

- [1] Бокий Г. Б. Кристаллохимия МГУ. 1960.
 [2] Lashkarev G. V., Migley A. D., Shevchenko A. D., Tovstyuk K. D. // Phys. St. Sol. 1974. V. 161. N 63. P. 663—668.
 [3] Бродовой А. В., Лашкарев Г. В., Радченко М. В., Товстюк К. Д. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 4. С. 610—614.
 [4] Бродовой А. В., Лашкарев Г. В., Кучеренко И. В. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 8. С. 1506—1507.
 [5] Брандт Н. Б., Белоусова // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. В. 2. С. 646—657.
 [6] Фальковский Л. А., Бродовой А. В., Лашкарев Г. В. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. В. 1. С. 334—348.
 [7] Лашкарев Г. В., Радченко М. В., Орлецкий В. Б., Товстюк К. Д., Шевченко А. Д. // Матер. IV Всес. симп. Львов, 1975. Ч. II. С. 51.
 [8] Shimadu T., Kobayashi K., Katayama Y. // Proc. XIII Int. conf. Phys. Semicond. Roma, 1976. P. 314.

Институт проблем материаловедения АН УССР
 Киев

Получено 3.01.1991
 Принято к печати 11.01.1991

ФТП, том 25, вып. 5, 1991

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ $A^{II}B^{IV}C_2^V$

Басалаев Ю. М., Польшгалов Ю. И., Пошлавной А. С.

Теория температурной зависимости энергетических уровней развита рядом авторов [1-4]. Фэн [1] во втором порядке теории возмущений вычислил сдвиг энергетических уровней, возникающий из-за испускания и поглощения фононов электронами. Другой подход к проблеме температурной зависимости зонной структуры развит Антончиком, а позднее Бруксом и Ю [2] (АБЮ подход). Суть подхода заключается в перенормировке атомных форм-факторов $V_\nu(\mathbf{b}_n, T)$ кристаллического псевдопотенциала при конечных температурах с помощью факторов Дебая—Уоллера $W_\nu(\mathbf{b}_n, T) = \exp\{-|\mathbf{b}_n|^2 \langle u_\nu^2 \rangle / 6\}$:

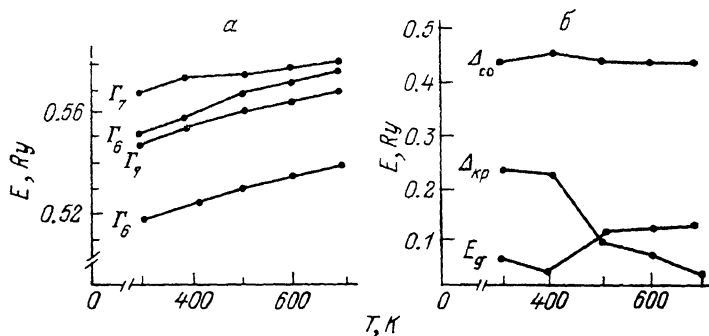
$$V_\nu(\mathbf{b}_n, T) = \frac{\Omega(T_0)}{\Omega(T)} V_\nu(\mathbf{b}_n, T_0) W_\nu(\mathbf{b}_n, T) / W_\nu(\mathbf{b}_n, T_0), \quad (1)$$

где \mathbf{b}_n — векторы обратной решетки, $\langle u_\nu^2 \rangle$ — среднеквадратичное смещение ν -го атома, Ω — объем элементарной ячейки, T_0 — температура, при которой атомные форм-факторы $V_\nu(\mathbf{b}_n, T_0)$ известны. Более общее рассмотрение задачи [3, 4] показало, что слагаемые АБЮ и Фэна дают независимые вклады в температурную зависимость зонной структуры. Оценка [3] вклада слагаемого Фэна в температурный коэффициент E_g для GaP, GaAs, InP показала, что он составляет от 5 до 20 % полного температурного коэффициента. Этим можно объяснить успешное применение АБЮ подхода к полупроводникам $A^{III}B^V$ [5-9]. Поскольку полупроводники $A^{II}B^{IV}C_2^V$ являются ближайшими кристаллохимическими аналогами соединений $A^{III}B^V$, можно ожидать, что АБЮ подход окажется достаточно успешным применительно к этим кристаллам. Используя АБЮ подход, мы по методу эмпирического псевдопотенциала с учетом спин-орбитального взаимодействия провели расчет температурной зависимости энергетической зонной структуры пяти соединений $A^{II}B^{IV}C_2^V$ для различных температур в центре зоны Бриллюэна. Интервал температур выбирался в соответствии с имеющимися литературными данными по температурной зависимости среднеквадратичных смещений $\langle u_\nu^2(T) \rangle$ соответствующих атомов в кристаллах $A^{III}B^V$ и $A^{II}B^{IV}$ [10] и постоянных решеток $A^{II}B^{IV}C_2^V$ [11-13]. Среднеквадратичные смеще-

Температурная зависимость параметров энергетической зонной структуры соединений
 $A^{II}B^{IV}C^{V}_2$ (в единицах 10^{-4} эВ/К)

Соединение	$\alpha_{сп}^{экср} (E_g)$	$\alpha_{сп}^{теор} (E_g)$	$\alpha_{сп}^{теор} (\Delta_{кр})$	$\alpha_{сп}^{теор} (\Delta_{со})$
ZnSnAs ₂	-28 [11] (83÷296 K)	-4.45 (300÷900 K)	0.4	-0.4
CdSiAs ₂	-2.3 [15] (77÷300 K)	-4.5 (300÷500 K)	0.5	-1.0
CdGeAs ₂	-1.9 [16] (80÷295 K) -2.8 [17] (10÷270 K) -2.0 [18] (4.2÷293 K)	-2.8 (300÷600 K)	5.1	-1.9
CdSnAs ₂	-2.0 [19] (4.2÷295 K) -1.0 [20] (4.2÷300 K)	-4.7 (300÷700 K)	2.0	1.8
ZnSnSb ₂	—	-6.5 (300÷500 K)	-1.5	-2.0

ния при этом считались изотропными и выбирались для Zn — из ZnSe, Cd — из CdTe, Sn и Ge — как среднее арифметическое данных величин для атомов, составляющих кристаллы InSb и GaAs соответственно, для As — из GaAs, Sb — из InSb, Si — из SiC [10]. На рисунке 1, а в качестве примера приведена вычисленная нами температурная зависимость энергетических уровней, расположенных вблизи запрещенной зоны для CdSnAs₂ — подобные результаты получены для других соединений. Анализируя эти результаты, можно отметить,



Температурная зависимость энергетических уровней (а) и параметров зонной структуры E_g , $\Delta_{кр}$ и $\Delta_{со}$ (б) в CdSnAs₂.

что дно зоны проводимости (Γ_7) и три уровня валентной зоны (Γ_6 , Γ_7 , Γ_8), определяющие параметры E_g , $\Delta_{кр}$ и $\Delta_{со}$, поднимаются относительно первоначального положения при нагревании кристалла с различной скоростью. Этим объясняется изменение величин E_g , $\Delta_{кр}$, $\Delta_{со}$ при изменении температуры: с ростом температуры $\Delta_{кр}$ увеличивается, а E_g и $\Delta_{со}$ уменьшаются (см. рисунок 1, б). Найденные в результате вычислений средние значения коэффициентов теплового расширения $\alpha_{сп}(E_g)$, $\alpha_{сп}(\Delta_{кр})$, $\alpha_{сп}(\Delta_{со})$ и полученные из эксперимента значения: коэффициента $\alpha_{сп}^{экср}(E_g)$ приведены в таблице. Из таблицы видно, что теоретические и экспериментальные значения $\alpha_{сп}(E_g)$ имеют один порядок величины. Отсутствие хорошего количественного соответствия может быть объяснено погрешностями эксперимента (см. разброс значений для CdGeAs₂ и CdSnAs₂), а также тем, что эксперимент и теория относятся к разным температурным интервалам. Что касается $\alpha_{сп}(\Delta_{кр})$ и $\alpha_{сп}(\Delta_{со})$, то какие-либо сведения об экспериментальных значениях этих величин для рассмотренных нами соединений в литературе

отсутствуют. Полученные нами теоретические результаты могут быть полезны при качественном анализе экспериментов, обусловленных тепловым смещением энергетических уровней в кристаллах $A^{IV}B^{IV}C_2^V$.

Список литературы

- [1] Fan H. Y. // Phys. Rev. 1951. V. 82. P. 900—905.
- [2] Antoncik E. // Czech. J. Phys. 1955. V. 5. N 4. P. 367—378.
- [3] Baumann K. // Phys. St. Sol. (b). 1974. V. 63. N 1. P. K74—K74.
- [4] Allen Ph. B., Heine V. // J. Phys. C. 1976. V. 9. N 12. P. 2305—2312.
- [5] Tsay Y. F., Gong B. // Phys. Rev. B. 1972. N 6. P. 2330—2336.
- [6] Camassel J., Auvergne D. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 8. P. 3258—3267.
- [7] Walter J. P., Zucca R. R., Cohen M. L., Shen Y. R. // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24. N 3. P. 102—104.
- [8] Hennel A. M. // Phys. St. Sol. (a). 1971. V. 8. N 2. P. K111—K113.
- [9] Shindo K., Hoshino K. // Phys. Lett. A. 1972. V. 41. N 3. P. 243—244.
- [10] Vetelino J. F., Gaur S. P., Mitra S. S. // Phys. Rev. B. 1972. V. 3. N 6. P. 2360—2366.
- [11] Кожина И. И. // Вестн. ЛГУ. 1979. № 6. С. 83—87.
- [12] Кожина И. И., Ошерин В. Н. // Вестн. ЛГУ. 1982. № 10. С. 35—39.
- [13] Weaire D., Noolandi J. // J. Phys. Coll. 3. 1975. V. 36. P. C3—27—C3—29.
- [14] Masumoto K., Isomura S. // Trans. Nat. Res. Inst. Metals. 1966. V. 8. N 5. P. 200—209.
- [15] Лебедев А. А., Овезов К., Прочухан В. Д., Рудь Ю. В., Сергинов М. // Письм. ЖЭТФ. 1976. Т. 2. В. 9. С. 385—390.
- [16] Кесаманлы Ф. П., Рудь Ю. В., Слободчиков С. В. // ДАН СССР. 1965. Т. 161. В. 5. С. 1065—1066.
- [17] Акимченко И. П., Борщевский А. С., Иванов В. С. // ФТП. 1973. Т. 7. В. 1. С. 144—148.
- [18] Madelon R., Shaimi M., Hairic A., Poumier K., Mercey B. // Sol. St. Commun. 1984. V. 5. N 6. P. 545—548.
- [19] Сахарулидзе Г. А., Тучкевич В. М., Уханов Ю. М., Шмарцев Ю. В. // ФТТ. 1966. Т. 8. В. 4. С. 1159—1164.
- [20] Strauss A. J., Rosenberg A. J. // J. Phys. Chem. Sol. 1961. V. 17. N 3. P. 278—284.

Кемеровский государственный университет

Получено 3.01.1991

Принято к печати 18.01.1991

ФТП, том 25, вып. 5, 1991

p-n-ГОМОГЕННЫЕ InSe-ФОТОДИОДЫ

Катеринчук В. Н., Ковалюк М. З.

Как полупроводниковое соединение моноселенид индия используется в качестве основы многих диодных структур: гетеропереходов [1, 2], барьеров Шоттки [3], *p-n*-гомопереходов [4-6]. Сравнение свойств *p-n*-гомогенных InSe-диодов позволяет заключить, что в [5] при их изготовлении не достигнуто резкого распределения концентрации донорных и акцепторных примесей в полупроводнике, а в [6] полученные диоды не обладали идеальными вольт-амперными характеристиками (ВАХ).

В настоящей работе для формирования потенциального барьера в InSe использован хорошо зарекомендовавший себя при создании гетеропереходов метод оптического контакта [7] и установлено, что свойства диодов, полученных таким способом, удовлетворительно описываются в рамках диффузионной теории *p-n*-переходов.

Нелегированные и специально легированные примесью кадмия [8] кристаллы InSe выращивались методом Бриджмена и имели соответственно *n*- и *p*-тип проводимости с концентрацией основных носителей $\sim 10^{15}$ и $\sim 10^{13}$ см⁻³. Диоды готовились аналогично [7] и имели площадь $\sim 6 \div 10$ мм². Толщина слоя *n*-InSe в различных образцах составляла $\sim 20 \div 30$ мкм, а *p*-InSe — 300 ÷ 500 мкм.

Измерения вольт-фарадных (ВФХ) и вольт-амперных характеристик исследуемых диодов проводились по стандартной схеме с той лишь разницей, что для устранения влияния последовательного сопротивления диодов на эти характе-