

## ВЛИЯНИЕ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА КОНЦЕНТРАЦИЮ И ПОДВИЖНОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ

В  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$

Лашкул А. В., Цисовски Ян, Арушанов Э. К., Князев А. Ф.

Исследовались барические зависимости концентрации и подвижности электронов в монокристаллах  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$  с  $0 < x \leq 0.33$  в области собственной проводимости. Подтверждена экспериментально инверсная зонная структура арсенида кадмия (наблюдается участок роста подвижности с давлением) и прослежена эволюция зонной структуры данных твердых растворов с составом. Определены барические коэффициенты ширины запрещенной зоны и термического зазора для исследованных монокристаллов ( $\gamma_0 = 52 \pm 2$  мэВ/ГПа;  $\gamma_t = 4 \pm 1$  мэВ/ГПа); расчеты барических зависимостей подвижности электронов учитывали не только изменение плотности состояний, происходящее симметрично относительно точки перекрытия зон, но и изменение формы волновой и диэлектрической функций, несимметричных относительно этой точки, вызывающих под влиянием давления изменение самой ширины запрещенной зоны.

Арсениды кадмия и цинка образуют непрерывный ряд твердых растворов, в которых, по предположению, высказанному в [1], с нарастанием  $x$  должен происходить переход от инвертированной зонной структуры к прямой при  $x > 0.3$  (при низких температурах), однако высокая концентрация свободных электронов ( $n > 10^{18}$  см<sup>-3</sup> при  $0 < x < 0.4$ ) не давала возможности наблюдать этот переход при исследовании как оптических, так и транспортных явлений в данных твердых растворах.

В настоящей работе исследовались монокристаллы  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$  с  $0 < x \leq 0.33$ , характеризовавшиеся относительно низкой концентрацией свободных электронов  $n$  и их высокой подвижностью  $\mu$  [2], а также, как видно из рис. 1 на примерах образцов 1 и 4, обладавшие собственной проводимостью при температуре эксперимента. Первичные параметры образцов приведены в табл. 1.

Таблица 1

Исходные параметры монокристаллов  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$

№ образца	Состав $x$ , ат%	$n$ (77 К) = $N_d - N_a$ , см <sup>-3</sup>	$n_0$ (280 К), см <sup>-3</sup>	$\mu$ (280 К), см <sup>2</sup> /В·с
1	0.09	$8.10 \cdot 10^{16}$	$3.18 \cdot 10^{17}$	28 400
2	0.11	$5.34 \cdot 10^{16}$	$3.03 \cdot 10^{17}$	30 300
3	0.18	$3.00 \cdot 10^{17}$	$4.02 \cdot 10^{17}$	30 000
4	0.33	$1.06 \cdot 10^{17}$	$2.27 \cdot 10^{17}$	17 100

Из представленных на рис. 1 температурных зависимостей концентрации свободных носителей заряда видно, что для образца 1 ( $x=0.09$ ) переход к собственной проводимости происходит примерно при 100 К, а для образца 4 ( $x=0.33$ ) — при 160 К. Концентрация электронов вычислялась как  $1/eR_x$ , где  $R_x$  — постоянная Холла. Подвижность дырок в арсениде кадмия и твердых растворах на его основе значительно ниже подвижности электронов. Для сравнения на том же рисунке показана зависимость  $n(T)$  для наиболее чистого из известных образцов — арсенида кадмия ( $x=0$ ) [3].

Как видно из рис. 2, концентрация электронов падает с давлением во всех исследованных образцах, в то время как закон изменения подвижности с давлением зависит от состава образца: для образца 1 ( $x=0.09$ ) подвижность с давлением растет, для образца 2 ( $x=0.11$ ) проходит через слабый максимум вблизи  $P=1.0$  ГПа, для образца 3 ( $x=0.18$ ) не зависит от давления до 0.5 ГПа, затем начинает слабо падать, для образца 4 падает во всей области давлений.

Такая эволюция барической зависимости подвижности с составом характерна для твердых растворов, в которых имеется переход от инвертированной зонной структуры к прямой, и ранее наблюдалась, например, в  $Hg_{1-x}Zn_xSe$  [4]. Спад концентрации электронов с давлением в материалах этого типа обусловлен увеличением термического зазора  $E_t = E_0$  при прямой структуре и уменьшением массы плотности состояний зоны проводимости — при инвертированной.

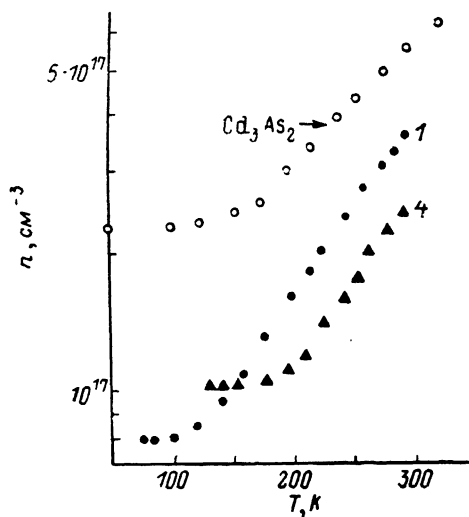


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации электронов в образцах  $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$  (наши данные) и для сравнения в наиболее чистом  $Cd_3As_2$  [8].

1, 4 — номера образцов.

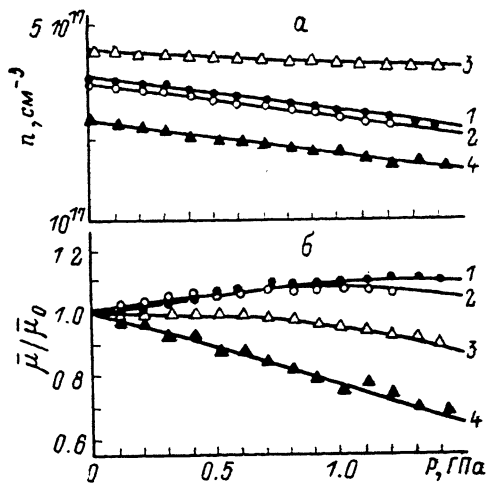


Рис. 2. Барические зависимости концентрации (а) и подвижности (б) электронов в  $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$ .

Точки — эксперимент, сплошные линии — расчет.  $T=280$  К.

Количественный анализ экспериментальных результатов сделан в следующих приближениях.

1. Зона проводимости описывается соотношением Кейна с  $E_0 < 0$  ( $E_0 > 0$ ) для обратной (прямой) структуры.

2. Валентная зона параболична с постоянной эффективной массой дырок  $m_h = 0.5 m_0$  [3]; для  $E_0 < 0$  существует небольшой термический зазор  $E_t$  вследствие тетрагональной симметрии системы (для  $E_0 > 0$   $E_t \approx E_0$ ).

3. Величины  $E_t$  и  $E_0$  линейно меняются с давлением, в то время как остальные параметры приняты не зависящими от давления.

4. Вследствие того что рассеяние электронов при комнатной температуре в твердых растворах на основе арсенида кадмия носит практически упругий характер [5], расчет подвижности проводился в приближении времени релаксации для смешанного механизма рассеяния, включающего в себя рассеяние на заряженных центрах ( $\mu_{oc}$ ), оптических ( $\mu_{opt}$ ) и акустических ( $\mu_{ак}$ ) фононах, как показано в [6].

С помощью уравнения электронейтральности записываем

$$n = p + N_d - N_a \quad (1)$$

$$p = \frac{1}{2\pi^2} \left[ \frac{2k_0 T m_h^*}{\hbar^2} \right]^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp [x + (E + E_t)/k_0 T]} \quad (2)$$

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \langle 1 \rangle, \quad (3)$$

где в общем виде

$$\langle A \rangle = \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) A(E) k^3(E) dE. \quad (4)$$

Усредненная подвижность вычислялась с учетом формул (5)–(10), включающих в себя изменения, внесенные в [7] для рассеяния на ионизированных центрах и оптических фононах и в [6] — для рассеяния на акустике с учетом перехода от обратной структуры к прямой в исследуемых материалах.

Она равна

$$\mu = \frac{\langle \mu \rangle}{\langle 1 \rangle}, \quad (5)$$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{\text{опт}}} + \frac{1}{\mu_{\text{ак}}} + \frac{1}{\mu_{\text{св}}}, \quad (6)$$

$$\mu_{\text{св}} = \frac{\hbar^3 \alpha_s^2}{2\pi e^4 N_{\text{св}}} \frac{k^3}{(m^*)^2} \frac{1}{F_{\text{св}}}, \quad (7)$$

$$\mu_{\text{опт}} = \frac{\hbar^3}{2ek_0 T} \alpha_s \left( 1 + \frac{\alpha_s}{\alpha_L} \right) \frac{1}{(m^*)^2} \frac{1}{F_{\text{опт}}}, \quad (8)$$

$$\mu_{\text{ак}} = \frac{\pi e \hbar^3 V_i^2 D}{k_0 T} \frac{k}{k (m^*)^2 F_{\text{ак}}}, \quad (9)$$

$$F_{\text{ак}} = F_{\text{ак}}^{\parallel} + \frac{V_i^2}{V_z^2} F_{\text{ак}}^{\perp}. \quad (10)$$

Здесь  $m^*$  — эффективная масса электрона;  $D$  — плотность материала;  $F_{\text{опт}}$ ,  $F_{\text{ак}}$ ,  $F_{\text{св}}$ ,  $\alpha_s$ ,  $\alpha_L$ ,  $\alpha_L$  — соответствующие факторы рассеяния и компоненты диэлектрической функции, взятые из [7, 8];  $N_{\text{св}}$  — концентрация заряженных центров;  $V_i$  и  $V_z$  — соответственно продольная и поперечная скорости звука в материале. Скорости звука и плотность материала определялись для каждого  $x$  из линейной экстраполяции между  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  ( $D=6.25$  г/см<sup>3</sup>,  $V_i=3.45$  и  $V_z=2.00 \cdot 10^5$  см/с) и  $\text{Zn}_3\text{As}_2$  ( $D=5.578$  г/см<sup>3</sup>,  $V_i=4.08$  и  $V_z=1.98 \cdot 10^5$  см/с) [9]. Остальные параметры взяты для  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  и считались не зависящими от состава в рассматриваемом интервале  $x$ : матричный элемент  $P_{\text{св}}=7.1 \cdot 10^{-8}$  эВ·см, спин-орбитальное расщепление  $\Delta=0.27$  эВ, статическая  $\epsilon_0$  и высокочастотная  $\epsilon_{\infty}$  диэлектрические проницаемости равны 21 [10] и 14 [11] соответственно, деформационный потенциал  $C$  равен  $-5.9$  эВ с учетом работы [12].

Результаты расчетов барических зависимостей концентраций и подвижностей электронов по формулам (3), (6) соответственно с учетом работ [7, 8] представлены на рис. 2 в виде сплошных линий. При этом величины  $E_0$ ,  $E_i$  и их барические коэффициенты использовались как подгоночные параметры. Остальные зонные параметры и интегральные характеристики материала считались не зависящими от давления.

Таблица 2

Параметры твердых растворов  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$  при нулевом давлении, полученные в результате проведенных расчетов и экспериментов

№ образца	$x$ , ат%	$E$ , мэВ	$E_i$ , мэВ	$\gamma_0 = \frac{dE_0}{dP}$ , мэВ/ГПа	$\gamma_i = \frac{dE_i}{dP}$ , мэВ/ГПа	$N_a$ , $10^{17}$ см <sup>-3</sup>
1	0.09	-135	21	54	5	1.4
2	0.11	-111	15	53	4	1.11
3	0.18	-87	13	51	4	0.1
4	0.33	-1	0	52	52	8.76

Концентрация ионизованных центров  $N_{cc}$  определялась из уравнения

$$N_{cc} = N_a + N_d + p; \quad (11)$$

(11) вместе с выражением (1) дают

$$N_{cc} = N + 2N_a, \quad (12)$$

где  $N_a$  — подгоночный параметр.

Из представленных в табл. 2 результатов видно, что максимум в барической зависимости подвижности в образце 2 соответствует величине зазора  $E_0 \cong \cong -60$  мэВ, а не точке минимальной массы  $E_0 = 0$ ; природа этого заключается в том, что в расчетах  $\mu(P)$  [аналогично зависимости  $\mu(x)$ ] учитывалось не только изменение плотности состояний, происходящее симметрично относительно  $E_0 = 0$ , но и изменение формы волновой и диэлектрической функций, несимметричных относительно  $E_0$ , вызывающих под влиянием давления изменение самого  $E_0$ .

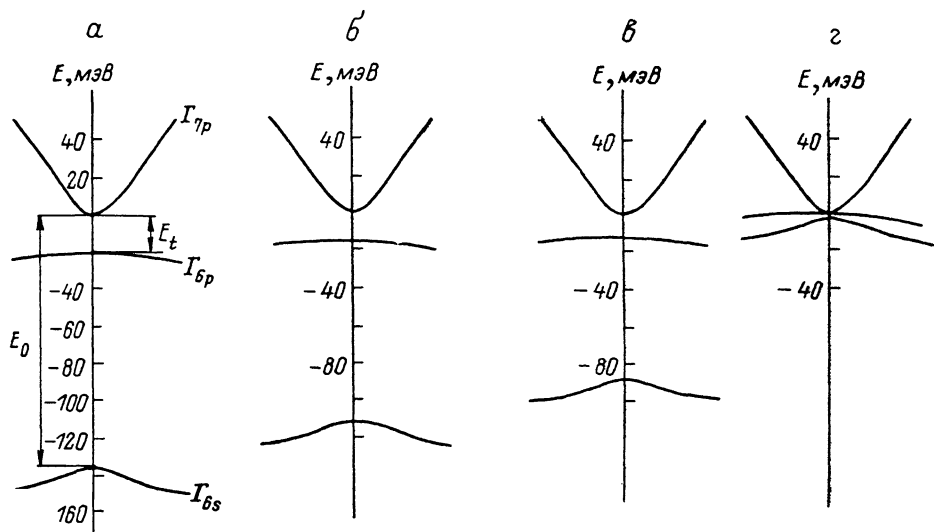


Рис. 3. Схема изменения зонной структуры  $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$  с составом при комнатной температуре.

а:  $x = 0.09$ , б:  $x = 0.11$ , в:  $x = 0.18$ , г:  $x = 0.33$ .

Как видно из рис. 2 и табл. 2, хорошее согласие с экспериментальными барическими зависимостями как подвижности, так и концентрации электронов в  $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$  было достигнуто благодаря предположению, что не только  $E_0$ , но и термический зазор  $E_t$  (хотя и в значительно меньшей степени) зависят от давления. Величина истинной запрещенной зоны в предположении инвертированной структуры была определена из зависимости  $n(T)$  в [3] и есть расстояние между минимумом зоны проводимости типа  $p$  и максимумом валентной зоны того же типа. Барический коэффициент этой зоны  $\gamma_t = dE_t/dP$ , как видно из табл. 2, на порядок величины меньше, чем  $\gamma_0 = dE_0/dP$ . Та же ситуация наблюдается и в материалах IV, III—V и II—VI групп [10, 11], в которых барические коэффициенты спин-орбитального расщепления, определяющиеся также расстоянием между двумя подзонами типа  $p$ , на порядок меньше барических коэффициентов между подзонами  $p$  и  $s$ .

Представленные результаты исследований  $Cd_{3-x}Zn_xAs_2$  под давлением указывают на то, что переход от обратной структуры к прямой при комнатной температуре и нормальном давлении происходит при  $x \approx 0.3$ ; это говорит о нелинейном изменении ширины запрещенной зоны с составом (рис. 3).

Похожий эффект наблюдался и в других твердых растворах  $II_3-V_2$  [13, 14], а также в  $Hg_{1-x}Zn_xSe$  [4]. Природа этого явления до конца не ясна [13] и требует дальнейших исследований.

Величина барьерного коэффициента ширины запрещенной зоны  $\gamma_0$   $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$ , определенная в наших экспериментах для  $x \leq 0.33$ , очень близка к значению, полученному для  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  (53 мэВ/ГПа) [15], а также для  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$  при  $1.2 \leq x \leq 2$  (54—58 мэВ/ГПа) [16]. Учитывая все эксперименты по всестороннему сжатию  $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$ , можно сделать вывод: величина  $\gamma_0$  лежит в пределах  $(54 \pm 4)$  мэВ/ГПа для всех значений  $x$ .

#### Список литературы

- [1] Wagner L. M., Palik E. D., Swiggard E. M. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1971. V. 32 (Suppl. 1). N 2. P. 474—480.
- [2] Арушанов Э. К., Князев А. Ф., Натенров А. Н., Радауцан С. И. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 7. С. 1202—1204.
- [3] Blom F. A., Gelten M. J. // *Proc. III Conf. Narrow-Gap Semicond.* Warsaw, 1978. P. 257. *Phys. Rev. B.* 1979. V. 19. P. 2411.
- [4] Gavaleshko N. P., Dombrowski W., Baj M., Dmowski L., Dietle T., Khomyak V. V. // *Proc. III Conf. Narrow-Gap Semicond.* Warsaw, 1978. P. 331.
- [5] Blom F. A. P., Yung K. Y., Gelten M. J. // *Proc. XIII Int. Conf. Phys. Semicond.* Rome, 1976. P. 479.
- [6] Zawadzki W. *Handbook on Semiconductors* / Ed. by W. Paul. Amsterdam, 1982. P. 713.
- [7] Szymanska W., Dietl T. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1978. V. 39. N 3. P. 1025—1037.
- [8] Iwanowski R. J., Dietl T., Szymanska W. // *J. Phys. Chem. Sol.* 1978. V. 39. N 3. P. 1059—1072.
- [9] Демиденко А. Ф., Даниленко Г. Н., Даниленко В. Е., Лазарев В. Б., Шевченко В. Я., Маренкин С. Ф., Козлов С. Е. // *Изв. АН СССР. Неорг. матер.* 1977. Т. 13. В. 2. С. 214—216.
- [10] Melz P. J., Ortenburger I. B. // *Phys. Rev. B.* 1971. V. 3. N 7. P. 3257—3266.
- [11] Cerdeira F., de Witt J. S., Rossler U., Cardona M. // *Phys. St. Sol.* 1970. V. 41. N 2. P. 735—745.
- [12] Wiley J. D. // *Sol. St. Commun.* 1970. V. 8. N 5. P. 1865—1876.
- [13] Pawlikowski J. M. // *J. Phys. C.* 1985. V. 18. N 11. P. 5606—5614.
- [14] Denisser C. J., Nishihara Y., van Gool J. C., de Jonger W. L. // *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. N 12. P. 7637—7651.
- [15] Cisowski J., Arushanov E. K., Bodnar J., Kloc K., Zdanowicz W. // *Proc. XIV Int. Conf. Phys. Semicond.* Edinburgh, 1978. P. 253—255.
- [16] Cisowski J., Zdanowicz W. // *Phys. St. Sol. (a).* 1977. V. 41. N 8. P. K59—K62.

Институт прикладной физики АН МССР  
Кишинев  
Отдел физики твердого тела ПАН  
Забже, Польша

Получена 14.10.1988  
Принята к печати 3.04.1989