

ДЕЯКІ ЗОННІ ПАРАМЕТРИ НАПІВПРОВІДНИКОВОГО ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$

В даній роботі розглянуто простий метод розрахунку ширини забороненої зони твердого розчину $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$. Отриманий емпіричний вираз для ширини забороненої зони $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ добре співпадає з експериментальними даними та з розрахунками інших авторів. З використанням отриманої формули k-p методом проведено обчислення концентрації власних носіїв, рівня Фермі та ефективної маси електронів у даному матеріалі. Запропоновано емпіричні формули для обчислення ширини забороненої зони та концентрації власних носіїв у даному матеріалі.

Тверді розчини HgCdTe (КРТ) володіють рядом унікальних фізичних та електрооптичних властивостей, що робить їх дуже корисними для створення детекторів інфрачервоного випромінювання середньо- та далекохвильового діапазонів. Однак, їх широкому застосуванню перешкоджає нестабільність КРТ з часом, причиною якої є досить сильна різниця атомних радіусів Cd і Hg. Стабільність КРТ можна підвищити, замінивши Cd, навіть частково, на речовину з атомним радіусом, що ближче підходить до атомного радіусу Hg. Такою речовиною можуть бути, наприклад, Mn або Zn.

Не дивлячись на всю перспективність матеріалів типу $\text{Hg}_{1-x-y}\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Te}$ (КМРТ), який має дуже цікаву рису – можливість окремого керування шириною забороненої зони, змінюючи вміст Cd, і магнітних властивостей, змінюючи концентрацію Mn, їх зонні параметри недостатньо добре вивчені. В першу чергу це стосується ширини забороненої зони.

Традиційний метод розрахунку зонних параметрів складних напівпровідникових твердих розчинів, який вже став класичним, запропонований Уільямсом [1]. В цьому методі складний твердий

розчин представляється як сукупність трьох потрібних розчинів з відомими зонними параметрами. Однак, цей метод розрахунку, на наш погляд, відносно складний, і не дає можливості отримати простих зручних в користуванні результатів.

Існує більш простий метод розрахунку зонних параметрів вказаних матеріалів, який запропоновано в роботі [2]. Перевагами цього методу є простота обчислення, а результати можна отримати у вигляді простої емпіричної формули, яка зручна в користуванні. Суть цього методу полягає в наступному

Чотирикомпонентний твердий розчин $Hg_{1-x-y}Cd_xMn_yTe$ можна уявити як сукупність двох: $Hg_{1-u}Cd_uTe$ та $Hg_{1-w}Mn_wTe$. Тоді будь-який зонний параметр $Hg_{1-x-y}Cd_xMn_yTe$ (наприклад, ширину забороненої зони) можна розрахувати за допомогою простої формули:

$$E_g(Hg_zCd_xMn_yTe) = 0.5E_g(Hg_{1-u}Cd_uTe) + 0.5E_g(Hg_{1-w}Mn_wTe), \quad (1)$$

де $u=2x$, $w=2y$, $z=1-x-y$. Використовуючи емпіричні формули для ширини забороненої зони (ШЗЗ) $Hg_{1-u}Cd_uTe$ [3] та $Hg_{1-w}Mn_wTe$ [4], ми отримали за допомогою формули (1) такий вираз для ширини забороненої зони $Hg_{1-x-y}Cd_xMn_yTe$:

$$E_g(x,y,T) = -0.302 + 5.125 \cdot 10^{-4}T - (x + 2.287y) \cdot 10^{-3}T + 1.93(x + 2.197y) - 1.62(x^2 + 2.728y^2) + 0.272(12.235x^3 - y^3). \quad (2)$$

Точність (2) перевірялась порівнянням із роботами С.Такеями і У. Дебської [5]. Результати порівняння подано на рис.1. Як видно з рисунка, розрахунки добре співпадають з експериментальними даними [5].

Таким чином, даний метод розрахунку можливо використовувати для обчислення зонних параметрів складних напівпровідникових твердих розчинів. Більше того, отримані результати у вигляді емпіричної формули (2) придатні для проведення подальших досліджень, наприклад, концентрації власних носіїв, ефективних мас і інших, де потрібне знання ШЗЗ матеріалу.

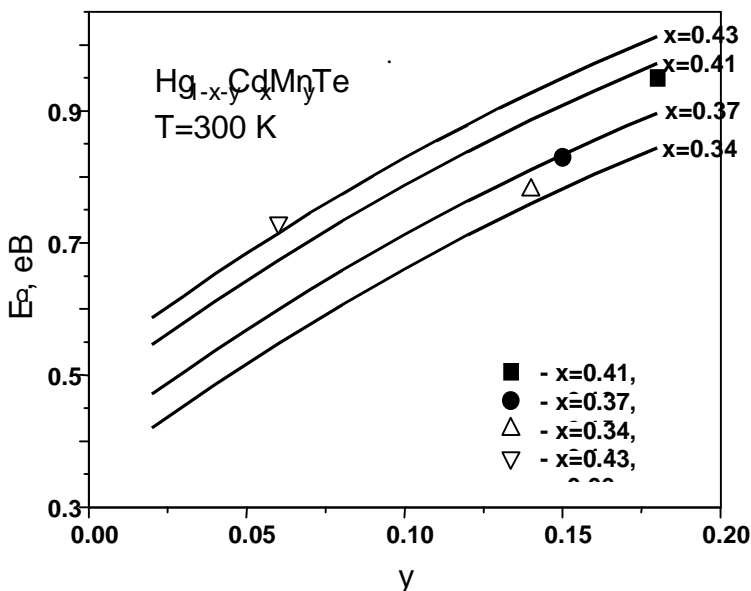


Рис.1. Залежність ШЗЗ КМРТ від вмісту Mn.

Точки – експеримент з роботи [5]. Криві – розрахунок за формулою (2).

За допомогою к-р-методу з використанням формули (2) нами було проведено розрахунки концентрації власних носіїв, рівня Фермі та ефективної маси електрона. Оскільки зона провідності і валентні зони КМРТ непараболічні, до розрахунку було залучено модель Кейна. Детально метод розрахунку для подібного матеріалу HgMnTe викладено у [4].

Результати проведених розрахунків подано на рис.2. З аналізу рисунка видно, що КМРТ складу $x=0.14; y=0.03$ за своїми характеристиками дуже подібний до КРТ складу $x=0.2$, що успішно застосовується для виготовлення фотоприймачів інфрачервоного випромінювання далекого ІЧ діапазону. КМРТ практично всіх складів (за виключенням $x=0.14; y=0.03$) залишається невідродженим при температурах $T > 150\text{ K}$.

Порівняння з експериментальними даними роботи [6] також вказує на те, що результати розрахунку добре співпадають з даними холлівських вимірів.

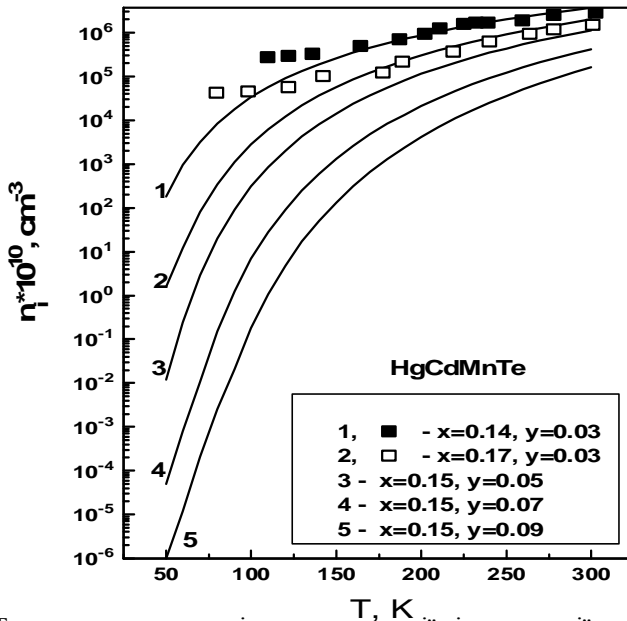


Рис.2. Температурна залежність концентрації вільних носіїв у КМРТ.
Точки - експериментальні дані з роботи [6].

Було також проведено розрахунки ефективної маси електронів у КМРТ, яка також виявилася близькою до такої у КРТ.

Оцінки непараболічності енергетичних зон КМРТ, що визначаються відмінністю між точним значенням маси та її параболическим еквівалентом, показують, що вона не перевищує 30%. Це дає нам можливість застосувати параболическе наближення для описання концентрації власних носіїв досліджуваного матеріалу.

На основі виконаних досліджень за допомогою методу найменших квадратів нами було отримано таке емпіричне співвідношення для концентрації власних носіїв КМРТ:

$$n_i(x,y,T) = (4.916 + 5.7 \cdot 10^{-3} T - 1.271(x+1.1y) - (0.045yT + 72.46y^2) \cdot 10^{14} E_g^{0.75} T^{1.5} \exp(-E_g/2kT); \quad (3)$$

яке справедливе в діапазоні $0 \leq x \leq 0.5$; $0.03 \leq y \leq 0.18$; $50 K \leq T \leq 350 K$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРИ

1. Williams C.K., Glisson T.H., Hauses J.R. and Littlejohn M.A. // J.Electron.Mater.-1978.-7.- P.639.
2. Anderson W.W. Absorption Constant of PbSnTe & HgCdTe Alloys // Infrared Physics.-1980.-20.- P.363.
3. Intrinsic carrier concentration of narrow-gap cadmium telluride based on the nonlinear dependence of the band gap / Lowney J.R., Seiler D.G., Littler C.L., Yoon I.T. // J.Appl.Phys.-1992.- 71.- P.1253-1258.
4. Концентрация собственных носителей и эффективная масса электронов в MnHgTe / Боднарук О.А., Горбатюк И.Н., Остапов С.Э., Паренко И.М. // ФТП.- 1992.-26.- №3. - С.468-472.
5. Energy Band Gaps of HgCdMnTe Epitaxial Layers / Debska U., Dietl M., Grabecki G., Janik E., Kierzek-Pecold E., Klimkiewicz M. // Phys. Stat. Sol (a).- 1981.- 64.- P.707.
6. Bodnaruk O.O., Markov A.V., Ostapov S.E. Energy Gap and Intrinsic Carrier Concentration of HgCdMnTe and HgCdZnTe.// Abst. 11th Intern. Conference on Ternary & Multinary Compounds, 8-12.09. 1997.- P.1-74.

SUMMARY

OSTAPOV S.E.

THE SEVERAL BAND PARAMETERS OF THE Hg_{1-x-y}Cd_xMn_yTe SOLID SOLUTION

The theoretical and experimental investigations of the main zone parameters of the quaternary solid solution HgCdMnTe are represented in the given paper. As a result of these investigations the empirical formulas for the energy gap width and intrinsic carrier concentration in the wide range of the temperature and compositions are suggested. The results of the theoretical calculations agree well with the experimental data.