

ТЕРМИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ ИОНИЗАЦИИ МЕЛКИХ ДОНОРОВ И АКЦЕПТОРОВ В КРИСТАЛЛАХ CdTe

Агринская Н. В.

Как было показано в работе [1], в соединениях $A^{II}B^{VI}$ энергия ионизации мелких доноров ε , определенная из температурной зависимости постоянной Холла R , зависит от концентрации донорной примеси и степени компенсации ($N_D, K=N_A/N_D$). Экспериментально наблюдаемая зависимость $\varepsilon(N)$ в большинстве случаев описывалась эмпирическим выражением, предложенным в работе [2],

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - \alpha (N_D^+)^{1/2}, \quad (1)$$

где ε_0 — энергия ионизации изолированного донора (экспериментально величина ε_0 находится из оптических измерений), N_D^+ — концентрация заряженных доноров (в компенсированном полупроводнике при низких температурах N_D^+ порядка N_A — концентрации акцепторов). При выводе выражения (1) предполагалось, что понижение энергии ионизации связано с кулоновским взаимодействием противоположно заряженных дефектов, поэтому $\alpha \approx e^2/\kappa$, где κ — диэлектрическая проницаемость. Аналогичная зависимость $\varepsilon(N^{1/2})$ была получена также в работе [3], где различие между термической и оптической энергиями ионизации связывалось с релаксацией распределения электронов внутри примесной зоны при ионизации электрона, при этом

$$\alpha = \Gamma \left(\frac{2}{3} \right) \frac{e^2}{4\pi\kappa} \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} \frac{e^2}{\kappa}.$$

Однако большое число экспериментов, приведенных в [1] для CdS, ZnSe, CdSe, CdTe и в [3] для GaP, GaAs, указывает на то, что зависимость $\varepsilon(N^{1/2})$ часто приводит к различным величинам ε_0 для одного и того же типа доноров, величина α больше теоретической и зависит от K . В последнее время сделана попытка вычислить зависимость $\varepsilon(N, K)$ с учетом крупномасштабных флуктуаций потенциала для двух предельных случаев — низких температур (kT мало по сравнению с шириной примесной зоны $W=(e^2/\kappa)N^{1/2}$ [4]) и высоких температур ($kT > W$) [5]. В последнем случае, который наиболее близок к условиям эксперимента, получено выражение

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon - \varepsilon_0 = -f(K) \frac{e^3 N^{1/2}}{\kappa^{3/2} (kT)^{1/2}}. \quad (2)$$

Оно справедливо при $n < N_A, N_D - N_A$ и при $kT > \Delta\varepsilon$, т. е. для компенсированного полупроводника и для температур, достаточно больших, чтобы электроны перераспределялись по состояниям примесной зоны.

Т а б л и ц а 1
Параметры для образцов CdTe, легированных донорами

№ образца	$N_D \cdot 10^{-16}, \text{см}^{-3}$	$N_A \cdot 10^{-15}, \text{см}^{-3}$	K	$\varepsilon, \text{мэВ}$	$f(K)$
1	0.025	0.020	0.8	12	3.7
2	0.07	0.025	0.35	11	3.7
3	0.11	0.06	0.55	11	2.9
4	0.52	0.17	0.32	10	1.85
5	0.8	0.75	0.93	10	1.5
6	1.3	1.27	0.95	8	1.8
7	1.8	0.92	0.51	5	2.6
8	2.25	1.75	0.78	7	1.7
9	3.15	2.8	0.89	2.7	2.3
10	3.2	3.1	0.97	6	1.6

В настоящей работе мы проанализировали данные для кристаллов CdTe, полученные ранее в нашей работе [6] и в работах других авторов [7, 8]. Использовались образцы n -типа, специально не легированные, содержащие остаточные примеси; образцы p -типа легировались фосфором [8]. Для образцов n -типа ϵ вычислялась из температурной зависимости R в области 15–100 К (рис. 1,

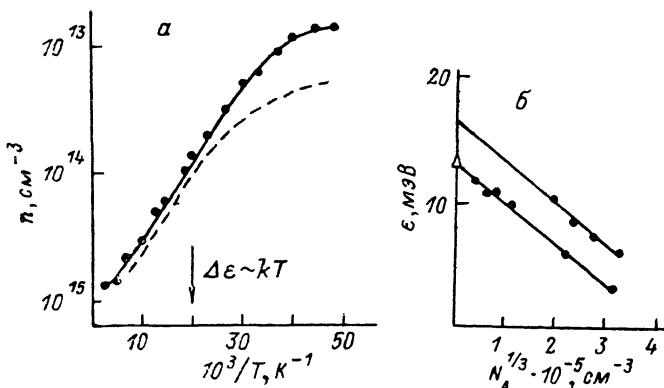


Рис. 1. Температурная зависимость $n = (Re)^{-1}$ для образца 10 (табл. 1) (а) и влияние концентрации заряженных доноров ($N_D^+ \approx N_A$) на ϵ в соответствии с формулой (1) (б).

Штриховая линия — зависимость $n(1/T)$, рассчитанная по формулам (2) и (3).

а). Для компенсированного полупроводника ($n < N_A$, $N_D - N_A$) зависимость $n(1/T)$ описывается выражением

$$n = (Re)^{-1} = gN_c \frac{N_D - N_A}{N_A} \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right), \quad (3)$$

$g=1/2$ для простых доноров в CdTe. При $T=300$ К $n \approx N_D - N_A$, полученные таким образом значения N_A , N_D , K , ϵ приведены в табл. 1. На рис. 1, б при-

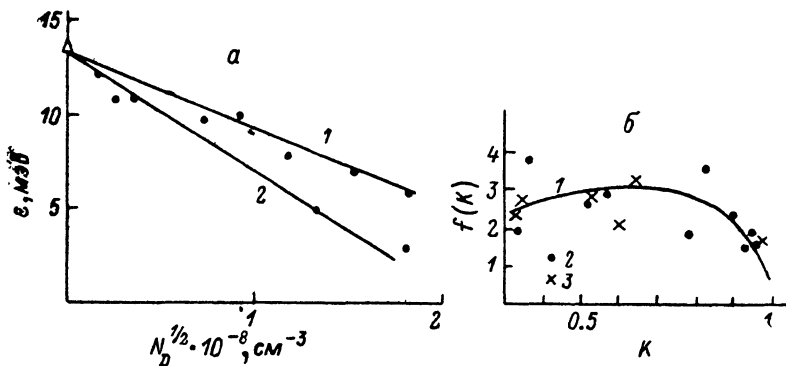


Рис. 2. Влияние общей концентрации доноров (N_D) на ϵ в соответствии с формулой (2) (а) и зависимость $f(K)$ (б).

а) $T=50$ К; K : 1 — 0.95, 2 — 0.8; б) 1 — теория; эксперимент: 2 — для доноров, 3 — для акцепторов.

ведена зависимость $\epsilon(N_A^{1/3})$. Видно, что она приводит к двум значениям ϵ_0 — 14 и 17 мэВ: первое близко к данным оптическим измерений (ϵ_0 для различных доноров меняется от 13.5 до 14.5 мэВ [9]), второе ($\epsilon_0=17$ мэВ) объяснялось наличием более глубокого донора [6]. Наклоны обеих прямых почти в 2 раза больше теоретических значений α в выражении (1), полученных в [3, 4]. Указанные расхождения заставили нас проанализировать эти же эксперименты в рамках теории, развитой в работе [5]. Как можно видеть из выражения (2), в этом случае энергия ионизации ϵ меняется с температурой, т. е. зависимость $n(1/T)$ не является строго экспоненциальной. На рис. 1, а проведена штрихо-

Параметры для образцов CdTe,
легированных акцепторами

№ образца	$N_A \cdot 10^{-16},$ см ⁻³	$N_D \cdot 10^{-16},$ см ⁻³	K	$\epsilon, \text{ мэВ}$	$f(K)$
1	14	9	0.65	52	3.3
2	25	15	0.6	55	2.0
3	34	18	0.53	47	2.8
4	47	15	0.32	47	2.4
5	61	60	0.98	50	1.7
6	100	35	0.35	34	2.6

вая кривая, рассчитанная по (2) с параметрами образца 10 (табл. 1). Видно, что в области больших ϵ теоретическая кривая близка к эксперименту и описывается экспоненциальным законом; когда $kT < \Delta\epsilon$, наблюдается заметное отклонение от экспериментальной кривой, при этом выражение (2) перестает быть справедливым. Далее для всех образцов были построены зависимости $\epsilon(N_D^{1/2})$ (рис. 2, а). Две прямые, проведенные на рисунке, рассчитаны по формуле (2) для $K=0.95$ и 0.8 , $T=50$ К, $\epsilon_0=13.5$ мэВ. Точки для образцов с близкими к указанным значениям K лежат на этих прямых, с промежуточными K — в промежутке между прямыми. На рис. 2, б приведен ход зависимости $f(K)$ в выражении (2) $f(K)=\sqrt{\pi}(K+3)\sqrt{K(1-K)}$ (кривая — теория, точки получены из экспериментальных значений ϵ). Видно, что по крайней мере в области больших K имеется хорошее совпадение теории и эксперимента. Расхождение, наблюдаемое для слабо легированных образцов, где $\epsilon \sim \epsilon_0$, может быть связано с тем, что энергия ионизации остаточных доноров в них отличается от выбранной средней величины 13.5 мэВ.

Анализ зависимости $\epsilon(N)$ был также проведен для кристаллов, легированных акцепторами (фосфор) (для P_{Te} $\epsilon_0 \approx 68$ мэВ). Данные были взяты из работ [8] для образцов, в которых $N_A \leq 10^{18}$ см⁻³ (табл. 2). Измерения зависимости $p(1/T)$ проводились при $100 \div 300$ К, необходимыми параметрами вычислялись по (3) для полупроводника p -типа ($g=1/4$ для простых акцепторов в CdTe). Как можно видеть из рис. 2, для сравнимых значений N_D наблюдаются разные значения ϵ , что трудно объяснить, пользуясь выражением (1). Поэтому были построены зависимости ϵ от $N_A^{1/2}$ и от K . Полученные значения $f(K)$ приведены в табл. 2 и на рис. 2, б при 200 К. Согласие с теоретическим ходом зависимости $f(K)$ можно считать удовлетворительным, несмотря на то что условие $kT > \Delta\epsilon$ в нашем случае выполняется не строго ($kT \geq \Delta\epsilon$).

Таким образом, анализ экспериментальных зависимостей $\epsilon(N, K)$ показал, что ранее имевшиеся несоответствия с теорией, особенно в сильно компенсированных образцах, устраняются с помощью подхода, развитого в работе [5], учитывающего влияние случайного поля на термическую энергию ионизации.

Автор благодарит А. Л. Эфроса за полезное обсуждение работы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Woodbury H. N., Aven M. — Phys. Rev. B, 1974, v. 9, N 12, p. 5195—5202.
- [2] Debye P. P., Conwell E. M. — Phys. Rev., 1954, v. 93, N 2, p. 693—697.
- [3] Monecke J., Siegel W., Ziegler E., Kühnel G. — Phys. St. Sol. (b), 1981, v. 103, N 1, p. 269—279.
- [4] Нгуен Ван Лиен, Шкловский Б. И. — ФТП, 1979, т. 13, в. 9, с. 1763—1769.
- [5] Узаков А. А., Эфрос А. Л. — ФТП, 1987, т. 21, в. 5, с. 922—926.
- [6] Агринская Н. В., Аркадьева Е. Н., Матвеев О. А. — ФТП, 1971, т. 5, в. 5, с. 863—866.
- [7] Segall B., Lorenz M. R., Halsted R. E. — Phys. Rev., 1963, v. 129, N 12, p. 2471—2475.
- [8] Gu J., Kitahara T., Kawakami K. J. — Appl. Phys., 1975, v. 46, N 3, p. 1184—1185; Аркадьева Е. Н., Матвеев О. А., Рудь Ю. В. — ФТТ, 1966, т. 8, в. 10, с. 2821—2822.
- [9] Francou J. M., Seminadyar S., Molva E., Pautrat J. I. — In: 13 Int. Conf. Def. Semicond. Coronado, 1984, p. 1213—1219.