Особенности температурной зависимости концентрации электронов проводимости в узкощелевом и бесщелевом состоянии Cd_xHg_{1-x}Te

© С.А. Алиев, Э.И. Зульфигаров, Р.И. Селим-заде

Институт физики Национальной академии наук Азербайджана, AZ-1143 Баку, Азербайджан

(Получена 17 мая 2011 г. Принята к печати 21 июля 2011 г.)

Проанализированы результаты исследований удельной проводимости σ и коэффициента Холла R в кристаллах $\operatorname{Cd}_x\operatorname{Hg}_{1-x}$ Te с x = 0.1, 0.12, 0.14, 0.15 в интервалах температур T = 4.2-300 K и магнитных полей B = 0.005-2.22 Tл. По данным R(B) в слабых и сильных магнитных полях и по данным $\sigma(T)$ определены концентрации и подвижности электронов и дырок. Показано, что в исследованных образцах в области 4.2-15 K концентрация электронов n от T почти не зависит, с повышением T она возрастает согласно $n \propto T^r$ (r > 3/2), причем r = f(n, T, x). Получено, что r изменяется от 1.7 для x = 0.1 до 3.1 в составах с x = 0.14 и 0.15. Результаты по n(T) сопоставлены с теорией, учитывающей непараболичность закона дисперсии $\varepsilon(T)$, и с теорией примесных состояний в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках. Показано, что постоянство n(T) до ~ 15 K и сильная зависимость n(T) (r > 3/2) при более высоких температурах обусловлены интенсивной ионизацией электронов, локализованных на акцепторных состояниях.

1. Введение

Теория примесных состояний для бесщелевых полупроводников типа Cd_xHg_{1-x}Te рассмотрена в работах [1-5]. Основная идея теории сводится к тому, что в бесщелевых полупроводниках с соотношением эффективных масс дырок и электронов $m_p \gg m_n$ резкие донорные уровни отсутствуют, а квазидискретные акцепторные уровни с энергией ε_0 попадают на непрерывный спектр зоны проводимости. Величина ε_0 зависит от концентрации акцепторов и от ширины запрещенной зоны ε_g (в случае очень узкой щели). С уменьшением ε_{q} величина ε_{0} возрастает. Поэтому все донорные состояния в них должны быть ионизованы начиная с самых низких температур. В [1,3] показано, что в зависимости от концентраций донорных и акцепторных примесей в бесщелевых полупроводниках реализуются несколько случаев; в большинстве из них концентрация носителей n(T) примерно в интервале температур *T* = 15-20 К должна проходить через минимум. Эти особенности должны отразиться и на других электронных процессах. Самым интересным из них является двойная инверсия знака коэффициента Холла с (-) на (+) и с (+) на (-). При этом привлекает внимание и изменение величины показателя степени г в зависимости $n \propto T^r$, и ее функциональная зависимость от состава, концентрации примесей, ε_g и области температур.

Исходя из этого в данной работе мы анализируем результаты исследований коэффициента Холла, удельной проводимости и полученных на их основе зависимостпей n(T) для образцов Cd_xHg_{1-x}Te c x = 0.1, 0.12, 0.14,0.15, 0.2, имеющих различные значения зонных параметров: *n*, концентрациями доноров N_d и акцепторов N_a , ε_g , ε_0 , энергии уровня Ферми ε_F .

2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Измерения проводимости и коэффициента Холла проводились в интервале температур $4.2 \le T \le 300$ К и в магнитных полях $0 \le B \le 2.22$ Тл. Получено, что в составах с x = 0.1-0.15 возрастание проводимости σ с температурой начинается при T = 8-10 К, а в образце с x = 0.2 — при 5–6 К. На рис. 1 представлены температурные зависимости коэффициента Холла R при различных значениях магнитной индукции B. Видно, что R(T) проходит через максимум, величина которого уменьшается с ростом индукции поля, при этом поло-



Рис. 1. Температурные зависимости коэффициента Холла в Cd_xHg_{1-x} Те (x = 0.14). В, Тл: I - 1.006, 2 0.02, 3 - 0.05, 4 - 0.15, 5 - 0.4, 6 - 0.8, 7 - 1.2.



Рис. 2. Зависимости коэффициента Холла от индукции магнитного поля в Cd_xHg_{1-x} Te (x = 0.14). *T*, K: 1 - 4.2, 2 - 20, 3 - 68, 4 - 77. Штриховые кривые — расчет.

жения максимума и точки инверсии знака R смещаются в сторону высоких температур. На рис. 2 представлены зависимости коэффициента Холла от индукции магнитного поля при различных температурах в сопоставлении с кривыми R(B), рассчитанными для двухзонной модели. Видно, что при T = 4.2 К величина R(B) до 0.01 Тл имеет постоянное значение, затем R сильно уменьшается до смены знака с (-) на (+). Аналогичная зависимость наблюдается и при 20 К, но точка смены знака R(B) смещается в сторону высоких B. Экстраполяция кривых R(B) при 68 и 77 К позволяет предположить, что смена знака R(B) должна произойти при 3–4 Тл.

Следует заметить, что указанные особенности проявляются и в температурных зависимостях проводимости $\sigma(T)$, в которых отражается зависимость n(T). Смещение начала возрастания $\sigma(T)$ в сторону высоких Tвызвано вкладом в проводимость дырок, который сказывается на R(T) сильнее, чем на других кинетических коэффициентах.

Зависимость R(B) в слабых полях обусловлена доминирующим вкладом в проводимость электронов, а уменьшение R и смена знака — вкладом тяжелых дырок. Инверсия знака R(B) происходит в поле, определяемом согласно $B_0 = (1/\mu_p)\sqrt{n/p}$ (n — концентрация электронов, p — концентрация дырок, μ_p — подвижность дырок). По характеру зависимостей R(B, T) исследованные образцы можно разделить на две группы: первая группа (x = 0.1), в которой наблюдается монотонное уменьшение зависимости R(T) независимо от величины B; вторая группа (x = 0.12-0.2), в которой на зависимостях R(T) наблюдается максимум (рис. 1). С целью получения количественных данных о параметрах носителей заряда — концентрациях n(T), p(T)и подвижностях $\mu_n(T)$, $\mu_p(T)$ — был использован метод четырех коэффициентов, предложенный в [7] и апробированный в [7–10]. Сущность метода сводится к анализу зависимости R(T). При этом анализируются области насыщения R(T) при слабых и сильных магнитных полях, значение B_0 , при котором происходит смена знака R, а также значения удельной электропроводности σ с учетом участия в проводимости двух типов носителей заряда.

Из результатов, полученных для исследованных образцов, наибольший интерес представляют температурные зависимости n(T) (рис. 3). Как видно, зависимости n(T)для исследованных составов $Cd_xHg_{1-x}Te$ имеют нестандартный вид: при низких температурах до 10-15 K *n* от *T* почти не зависит, в области 15-50 K для составов с x = 0.1, 0.12, 0.14, 0.15 показатель степени *r* в зависимости $n \propto T^r$ принимает значения r = 1.7, 2, 2.3, 2.5соответственно. Напомним, что в указанном интервале *T* составы с x = 0.1 и 0.12 находятся в бесщелевом, а с x = 0.14 и 0.15 — в узкощелевом состояниях. Поэтому для анализа результатов рассмотрим вначале влияние непараболичности зоны проводимости на n(T).

Известно, что для полупроводников с параболической зоной проводимости зависимость n(T) подчиняется закону $n \propto T^{3/2}$. Отклонение от этого закона наблюдается при нестандартном законе дисперсии электронов, при котором уравнение электронейтральности имеет вид [6]

$$m_n^{3/2} I_{3/2}^0(\eta^*,\beta) = m_p^{3/2} F_{3/2}(-\eta^*), \tag{1}$$

где m_n — эффективная масса электрона на дне зоны проводимости, $\beta = k_0 T / \varepsilon_g$, ε_g — энергетический зазор



Рис. 3. Температурные зависимости концентрации электронов в Cd_xHg_{1-x}Te. *x*: *1* — 0.1. *2* — 0.12, *3* — 0.14, *4* — 0.15.

между дном зоны проводимости и потолком зоны легких дырок, k_0 — постоянная Больцмана. Численное решение уравнения (1) указывает на r > 3/2, что особенно заметно при $\varepsilon \rightarrow 0$, т.е. при переходе в бесщелевое состояние. В этом случае (1) приобретает вид [6]

$$\left[\frac{(k_0 T)^{3/2}}{S^3}\right] F_{3/2}(\eta^*) = (2m_p)^{3/2} F_{3/2}(-\eta^*), \qquad (2)$$

где $S = \sqrt{3/2}(p/n)$, или $\varepsilon_g = 2m_n S^2$.

При сильном вырождении электронного газа и отсутствии вырождения дырок для приведенного уровня Ферми получено

$$\eta^* = \ln\left[\left(3\sqrt{\frac{\pi}{4}}\right)\left(\frac{2m_p S^2}{k_0 T}\right)^{3/2}\right].$$
 (3)

Подставляя (3) в

$$n = \frac{(2m_nk_0T)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}F_{3/2}(\eta^*),$$

для n(T) получаем

$$n(T) = \frac{(k_0 T)^3}{3\pi^2 \hbar^3 S^3} \ln \left[\frac{9\sqrt{\pi}}{4} \left(\frac{2m_p S^2}{k_0 T} \right) \right].$$
 (4)

Вычисленные значения показателя r из (4) \leq 3, но \gg 3/2. Наиболее сильное отличие показателя r от 3/2 наблюдается, когда обе зоны сильно непараболичны, как в твердых растворах $Pb_{1-x}Sn_xTe$. В этом случае концентрация электронов определяется согласно

$$n = 5.4 \frac{(k_0 T)^3}{3\pi^2 \hbar^3 S^3} \propto T^3,$$

т.е. в бесщелевых полупроводниках характер n(T) в зависимости от закона дисперсии в каждой зоне может изменяться от $n \propto T^{3/2}$ до $n \propto T^3$. Из этих рассуждений следует, что данные по n(T) позволяют судить и о структуре краев зон в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках.

Однако на зависимость n(T) в бесщелевом полупроводнике существенное влияние может оказать расположение энергетических уровней донорных и акцепторных примесей. Поэтому необходимо напомнить основные случаи, встречающиеся на практике. В работах [1,3] показано, что концентрация, при которой энергия уровня Ферми совпадает с энергией акцепторного уровня ($\varepsilon_{\rm F} = \varepsilon_0$), определяется как

 $N_0 = \frac{(2m_n \varepsilon_0)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}.$

(5)

Тогда

$$\left(\sqrt[3]{\frac{\pi}{4}}\frac{m_p}{m_n}\right)^{3/2} \exp(-\eta^*) - (\eta^*)^{3/2} = \left(\frac{\varepsilon_0}{k_0 T}\right)^{3/2} \\ \times \left\{\frac{N_d}{N_0} \left[1 + 4\exp\left(\frac{\varepsilon_0}{k_0 T} - \eta^*\right)\right]^{-1} - \frac{N_d}{N_0}\right\}.$$
 (6)



Рис. 4. Расчетные [5] зависимости концентрации электронов от температуры для концентраций доноров $N_d/N_0 = 0.8$ (*a*) и 1.6 (*b*). Концентрация акцепторов $N_a/N_0 = 0$ (*I*), 1 (2), 10 (3), 50 (4), 100 (5).

Температурные зависимости n/N_0 для бесщелевого полупроводника типа Cd_xHg_{1-x} Те, рассчитанные в [1,3] для значения $m_p/m_n = 18$, представлены в [1,3,7,8]. Из этих данных следует, что зависимость n(T) имеет необычный вид (поскольку N_0 для каждого образца постоянная величина) и определяется концентрацией акцепторных, N_a , и донорных, N_d , примесей (рис. 4).

Например, при $N_d < N_a$ и T = 0 К $\varepsilon_F < \varepsilon_a$, $n = N_d < N_0$ и, несмотря на ионизацию всех доноров, она недостаточна для достижения уровня ε_0 , что должно, по определению, происходить при $n = N_0$. Поэтому при очень низких температурах n от T не зависит, но с повышением T электороны, освободившиеся с донорных уровней, достигают ε_0 и начинается процесс их локализации на акцепторных уровнях, что приводит к уменьшению n(T); дальнейшее повышение T обусловливает переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости и к сильному возрастанию n(T), т.е. к прохождению в результате n(T) через минимум.

Из вышеизложенного следует необходимость сопоставления полученных результатов с конкретными случаями данной модели. В частности, полученные экспериментальные данные позволяют выявить зависимость n(T) от состава (от x), от исходных концентраций электронов, от отношения N_a/N_d и от температурной области.

Например, состав с x = 0.15 во всем исследованном интервале температур находится в бесщелевом состоянии, обладает минимальной исходной концентрацией $n = 3.7 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $N_a = 1.7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_a/N_d = 4.6 \cdot 10^3$. Показатель степени r (в $n \propto T^r$) в области 100-300 К достигает значения 3.1. После облучения электронным пучком *n* возрастает до $5 \cdot 10^{13}$ см⁻³, при этом r в области 30–100 К соответствует r = 2.5, но в области 200-300 К возрастает до r = 2.8 (рис. 4). Для данного образца реализуется случай, когда имеются примеси обоих сортов, но акцепторы до $\sim (10-15) \, {
m K}$ не в состоянии влиять на n(T), поскольку $\varepsilon_{\rm F} < \varepsilon_0$. При дальнейшем возрастании Т энергия электронов растет, и электроны, достигая акцепторных уровней, локализуются на них. В результате должно наблюдаться уменьшение n(T), однако этого не происходит. С дальнейшим возрастанием Т начинается процесс перехода валентных электронов в зону проводимости, что ведет к резкому возрастанию зависимости n(T), обусловленному в данном случае сильной непараболичностью бесщелевого состояния. Это относится и к данным, полученным после облучения, создающего радиационные дефекты донорного типа, уровни которых располагаются чуть выше исходных уровней до облучения, т.е. ближе к границе зон; они подтверждают сильную функциональную зависимость показателя r от исходной концентрации n и области температур.

Анализ данных для состава с x = 0.14, относящегося к бесщелевому состоянию, качественно не сильно отличается от наблюдаемого для состава с x = 0.15; температурный ход n(T) такой же, в области T = 200-300 К r = 2.9.

Состав с x = 0.12 при низких температурах является узкощелевым, но с сильно непараболической зоной проводимости. Концентрация электронов значительно выше, чем в предыдущих составах ($n = 2.3 \cdot 10^{14}$ см⁻³), но отношение N_a/N_d в 15 раз меньше, а значение r значительно меньше (r = 2.3); по-видимому, это связано с меньшим значением отношения N_a/N_d .

Состав с x = 0.1 отличается от других коренным образом: он до 400 К находится в узкощелевом состоянии, обладает высокой концентрацией электронов $(n = 3.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3})$. Конечно, к нему нельзя применить вышеприведенные диаграммы примесных состояний. Хотя в нем зона проводимости сильно непараболична, но собственная проводимость наступает при T > 400 К. Поэтому значение r в нем не достигает своего максимального значения.

Как видно, в исследованных образцах Cd_xHg_{1-x} Те предсказанное теорией очень эффектное явление — прохождение зависимости n(T) через минимум — не проявляется. Можно полагать, что в этих образцах соотношения параметров $n, N_a, N_d, \varepsilon_F$ и ε_0 оказались

не соответствующими условиям проявления минимума n(T). В работах [9–14] было обнаружено необычное поведение коэффициента Холла, или минимумы на n(T). Однако авторы упомянутых работ данное явление интерпретировали по-разному. Подтверждением согласия всех этих аномалий с теорией примесных состояний могут служить аналогичные исследования в Ag₂Te, в котором удалось регулировать отношения вышеприведенных параметров и проследить за двойной инверсией знака проводимости с глубоким минимумом на n(T) и высоким значением r = 3.7 [7,8].

Этот факт анализировался в теоретических работах [4,5], где показано, что из-за высокой плотности акцепторных состояний возможно частичное перекрытие волновых функций электронов на акцепторных состояниях. Этому может способствовать малое, но конечное значение ширины акцепторного уровня. Показано, что учет данного фактора объясняет исчезновение минимума на n(T). Конечно, высокая концентрация N_a реализуется чаще, чем обратное.

Список литературы

- [1] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. ЖЭТФ, 62 (2), 713 (1972).
- [2] A. Manger, S. Otmezguines, C. Verit, J. Frildel. Phys. Rev., 12 (6), 2412 (1975).
- [3] Б.Л. Гельмонт. ФТП, 9, 1912 (1975).
- [4] М.А. Мехтиев. Изв. АН АзССР. Сер. физ.-техн. и мат. наук, № 4, 412 (1975).
- [5] М.А. Мехтиев, В.А. Калина. Изв. АН АзССР. Сер. физтехн. и мат. наук, № 2, 68 (1982).
- [6] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках (М., Наука, 1985).
- [7] С.А. Алиев. Явления переноса заряда и тепла в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках (Баку, Элм, 2008).
- [8] С.А. Алиев, З.Ф. Агаев, Р.И. Селим-заде. ФТП, 42 (12), 1415 (2008).
- [9] C.T. Elliott, I.L. Spain. Sol. St. Commun., 8 (24), 2063 (1970).
- [10] I.M. Tsidilkovskii, M. Giriat, G.I. Kharus, E.A. Neifeld. Phys. Status Solidi B, 64 (2), 717 (1974).
- [11] Л.А. Бовина, Ю.Н. Савченко, В.И. Стафеев. ФТП, 9 (11), 2084 (1975).
- [12] В.И. Иванов-Омский, Б.И. Иванов, В.К. Огородников, Н.В. Смекалова. В кн. Полупроводники с узкой зоной и полуметаллы. Матер. IV Всес. симп. (Львов, 1975) с. 47.
- [13] Л.А. Бовина, В.П. Пономаренко, В.И. Стафеев. ФТП, 12 (11), 2207 (1975).
- [14] Ю.Г. Арапов, Б.Б. Поникаров, И.М. Цидильковский, Н.Г. Шелушинина. ФТП, **13** (10), 684 (1979).

Редактор Л.В. Шаронова

Peculiarities of the temperature dependences of electron concentration in narrow-band and gapless $Cd_xHg_{1-x}Te$

A.A. Aliev, E.I. Zulfigarov, R.I. Selim-zade

Institute of Physics,

National Academy of Sciences of Azerbaijan Republic, AZ-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract The electrical conductivity σ and the Hall coefficient *R* results for $Cd_xHg_{1-x}Te$ (x = 0.1, 0.12, 0.14, 0.15) in $4.2 \le T \le 300$ K temperature and $0 < B \le 2.22$ T magnetic field regions have been analyzed. The temperature dependences of electron concentration n(T) have been calculated on the base of $\sigma(T)$ and R(B, T) data. As it was shown, *n* was practically independent on *T* in 4.2-15 K region, with a rise of temperature *n* value increased following the $n \propto T^r$ law (r > 3/2). The *r* changes from r = 1.7 (x = 0.1) to r = 3.1 (x = 0.14 and 0.15) were obtained. The n(T) results have been compared with the theory of monparabolic dispersion law and the theory of impurity states in narrow-band and gapless semiconductors. Independence of *n* on *T* at T < 15 K and sharp n(T) dependence (r > 3) at higher temperatures were shown to be due to intensivie ionization of electrons localized at acceptor levels.