

О механизмах рассеяния дырок в кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при низких температурах

© В.В. Богобаящий

Кременчугский государственный политехнический университет,
39614 Кременчуг, Украина

(Получена 19 февраля 2002 г. Принята к печати 28 марта 2002 г.)

Исследовано удельное сопротивление и эффект Холла в легированных медью кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ в интервале температур 4.2–100 К и концентраций Cu от $1.5 \cdot 10^{15}$ до $1.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Показано, что для корректного определения холловской подвижности дырок при низких температурах необходимо исключить вклад прыжкового переноса заряда. Найдено, что при 77 К тяжелые дырки рассеиваются друг на друге, на ионах примеси, флуктуациях состава и колебаниях решетки. При низких температурах в компенсированных кристаллах дырки рассеиваются исключительно на ионах примеси. В некомпенсированных кристаллах при расчете подвижности необходимо учитывать рассеяние дырок на положительно заряженных центрах, образованных в результате захвата избыточных дырок акцепторами.

Подвижность μ_h свободных дырок в кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при низких температурах, по мнению многих исследователей, существенно меньше, чем ожидается для рассеяния на ионах примеси [1–3]. Этому явлению дают разные объяснения, но ни одно из них нельзя признать достаточным. Например, в [1] малые подвижности дырок объясняют рассеянием на упругих полях нейтральных дефектов, а в [2] — рассеянием на флуктуациях состава. С другой стороны, при $T < 15 \text{ К}$ величина μ_h пропорциональна $T^{3/2}$, что соответствует рассеянию именно на заряженных центрах и противоречит предложенным в [1,2] механизмам. Авторы работы [3] считают, что при низких температурах дырки, которые участвуют в переносе заряда, пребывают в хвосте плотности состояний валентной зоны, поэтому их динамические свойства вообще нельзя охарактеризовать зонной эффективной массой. Кроме того, как считают в [3], энергия взаимодействия дырок и центров рассеяния не мала по сравнению с их кинетической энергией, поэтому классические представления о подвижности здесь неприменимы. Открытым также является вопрос об угловой зависимости интенсивности перекрытия $I_\alpha(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \int d^3r \cdot u_{\alpha\mathbf{k}'}^* u_{\alpha\mathbf{k}}$, где $u_{\alpha\mathbf{k}}$ — периодическая часть волновой функции Блоха для α -й ветви спектра, а интегрирование ведется по объему элементарной ячейки. С одной стороны, принято считать, что для дырок $I_h^2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (1 + 3 \cos^2 \theta_{\mathbf{k}})/4$, где $\theta_{\mathbf{k}}$ — угол между векторами \mathbf{k} и \mathbf{k}' (см. [3,4]). С другой стороны, в модели Кейна $u_{hh\mathbf{k}} = u_{hh0}$, поэтому $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 1$.

По этим причинам здесь были исследованы концентрационная и температурная зависимости подвижности свободных дырок в легированных медью некомпенсированных или компенсированных индием кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при температурах $T < 100 \text{ К}$ в условиях слабого и умеренного легирования.

1. Эксперимент

Для проведения эксперимента были взяты монокристаллические пластины $n\text{-Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x = 0.21 \dots 0.22$) толщиной $d \approx 0.1 \text{ см}$, полученные в условиях серийного производства методом вертикальной направленной кристаллизации с подпиткой из твердой фазы и последующего отжига в насыщенных парах Hg. Плотность дислокаций в пластинах была менее $3 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$.

Основная часть исходных слитков была получена из компонентов класса чистоты 6N и 7N и содержала только остаточные примеси. В отожженных пластинах такого типа концентрация примесных электронов при низких температурах не превышала $3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Несколько кристаллов были легированы индием из расплава и содержали от 10^{15} до $1.6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ избыточных доноров. Концентрацию индия N_{In} в таких образцах отождествляли с концентрацией примесных электронов при $T = 77 \text{ К}$, определенной по значению коэффициента Холла R_H в магнитном поле $B = 1 \text{ Т}$.

Образцы p -типа были получены из исходных пластин путем диффузионного легирования медью. Пленка меди заданной толщины наносилась на поверхность пластины методом резистивного распыления в вакууме. Количество распыленной меди и расстояние от источника до образца выбирались так, чтобы после растворения пленки обеспечить требуемую концентрацию N_{Cu} активной меди. Диффузия Cu производилась в ходе изотермического отжига пластин в атмосфере насыщенных паров Hg. Продолжительность отжига t выбиралась из условия $\sqrt{D_{\text{Cu}} t} > 5d$, где D_{Cu} — коэффициент диффузии меди (использовались значения D_{Cu} в $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, найденные в [5]). В этом случае медь распределялась в кристаллах достаточно равномерно.

При относительно слабом легировании, когда $N_{\text{Cu}} < 7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, диффузия Cu производилась при 473 К в течение 72 ч. Согласно [6], в этом случае раствор Cu вполне стабилен при $T \approx 300 \text{ К}$. Более концентрированный раствор Cu в стехиометричных кристаллах неустойчив и подвержен быстрому распаду, поэтому сильно легированные образцы отжигались при более высоких температурах (670–680 К). При этом в них вводилось около 10^{16} см^{-3} вакансий Hg, что стабилизировало раствор Cu вследствие снижения скорости миграции Cu [7]. С другой стороны, количество вакансий в таких образцах было малым по сравнению с количеством меди, и они не оказывали влияния на подвижность дырок.

В результате была получена серия однородно легированных кристаллов $p\text{-Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$, содержащих от $1.5 \cdot 10^{15}$ до $1.7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ растворенных активных атомов Cu. Количество активных атомов Cu в некомпенсированных кристаллах отождествлялось с количеством свободных дырок p при 77 К, поскольку такие дефекты в данных условиях ионизированы полностью, а неконтролируемые доноры и акцепторы в исследуемом материале компенсировали друг друга. Концентрация Cu в компенсированных In образцах p -типа определялась исходя из условия электронейтральности в виде $N_{\text{Cu}} = p + N_{\text{In}}$.

Несколько некомпенсированных образцов, содержащих $3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ активной меди, были дополнительно отожжены при разных температурах и давлениях паров Hg с таким расчетом, чтобы концентрация равновесных собственных акцепторов (вакансий ртути V_{Hg}) в них была около $1.8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Подробное описание режимов отжига, способов определения концентрации V_{Hg} и температурные зависимости проводимости и эффекта Холла в этих образцах приведены в работе [8].

Подвижность и концентрация электронов и дырок определялись 6-контактным методом Холла. Для этого из пластин вырезались образцы в форме прямоугольного параллелепипеда размером около $1.2 \times 0.3 \times 0.1 \text{ см}^3$ и измерялись их удельная электропроводность σ и коэффициент Холла R_H . Измерения производились либо при фиксированной температуре 77 К в магнитном поле B от 0.5 до 2 Тл, либо в диапазоне температур от 4.2 до 125 К в фиксированном поле $B = 0.030 \text{ Тл}$.

Для вычисления концентрации p и подвижности μ_h тяжелых дырок при 77 К в образцах p -типа использовались значения R_H в области сильных по отношению к легким дыркам магнитных полей. С этой целью зависимость $R_H(B)$, полученная в диапазоне B от 0.5 до 2 Тл, экстраполировалась в область $B > 3 \text{ Тл}$. Согласно [9], в таких полях присутствие легких дырок уже не сказывается на величине R_H . Для корректной экстраполяции зависимость $R_H(B)$ представлялась в виде полинома по степеням B^{-2} ; соответствующие примеры приведены в работе [9]. Считалось, что холл-фактор тяжелых дырок $r_H^{(hh)} \approx 1.02$ [9].

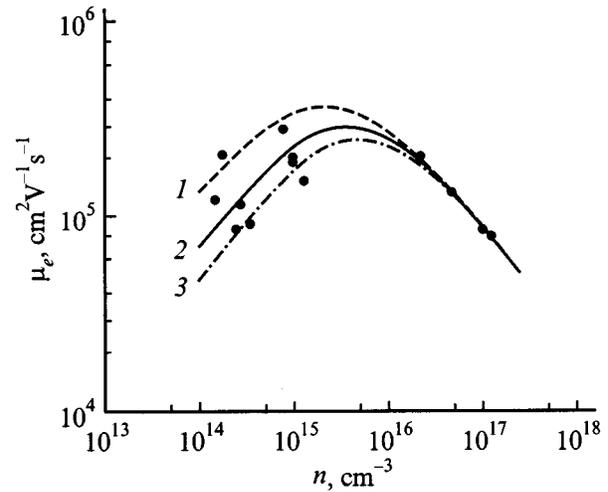


Рис. 1. Подвижность электронов при 4.2 К в кристаллах $n\text{-Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te:In}$. Точки — данные измерений, линии — результаты расчета. 1 — $N_A = 0.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, 2 — $N_A = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, 3 — $N_A = 1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

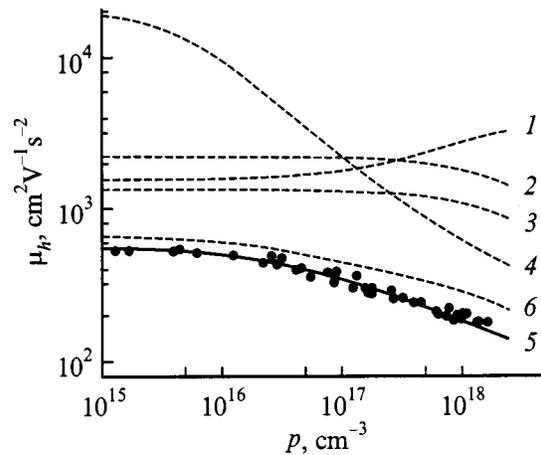


Рис. 2. Подвижность тяжелых дырок при 77 К в кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te:Cu}$. Точки — данные измерений, линии — результаты расчета при $I_h = 1$ (1–5) и $I_h = 1 - (3/4) \sin^2 \theta_k$ (6). 1 — подвижность, ограниченная рассеянием на полярных оптических фононах; 2 — подвижность, ограниченная рассеянием на флуктуациях состава; 3 — подвижность, ограниченная рассеянием на акустических фононах; 4 — подвижность, ограниченная рассеянием на заряженных центрах; 5, 6 — суммарная подвижность.

Результаты измерений концентрационной зависимости подвижности электронов при 4.2 К в кристаллах n -типа и подвижности тяжелых дырок при 77 К в некомпенсированных кристаллах p -типа представлены на рис. 1 и 2.

Температурная зависимость σ и R_H нескольких образцов p -типа изучалась при помощи установки, описанной в работе [10]. Температура образца определялась по показаниям калиброванного термометра сопротивления с точностью до нескольких десятых долей процента. Для уменьшения степени окисления поверхности на

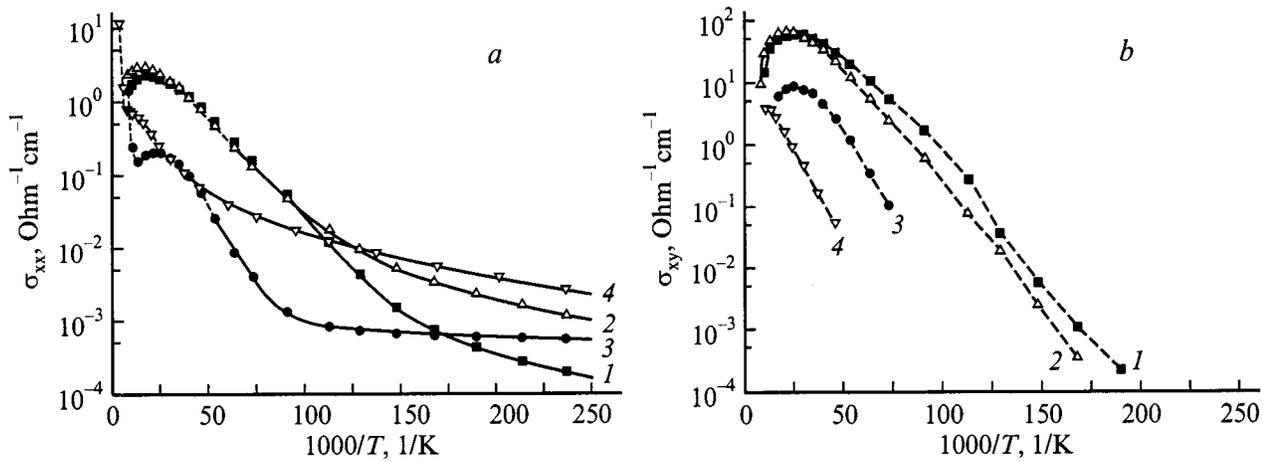


Рис. 3. Температурная зависимость диагонального (а) и недиагонального (б) компонентов тензора электропроводности кристаллов $p\text{-Hg}_{0.78}\text{Cd}_{0.22}\text{Te}:\text{Cu}$ (точки — данные измерений, сплошные линии — результаты подгонки, штриховые линии — результаты интерполяции). 1 — $N_{\text{Cu}} = 3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{In}} < 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] < 10^{14} \text{ см}^{-3}$; 2 — $N_{\text{Cu}} = 3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{In}} < 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] = 1.8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 3 — $N_{\text{Cu}} = 1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{In}} < 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] < 10^{14} \text{ см}^{-3}$; 4 — $N_{\text{Cu}} = 1.14 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_{\text{In}} = 9.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] < 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

только что протравленные, отмытые в теплой деионизированной воде и высушенные образцы напаявали контакты в атмосфере охлажденного азота. Сразу после этого их помещали в наполненный гелием измерительный криостат для проведения измерений σ и R_H . При такой подготовке кристаллы не успевают заметно окислиться, и влияние поверхностных электронов не наблюдается. Применялись индиевые контакты, которые, согласно [11], вполне можно считать омичными.

По данным измерений R_H и σ вычислялись компоненты σ_{xx} и σ_{xy} тензора электропроводности; такая форма представления результатов более удобна в случае смешанной проводимости. Так как магнитное поле было предельно слабым, полагалось, что $\sigma_{xx} = \sigma$ и $\sigma_{xy} = BR_H\sigma^2$.

Типичные результаты, полученные для разных видов исследованных образцов $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}:\text{Cu}$, показаны на рис. 3. Видно, что при относительно высоких температурах, выше 10–15 К, в слабо компенсированных образцах и выше 20–30 К в сильно компенсированном кристалле доминирует ϵ_1 -проводимость, обусловленная дырками валентной зоны. При более низких температурах во всех случаях наблюдается значительная прыжковая проводимость по акцепторной зоне. Величина и тип прыжковой проводимости зависят от присутствия вакансий ртути и компенсирующих доноров. В частности, в слабо компенсированных кристаллах (рис. 3, а, кривая 1) наблюдается прыжковая проводимость с не зависящей от T энергией активации (ϵ_3 -проводимость):

$$\sigma_3 = \sigma_{30} \exp[-\epsilon_3/k_B T]. \quad (1)$$

В компенсированных образцах (кривые 3, 4), а также в присутствии вакансий Hg (кривая 2) наблюдается прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка

(проводимость Мотта [12]):

$$\sigma_M = \sigma_{M0} \exp[-(T_0/T)^{1/4}]. \quad (2)$$

Знак эффекта Холла в области ϵ_1 -проводимости ниже точки инверсии, вызванной вымораживанием собственных электронов, положительный, а температурная зависимость недиагонального компонента σ_{xy} тензора проводимости, в отличие $\sigma_{xx}(T)$, ниже 20–30 К описывается активационным законом с одной определенной энергией активации. Такое поведение σ_{xy} свидетельствует о том, что в исследованном диапазоне температур этот компонент определяется исключительно свободными дырками. Это вполне согласуется с теорией прыжкового эффекта Холла [13,14], согласно которой локализованные дырки не способны создавать заметную эдс Холла. По этой же причине в области чисто прыжковой проводимости эффект Холла зарегистрировать не удалось.

Поскольку при низких температурах эдс Холла в кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ создается легкими и тяжелыми дырками валентной зоны, а проводимость — носителями заряда, локализованными на акцепторах, для корректного определения подвижности тяжелых дырок μ_h необходимо исключить вклады других носителей заряда в σ_{xx} и σ_{xy} .

Влияние прыжкового механизма исключалось сравнительно просто. Учитывая аддитивность компонентов тензора электропроводности, принималось, что $\sigma_{xx} = \sigma_1 + \sigma_3$ или $\sigma_{xx} = \sigma_1 + \sigma_M$ в зависимости от того, преобладает прыжковая проводимость типа (1) или типа (2); здесь σ_1 — проводимость, обусловленная свободными дырками. Затем осуществлялась взаимная экстраполяция высокотемпературного и низкотемпературного участков зависимости $\sigma_{xx}(T)$ и подгонка параметров соответствующих активационных законов; считалось, что

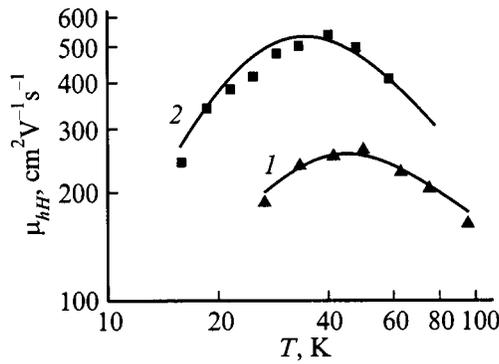


Рис. 4. Температурная зависимость подвижности тяжелых дырок в легированных медью и компенсированных индием кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ (точки — данные измерений, линии — результаты расчета). 1 — $N_A = 1.14 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 9.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 2 — $N_A = 2.6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 2.2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

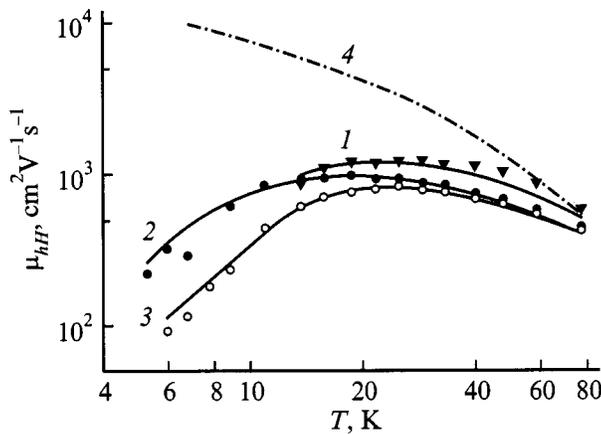


Рис. 5. Температурная зависимость подвижности тяжелых дырок в не компенсированных кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}:\text{Cu}$ (точки — данные измерений, линии — результаты расчета). 1 — $N_{\text{Cu}} = 1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] < 10^{14} \text{ см}^{-3}$; 2 — $N_{\text{Cu}} = 3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] < 10^{14} \text{ см}^{-3}$; 3 — $N_{\text{Cu}} = 3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, $N_D = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $[V_{\text{Hg}}] = 1.8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 4 — $N_A = N_D = 0$.

в области смешанной проводимости зависимость $\sigma_1(T)$ имеет активационный характер с постоянной энергией активации. Результаты подгонки приведены на рис. 3, *a* (сплошные линии). Видно, что данный способ подгонки является вполне приемлемым. В частности, подгонки ниже 7–10 К ε_1 -проводимость пренебрежимо мала, параметры прыжковой проводимости определялись этим способом достаточно надежно. Слагаемое σ_1 в этом случае можно было успешно выделить, вычитая из полной проводимости σ_{xx} прыжковый компонент. Вклад прыжкового переноса заряда в компонент σ_{xy} , как указывалось выше, был пренебрежимо малым.

Влияние легких дырок учитывалось следующим образом. Хорошо известно, что присутствие подвижных легких дырок вызывает дополнительную полевую

зависимость коэффициента Холла кристаллов $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$. В частности, при 77 К отношение $R_H(B)/R_H(\infty)$ убывает от 1.35 ± 0.05 до 1 при увеличении поля B от 0 до 3 Тл [9]. Поскольку эффективная масса легких дырок ниже 77 К изменяется мало, а время релаксации легких дырок практически не зависит от их массы из-за того, что в результате рассеяния они превращаются в тяжелые дырки [15], предполагалось, что вклад легких дырок в эффект Холла при $T < 77$ К не зависит от T . Тогда, используя определение величин σ_{xx} и σ_{xy} и пренебрегая вкладом легких дырок в величину σ_1 , найдем, что холловская подвижность и концентрация тяжелых дырок равны

$$\mu_{hh} \equiv r_H^{(hh)} \mu_h = \frac{\sigma_{xy}}{1.35B\sigma_1}, \quad P = \frac{1.35r_H^{(hh)}\sigma_1^2}{eR_H\sigma_{xx}}. \quad (3)$$

Отметим, что влияние прыжкового механизма проводимости приводит к существенному снижению эффективной холловской подвижности $R_H\sigma$. Так, при самых низких температурах в исследованном диапазоне подвижность, найденная по формуле (3), превышает величину $R_H\sigma$ более чем на порядок. Вероятно, именно в этом состоит главная причина малой подвижности дырок, найденной в работах [1–3], где влияние прыжковой проводимости не учитывалось.

Итоговые результаты измерений μ_{hh} представлены на рис. 4 и 5. Видно, что в компенсированных кристаллах низкотемпературная подвижность дырок сравнительно мала и убывает с ростом легирования, тогда как в слабо компенсированных кристаллах при $T < 20$ К она практически не зависит от количества меди. Стоит подчеркнуть, что в присутствии вакансий Hg дырки рассеиваются в таких кристаллах заметно сильнее, несмотря на то что в легированных медью кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ собственные акцепторы не влияют на концентрацию свободных дырок ниже 30 К (см. кривые 1, 2 на рис. 3, *a*).

2. Модель

Подвижность свободных дырок вычислялась путем численного интегрирования в рамках длинноволнового приближения общей теории рассеяния (см., например, [4,16]). Расчетные формулы записывались для случая произвольного изотропного закона дисперсии, поскольку непараболичность зоны тяжелых дырок вполне ощутима даже при малых энергиях [9]. Степень вырождения электронов и дырок полагалась произвольной.

Рассматривались два приближения для интеграла перекрытия $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k})$. В одном случае считалось, что $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 1$, а в другом — что, согласно [4],

$$|I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 = \frac{1 + 3 \cos^2 \theta_k}{4} \equiv 1 - \frac{3}{4} \sin^2 \theta_k. \quad (4)$$

Учитывалось рассеяние дырок на поляризационных оптических колебаниях (*pol*), акустических фононах (*ac*), заряженных центрах (*I*) и флуктуациях состава (*fl*), а также друг на друге. Влияние других видов

рассеяния, как показывают оценки, мало. Матричные элементы гамильтониана взаимодействия для первых трех механизмов записывались в соответствии с [4,17]:

$$\left| \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_{pol} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_{LO}}{V \varepsilon_p} \frac{q^2 (n_q + 1/2 \mp 1/2)}{(q^2 + r_0^{-2})^2} \times |I_h(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2, \quad (5)$$

$$\left| \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_{ac} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{\Xi_\Gamma^2 k_B T}{2VC_{11}} |I_h(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2, \quad (6)$$

$$\left| \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_I | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{16\pi^2 e^4 N_I}{V \varepsilon_S^2} \frac{1}{(q^2 + r_0^{-2})^2} |I_h(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2. \quad (7)$$

Здесь r_0 — радиус экранирования, n_q — функция распределения для LO -фононов, $\varepsilon_p = \varepsilon_S \varepsilon_\infty / (\varepsilon_S - \varepsilon_\infty)$, где ε_S и ε_∞ — соответственно статическая и высокочастотная диэлектрическая проницаемость; $N_I = \sum Z_\nu^2 N_\nu$ (Z_ν и N_ν — соответственно кратность заряда и концентрация заряженных центров ν -го вида), Ξ_Γ — потенциал деформации, C_{ik} — тензор модулей упругости.

Вклад рассеяния на флуктуациях состава рассчитывался в рамках теории, разработанной в [18]; в случае идеального раствора и произвольного x

$$\left| \langle \mathbf{k} \pm \mathbf{q} | H_{fl} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{x(1-x)}{N_0 V} \left(\frac{\partial E_V}{\partial x} \right)^2 |I_h(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}, \mathbf{k})|^2, \quad (8)$$

где N_0 — концентрация атомов в подрешетке металла.

Рассеяние на акустических фононах, заряженных центрах, флуктуациях состава и поляризационных колебаниях учитывалось в приближении времени релаксации. В последнем случае оно вполне приемлемо при $T < 80$ К, поскольку здесь $\exp(-\hbar\omega_{LO}/k_B T) < 0.1$, где ω_{LO} — частота длинноволновых LO -фононов. Соответствующие формулы для обратного времени релаксации в случае произвольного изотропного закона дисперсии принимают такой вид:

$$\frac{1}{\tau_{fl}(\varepsilon)} = \frac{\pi x(1-x)}{\hbar N_0} \left(\frac{\partial E_V}{\partial x} \right)^2 N_{hh}(\varepsilon) L_{fl}, \quad (9)$$

$$\frac{1}{\tau_{ac}(\varepsilon)} = \frac{\pi \Xi_\Gamma^2 k_B T}{\hbar C_{11}} N_{hh}(\varepsilon) L_{ac}, \quad (10)$$

$$\frac{1}{\tau_{pol}(\varepsilon)} = \frac{\pi^2 e^2 \omega_{LO}}{\varepsilon_p} N_{hh}(\varepsilon + \hbar\omega_{LO}) L_{pol} \exp(-\hbar\omega_{LO}/k_B T) \times \left\{ 1 + [\exp(\hbar\omega_{LO}/k_B T) - 1] f_0(\varepsilon + \hbar\omega_{LO}) \right\}, \quad (11)$$

$$\frac{1}{\tau_I(\varepsilon)} = \frac{2\pi^3 \hbar^3 Z^2 N_I e^4 N_{hh}(\varepsilon)}{\varepsilon_S^2 p_{hh}^4(\varepsilon)} L_I. \quad (12)$$

Здесь L_{fl} , L_{ac} , L_{pol} и L_I — множители, вид которых зависит от вида интеграла перекрытия $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k})$; $f_0(\varepsilon)$ — равновесная функция распределения дырок.

Если $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 1$, то для рассеяния на акустических фононах, полярных оптических фононах и заряженных центрах соответственно получаем:

$$L_{fl} = L_{ac} = 1, \quad (13)$$

$$L_{pol} = \frac{1}{2kk'} \ln \frac{z_k + 2kk'}{z_k - 2kk'} - \frac{2r_0^{-2}}{z_k^2 - 4k^2 k'^2}, \quad (14)$$

$$L_I = \ln(1+b) - b/(1+b), \quad (15)$$

где $z_k = k^2 + k'^2 + r_0^{-2}$; $k = p_{hh}(\varepsilon)/\hbar$; $k' = p_{hh}(\varepsilon + \hbar\omega_{LO})/\hbar$; $b = 4r_0^2 k^2$.

Если положить $I_h^2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (1 + 3 \cos^2 \theta_k)/4$, то

$$L_{fl} = L_{ac} = 1/2, \quad (16)$$

$$L_{pol} = \frac{1}{8kk'} \left[1 + \frac{3z_k}{4k^2 k'^2} (z_k + 2r_0^{-2}) \right] \ln \frac{z_k + 2kk'}{z_k - 2kk'} - \frac{3}{8k^2 k'^2} - \frac{1}{2r_0^2} \cdot \frac{1 + 3z_k/(2kk')^2}{z_k^2 - 4k^2 k'^2}, \quad (17)$$

$$L_I = \left(1 + \frac{3}{b} \right)^2 \ln(1+b) - \frac{5b^2 + 21b + 18}{2b(1+b)}. \quad (18)$$

Рассеяние дырок друг на друге, которое нельзя описать в терминах времени релаксации [15,16], учитывалось при помощи вариационного метода, изложенного в монографии [16]. Согласно [16], в случае одновременно действия перечисленных выше механизмов рассеяния средняя дрейфовая подвижность невырожденных дырок во 2-м порядке приближения равна

$$\mu_h \approx \frac{3\pi}{32} \mu_0 \left\{ 1 + \frac{[\mu_0/\mu_1 - 5/2]^2}{\sqrt{2} p \mu_0 / (N_I \mu_I) + 2\mu_0/\mu_2 - (\mu_0/\mu_1)^2} \right\}, \quad (19)$$

где

$$\frac{1}{\mu_0} = \frac{1}{\mu_I} + \frac{1}{3\mu_{fl}} + \frac{1}{3\mu_{ac}} + \frac{3\pi}{32\mu_{pol}},$$

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{\mu_I} + \frac{1}{\mu_{fl}} + \frac{1}{\mu_{ac}} + \frac{15\pi}{64\mu_{pol}},$$

$$\frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{\mu_I} + \frac{2}{\mu_{fl}} + \frac{2}{\mu_{ac}} + \frac{105\pi}{128\mu_{pol}}.$$

Здесь μ_β — парциальная подвижность тяжелых дырок (индекс β принимает значения I , ac , pol или fl):

$$\mu_\beta = \frac{\int_0^\infty d\varepsilon \cdot p_{hh}^3(\varepsilon) f'_0(\varepsilon) \tau_\beta(\varepsilon) / m_{hh}(\varepsilon)}{\int_0^\infty d\varepsilon \cdot p_{hh}^3(\varepsilon) f'_0(\varepsilon)}, \quad (20)$$

где $p_{hh}(\varepsilon)$ — обратный закон дисперсии тяжелых дырок, $m_{hh}(\varepsilon) = 0.5\delta p_{hh}^2/\delta\varepsilon$ — эффективная масса.

Холл-фактор тяжелых дырок в отсутствие рассеяния их друг на друге вычислялся по формуле

$$r_H^{(hh)} = \frac{\int_0^\infty d\varepsilon \cdot p_{hh}^3(\varepsilon) f_0'(\varepsilon) [\tau(\varepsilon)/m_{hh}(\varepsilon)]^2}{\left[\int_0^\infty d\varepsilon \cdot p_{hh}^3(\varepsilon) f_0'(\varepsilon) \tau(\varepsilon)/m_{hh}(\varepsilon) \right]^2} \times \int_0^\infty d\varepsilon \cdot p_{hh}^3(\varepsilon) f_0'(\varepsilon), \quad (21)$$

которую легко получить, обобщая известное определение [19] на случай непараболического закона дисперсии. Здесь $\tau = 1/\sum \tau_\beta^{-1}$.

3. Результаты расчета и дискуссия

Результаты расчета подвижности электронов μ_e при 4.2 К в кристаллах n -типа, выполненного для случая рассеяния на ионах примеси, показаны на рис. 1. Расчет производился по формулам (12), (15) и (20), в которых закон дисперсии и плотность состояний тяжелых дырок заменены соответствующими характеристиками зоны проводимости, взятыми из работы [9]. Предполагалось, что $I_e(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 1$. В соответствии с [15,16] рассеяние электронов друг на друге не учитывалось, поскольку они в этих условиях были вырожденными.

Видно, что в области высоких концентраций электронов данные измерений и расчета совпадают. В области $n < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ наблюдается заметная дисперсия подвижности из-за дисперсии примесного состава образцов. Тем не менее все экспериментальные точки лежат между кривыми, рассчитанными для $N_A = 5 \cdot 10^{14}$ и $1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, т.е. исследованные здесь кристаллы содержали в среднем около $(1 \pm 0.5) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ неконтролируемых доноров.

Результаты расчета подвижности дырок при 77 К, выполненного для случая $I_h(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = 1$, показаны на рис. 2 (кривые 1–5). Расчет производился без какой-либо подгонки; численные значения параметров модели брались из независимых источников. В частности, принималось, что $\varepsilon_S = 20.5 - 15.6x + 5.7x^2$ и $\varepsilon_\infty = 15.2 - 15.6x + 8.2x^2$ [20], $|\partial E_V/\partial x| = 0.35 \text{ эВ}$ [21], $C_{11} = 5.35 \cdot 10^{11} \text{ эрг/см}^3$ [22]. Для акустического потенциала Ξ_Γ использовалось значение, найденное автором по данным исследования спектров поглощения на свободных дырках (см. [11]). С учетом поправки на рассеяние дырок на флуктуациях состава $\Xi_\Gamma = 10.5 \text{ эВ}$. Считалось, что концентрация неконтролируемых доноров $N_D = 1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а $Z = 1$ для всех заряженных центров. Плоскость состояний и закон дисперсии в зоне тяжелых дырок $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ брались в виде, найденном недавно в работе [23] по результатам прецизионных измерений концентрации собственных электронов в за-

висимости от температуры:

$$N_{hh}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2m_{hh}^3(0)}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon(1 + \varepsilon/\varepsilon_0)} (1 + 2\varepsilon/\varepsilon_0), \quad (22)$$

$$p_{hh}(\varepsilon) = \sqrt{2m_{hh}(0) \varepsilon(1 + \varepsilon/\varepsilon_0)}, \quad (23)$$

где $m_{hh}(0) = 0.39m_0$, $\varepsilon_0 = 0.096 \text{ эВ}$.

Как следует из рис. 2, в этом приближении результаты расчета практически совпадают с усредненными данными измерений. Напротив, если считать, что $I_h^2(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = (1 + 3 \cos^2 \theta_k)/4$ [3,4], то расхождение между ними оказывается довольно значительным (см. рис. 2, кривая б).

Полученный здесь результат несколько отличается от выводов работы [24], где также изучалась подвижность дырок при 77 К в легированных медью кристаллах $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, однако рассеяние их друг на друге не было зафиксировано. Это расхождение объясняется тем, что в [24] исследовались вырожденные кристаллы с $p > 10^{18} \text{ см}^{-3}$, где такое рассеяние проявляться не должно [15].

Отметим, что значения $r_H^{(hh)}$, вычисленные по формуле (21) для умеренно легированных кристаллов $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, изменяются в узких пределах от 1.03 до 1.1. Это неплохо согласуется с экспериментальными данными [9], согласно которым $r_H^{(hh)} \approx 1.02$, и объясняется тем, что в области $\varepsilon \approx k_B T$ время релаксации импульса дырок почти не зависит от их энергии из-за одновременного действия пяти различных равносильных механизмов рассеяния.

Результаты расчета холловской подвижности $\mu_{hH} = r_H^{(hh)} \mu_h$ тяжелых дырок в диапазоне температур 15–100 К, выполненного для легированных медью и компенсированных индием кристаллов $p\text{-Hg}_{0.79}\text{Cd}_{0.21}\text{Te}$ при помощи соотношений (4)–(14), (19)–(23), представлены на рис. 4. Здесь концентрация легирующих примесей была достаточно большой, а уровень Ферми располагался над уровнем изолированного акцептора. По этим причинам условие электронейтральности можно было записать в виде $p = N_{\text{Cu}}^- - N_{\text{In}}$, из которого следует, что $N_I = p + 2N_{\text{In}}$. Видно (см. рис. 4), что в таких кристаллах расчетная подвижность дырок совпадает с результатами измерений во всем исследованном диапазоне температур. Отметим, что, поскольку в сильно компенсированных кристаллах рассеяние дырок друг на друге слабое [16], в этом случае холл-фактор рассчитывается по формуле (21) вполне корректно.

В слабо компенсированных кристаллах при низких температурах уровень Ферми расположен приблизительно посередине между валентной зоной и уровнем изолированного акцептора. В этих условиях необходимо учитывать способность акцепторов присоединять дырку и образовывать положительно заряженные центры

(A^+ -центры) [25]. Заселенность A^+ -состояний однозарядных акцепторов определяется распределением Гиббса

$$f_{A1}^+(F) = \frac{6 \exp\left(\frac{\Delta E_1 - F}{k_B T}\right)}{4 + \exp\left(\frac{F - E_{A1}}{k_B T}\right) + 6 \exp\left(\frac{\Delta E_1 - F}{k_B T}\right)}, \quad (24)$$

где ΔE_1 — энергия присоединения лишней дырки, E_{A1} — энергия ионизации акцептора, энергия Ферми F отсчитывается от потолка валентной зоны E_V . Как показано в [26], для кристаллов $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ $E_{A1} \approx 8$ мэВ, а энергия ΔE_1 составляет около 10% от E_{A1} . Поскольку простой акцептор в A^+ -состоянии связывает две дырки, а одночастичные состояния четырехкратно вырождены [18], такое состояние считалось вырожденным шестикаратно.

Из (24) следует, что при умеренно низких температурах и умеренном легировании количество A^+ -центров в слабо компенсированных кристаллах сопоставимо с количеством A^- -центров и количеством доноров, поэтому они должны заметно влиять как на статистику дырок, так и на их рассеяние. В этой связи для слабо компенсированных кристаллов условие электронейтральности записывалось в виде $N_A^- = p + N_D + N_{\text{Cu}} \cdot f_{A1}^+(F)$. Учитывая, что здесь все заряженные центры имеют заряд $\pm e$, эффективная концентрация рассеивающих центров равна величине $N_I = p + [N_{\text{Cu}} \cdot f_{A1}^+(F) + N_D]$.

На рис. 5 (кривые 1 и 2) показаны результаты расчета холловской подвижности μ_{hH} тяжелых дырок, выполненного по формулам (4)–(14), (19)–(22). Холл-фактор $r_H^{(hh)}$ при $T > 15$ К вычислялся по формуле (23). В этих условиях его величина менялась в пределах от 1.05 до 1.15. Ниже 15 К борновское приближение для тяжелых дырок не выполняется [15], потому здесь использовалось значение $r_H^{(hh)} \approx 1.1$, получающееся в рамках метода парциальных волн (см. [15]). Видно, что расчетная зависимость $\mu_{hH}(T)$ довольно хорошо согласуется с данными измерений, если принять, что $N_D = 4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Для сравнения там же приведены результаты расчета подвижности дырок в отсутствие доноров и акцепторов (кривая 4). Видно, что рассеяние на заряженных центрах становится преобладающим ниже 30–40 К; среди других механизмов рассеяния в этих условиях самым сильным является рассеяние на флуктуациях состава.

Полученная оценка для N_D не зависит от концентрации Cu , однако в несколько раз превышает величину, найденную выше по данным измерения подвижности электронов. По-видимому, причина расхождения состоит в том, что в исследованных кристаллах $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ наряду с мелкими донорами присутствуют глубокие доноры и центры захвата дырок. Такие центры наблюдаются в опытах по измерению времени жизни электронов и дырок в кристаллах p -типа (см., например, [27,28]). Они нейтральны в n - $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$, где уровень Ферми лежит вблизи зоны проводимости, но активируются в кристаллах p -типа.

Существование A^+ -центров вполне объясняет низкую подвижность дырок в кристаллах p - $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}:\text{Cu}$, содержащих вакансии Hg . Эти собственные дефекты являются двухзарядными акцепторами, поэтому энергия их ионизации заметно выше, чем у меди. Расчет энергии различных уровней V_{Hg} был выполнен в работе [26]. По данным [26], вакансия образует два акцепторных уровня с энергией $E_{A2}^{(1)} \approx 16$ мэВ и $E_{A2}^{(2)} \approx 32$ мэВ соответственно, а также A^+ -уровень с энергией $\Delta E_2 \approx 3.7$ мэВ, так что распределение Гиббса для V_{Hg} имеет вид

$$f_{A2}^+(F) = \frac{4 \exp\left(\frac{\Delta E_2 - F}{k_B T}\right)}{6 + 4 \exp\left(\frac{F - E_{A1}^{(1)}}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{2F - E_{A1}^{(1)} - E_{A2}^{(2)}}{k_B T}\right) + 4 \exp\left(\frac{\Delta E_1 - F}{k_B T}\right)}. \quad (25)$$

Легко убедиться, что A^+ -уровни вакансий в легированных медью кристаллах располагаются при низких температурах вблизи уровня Ферми, поэтому вероятность их заполнения велика. На рис. 5 (кривая 3) показаны результаты расчета подвижности дырок в некомпенсированном кристалле, который содержал $3.5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов Cu и $1.8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ вакансий Hg . В этом случае $N_I = p + 2\{[V_{\text{Hg}}] \cdot f_{A2}^+(F) + N_{\text{Cu}} \cdot f_{A1}^+(F) + N_D\}$, где $[V_{\text{Hg}}]$ — концентрация вакансий. Видно, что вычисления, выполненные при помощи соотношений (4)–(14), (19)–(25), вполне согласуются с экспериментом, если учесть дополнительное рассеяние на положительно заряженных вакансиях.

4. Заключение

1. Малая холловская подвижность в кристаллах p - $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при низких температурах является следствием влияния прыжкового переноса заряда на величину диагонального компонента тензора электропроводности.

2. Подвижность тяжелых дырок в кристаллах p - $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при $T < 20$ К ограничена рассеянием на заряженных центрах, среди которых в случае некомпенсированных кристаллов существенную роль играют положительно заряженные акцепторы и глубокие доноры. Другие виды рассеяния практически не влияют на величину μ_{hH} .

3. Подвижность тяжелых дырок в кристаллах p - $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ при более высоких температурах ограничена рассеянием дырок друг на друге, на флуктуациях состава, на колебаниях решетки и на заряженных центрах.

4. Интеграл перекрытия функций Блоха электронов и дырок в кристаллах $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ равен единице.

Список литературы

- [1] M.A. Berding, S. Krishnamurthy, A. Sher. A.-B. Chen. J. Vac. Sci. Technol. A, **5** (5), 3014 (1987).
- [2] J.R. Mayer, F.J. Bartoli, C.A. Hoffman. J. Vac. Sci. Technol. A, **5** (5), 3035 (1987).
- [3] И.М. Цидильковский, Г.И. Харус, Н.Г. Шелушинина. *Примесные состояния и явления переноса в бесцелевых полупроводниках* (Свердловск, УНЦ АН СССР, 1987).
- [4] Б. Ридли. *Квантовые процессы в полупроводниках* (М., Мир, 1986).
- [5] В.В. Богобаящий, А.И. Елизаров, В.А. Петряков, В.И. Стафеев, В.Н. Северцев. ФТП, **21**, 1469 (1987).
- [6] В.А. Базакуца, В.И. Белозерцева, В.В. Богобаящий и др. В сб.: *Примеси и дефекты в узкозонных полупроводниках* (Павлодар, 1987) с. 148.
- [7] Н.Н. Берченко, В.В. Богобаящий, А.И. Елизаров и др. В сб.: *Примеси и дефекты в узкозонных полупроводниках* (Павлодар, 1987) с. 129.
- [8] V.V. Bogoboyashchyu. Semicond. Physics, Quantum & Optoelectronics, **2** (1), 62 (1999).
- [9] V.V. Bogoboyashchyu. Proc. SPIE, **3486**, 325 (1997).
- [10] А.И. Елизаров. Завод. лаб., вып. 10, 82 (1981).
- [11] С.Т. Elliot, I. Melngailis, T.C. Harman. J. Phys. Chem. Soc., **33** (2), 1527 (1972).
- [12] N.F. Mott. J. Non-Cryst. Sol., **1** (1), 1 (1968).
- [13] А.В. Ведяев, А.Б. Грановский. ФТТ, **28** (8), 2310 (1986).
- [14] H. Böttger, V.V. Bryksin. Phys. St. Sol. (b), **113** (1), 9 (1982).
- [15] Ф. Дж. Блатт. *Теория подвижности электронов в твердых телах* (Л., Физматгиз, 1963).
- [16] И.М. Дыкман, П.М. Томчук. *Явления переноса и флуктуации в полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1981).
- [17] О. Маделунг. *Теория твердого тела* (М., Наука, 1980).
- [18] И.С. Шлимак, А.Л. Эфрос, И.Я. Янчев. ФТП, **11** (12), 257 (1977).
- [19] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990).
- [20] А.В. Любченко, Е.Ф. Сальков, Ф.Ф. Сизов. *Физические основы полупроводниковой инфракрасной фотозлектроники* (Киев, Наук. думка, 1984).
- [21] L.S. Kim, S. Perkowicz, O.K. Wu, J.N. Schulman. Semicond. Sci. Technol., **5** (3S), S107 (1990).
- [22] Ю.Х. Векилов, А.П. Русаков. ФТТ, **13** (4), 1157 (1971).
- [23] V.V. Bogoboyashchyu. Semicond. Physics, Quantum & Optoelectronics, **4** (4), 442 (2001).
- [24] H.R. Vudyanath. Sol. St. Sci. Technol., **128** (12), 2609 (1981).
- [25] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [26] В.В. Богобаящий. ФТП, **36** (1), 29 (2002).
- [27] D.L. Polla, C.E. Jones. J. Appl. Phys., **52** (8), 5118 (1981).
- [28] D.L. Polla, M.B. Reine, C.E.J. Jones. Appl. Phys., **52** (8), 5132 (1981).

Редактор Л.В. Беляков

Hole scattering mechanism in $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ crystals at low temperatures

V. Bogoboyashchyu

Kremenchug State Polytechnic University,
39614 Kremenchug, Ukraine

Abstract Specific resistance and Hall effect are investigated in copper-doped $p\text{-Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ crystals within a temperature range 4.2–100 K at copper concentrations from $1.5 \cdot 10^{15}$ up to $1.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. It is shown that for correct determination of Hall mobility of holes at low temperatures it is necessary to take into account the hopping conductance. It is found, that at 77 K the heavy holes scatters due to themselves, charged dopes, fluctuations of composition, and lattice oscillations. In compensated crystals the holes scatters at very low temperatures due to charged dopes exceptionally. In uncompensated crystals it is necessary to take into account holes scattering due to positively charged centers, formed as a results of the addition of holes by acceptors.