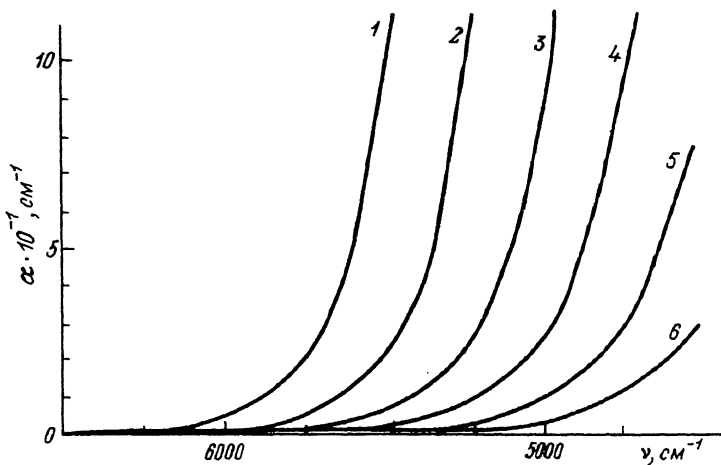


Рис. 2. Влияние гофрировки валентной зоны на коротковолновый край поглощения теллурида кадмия при низких температурах.

$T, K: 1-8, 2-9, 3-10, 4-11, 5-12, 6-13.$

соответственно $1.42 \cdot 10^{17}$ и $2.63 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Правильность данного расчета достаточно легко проверить, измеряя спектры отражения $R(\omega)$ образцов в дальней инфракрасной области спектра, по положению плазменного минимума. Значения плазменной частоты ω_p должны составлять 2.0 и 66 см^{-1} при $T=78$ и 295 К соответственно. В экспериментальных спектрах $R(\omega)$ исследованных образцов при $T=295$ К действительно имеют место минимумы отражения в области рассчитанных значений ω_p .

Как видно из рис. 4, математический расчет поведения $\alpha_{12}(\omega)$ предполагает наличие второй точки пересечения кривых поглощения при различных температурах в инфракрасной спектральной области $\omega \sim 350 \text{ см}^{-1}$. Но здесь мы сталкиваемся с определенной трудностью при регистрации оптических спектров,

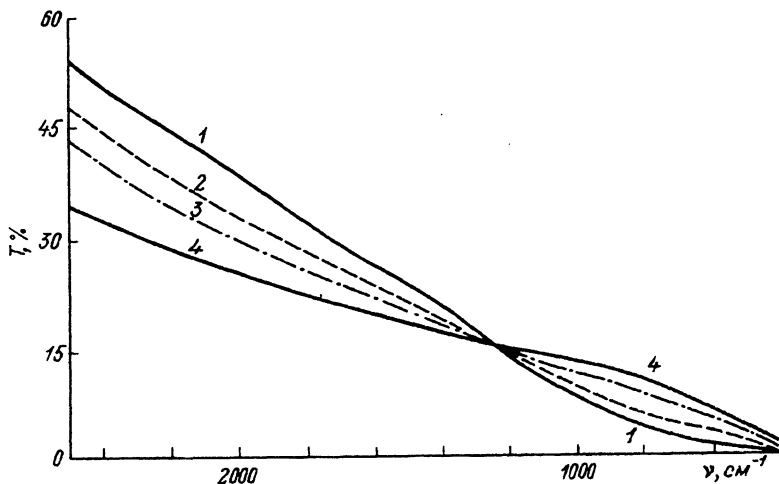


Рис. 3. Экспериментальные спектры пропускания образца CdTe при различных температурах измерения.

$T, K: 1-5, 2-100, 3-250, 4-400.$

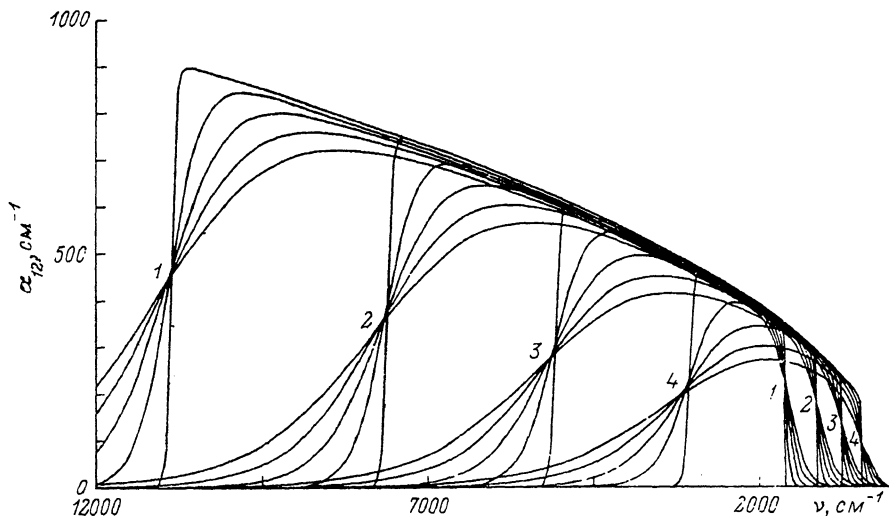


Рис. 4. Рассчитанные зависимости коэффициента поглощения $\alpha_{12}(\omega)$ в CdTe для следующих значений E_{f0} : $E_g/7$ (1), $E_g/10$ (2), $E_g/15$ (3), $E_g/20$ (4).

которая вызвана наложением на $\alpha_{12}(\omega)$ процессов многофононного поглощения. Тем не менее на нескольких образцах при температурах $5 \text{ K} \leq T \leq 120 \text{ K}$ в области частот $\omega \sim 350 \text{ cm}^{-1}$ характер поведения $\alpha_{12}(\omega)$ достаточно четко проявился, что позволило найти вторую точку пересечения кривых поглощения. Таким образом, можно утверждать, что предложенный подход к описанию полученных спектров достаточно корректен. Вопрос о том, почему данный механизм поглощения четко проявляется, когда уровень Ферми занимает положение на расстоянии в несколько десятков мэВ от потолка валентной зоны и связано ли это с существованием каких-либо уровней в запрещенной зоне, требует дальнейшего изучения.

Список литературы

- [1] Chu M., Wang C. C. // J. Appl. Phys. 1980. V. 51. P. 2255—2258.
- [2] Triboulet R., Marfaing Y., Cornnet A., Siffert P. // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. P. 2759—2761.
- [3] Triboulet R., Narfaing Y. // J. Electrochem. Soc. 1973. V. 120. P. 1260—1263.
- [4] Ребане Ю. Т. // ФТП. 1980. Т. 14. № 2. С. 289—294.
- [5] Combescot M., Nozieres P. // Solid State Commun. 1972. V. 10. P. 301—305.
- [6] Мурзин В. И. // ФТП. 1973. Т. 7. № 8. С. 1610—1611.
- [7] Milchberg G., Saminadayar K., Molva E., Zelsmann H. R. // Phys. Stat. Sol. (B). 1984. V. 125. P. 795—803.

Научно-исследовательский
и проектный институт
редкометаллической промышленности «Гиредмет»
Москва

Поступило в Редакцию
17 июня 1991 г.