

- Такий комбінований термомеханічний ефект можна використати в багатофункціональних сенсорах механічних і теплових величин, а також для оцінки впливу цього ефекту на параметри сенсорів для вимірювання одного параметра.

[1] Druzhinin A., Maryamova I., Lavitska E., Pankov Y. Physical aspects of multifunctional sensors based on piezothermomagnetic effects in semiconductors, *Sensors and Actuators*. 1998. A68. P.229–233.

[2] Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972.

[3] Voronin V., Maryamova I. The physical-chemical aspects of semiconductor whisker technology and creating sensors on their basis. *Proc. 13th Int. Ann.Scool on Microelectronic Sensors and Semicond. Lasers*, Sozopol, Bulgaria, 1990,. P.18–34.

[4] Voronin V., Maryamova I., Zaganyach Y. et al. Silicon whiskers for mechanical sensors, *Sensors and Actuators A30*. 1992. P.27–33.

[5] A.W.van Heerwaarden, Sarro P.M. Thermal sensors based on the Seebeck effects, *Sensors and Actuators*. 1986. 10. P.321–346.

[6] Samoilovich A.G., Nitsovich M.V., Nitsovich V.M. On the theory of anisotropic thermoelectric power in semiconductors // *Phys. status solidi*. 1966. 16 (2). P.459–465.

УДК 621.315.592

Іжнін І.І.

Львівський науково-дослідний інститут матеріалів НВП “Карат”

ЛЕГКІ ДІРКИ В $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$

© Іжнін І.І., 2000

У роботі експериментально визначено параметри важких та легких дірок (концентрацію та рухливість) в однорідних зразках $p\text{-Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2-0,23$) на основі дослідження польових залежностей коефіцієнта Холла та порівняно з результатами теоретичних розрахунків концентрацій на основі сучасних уявлень про параметри матеріалу. Отримані дані про параметри легких дірок дають можливість врахувати вплив цих носіїв на явища переносу в багатошарових структурах на основі $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$.

The parameters of heavy and light holes (concentration and mobility) for homogeneous samples of $p\text{-Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2-0,23$) were determined from investigation of the Hall coefficient field dependencies. These data have been compared with results of theoretical computations based on the modern knowledge of the material's parameters.

Вступ

Незважаючи на розробку цілої низки нових дослідницьких методик, які використовують різноманітні фізичні явища, вивчення саме гальваномагнітних ефектів лишається найбільш розповсюдженим методом визначення основних електрофізичних параметрів твердих розчинів $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ [1]. У той же час вимоги до точності та чутливості методів досліджень до присутності носіїв з малою концентрацією постійно зростають [2]. Особливо гостро проблема визначення кількості типів носіїв та їх параметрів постає під час досліджень багат шарових структур.

Метою роботи було визначення параметрів легких дірок у р- $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, що дало б надалі оживити враховувати вплив цих носіїв на явища переносу в разі присутності декількох типів носіїв, наприклад, в сучасних приладних багат шарових структурах на основі $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$.

Для визначення кількості типів носіїв заряду, які вносять вклад в явища переносу, їх концентрацій та рухливостей найчастіше використовується аналіз польових залежностей коефіцієнта Холла [2]. Однак здебільшого вкладом легких дірок під час аналізу польових залежностей коефіцієнта Холла в р- $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ нехтували і, як наслідок, параметри цих носіїв вивчені значно меншою мірою [3,4]. Нехтування вкладом легких дірок в р- $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при $x \leq 0,3$ ґрунтується на тому, що, виходячи з особливостей зонної структури матеріалу [3], маса легких дірок значно менша від маси важких дірок, внаслідок чого концентрація легких дірок значно менша, ніж концентрація важких дірок

$$p/p_1 = (m_h^*/m_l^*)^{3/2}, \quad (1)$$

де p_1, m_l^* та p, m_h^* – концентрації та ефективні маси густини станів відповідно легких та важких дірок. Однак при оцінках співвідношення концентрації важких і легких дірок в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ необхідно враховувати непараболічність зони легких дірок, що є характерною особливістю матеріалу і суттєво впливає на їх концентрацію, як це було показано в [5, 6].

Експеримент

Для визначення параметрів легких та важких дірок було досліджено польові залежності коефіцієнта Холла при 77 К в р- $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2-0,23$) з загальною концентрацією дірок від $5 \cdot 10^{15}$ до 10^{17} см^{-3} , що відповідає при цій температурі та складах домішківій провідності. Вимірювання коефіцієнта Холла та провідності проводили за методом Ван дер Пау на об'ємних зразках, отриманих методом кристалізації з розплаву, та на епітаксійних шарах, отриманих методом рідинно-фазної епітаксії, в магнітних полях від 0,01 до 1,5 Тл. Польові залежності коефіцієнта Холла для досліджених зразків показано на рис. 1.

Характерною особливістю вимірних польових залежностей коефіцієнта Холла є наявність перегину в магнітному полі $B \approx 0,6$ Тл. Такий перегин не пов'язаний з впливом холл-фактори важких дірок на польову залежність коефіцієнта Холла, оскільки умовою його спостереження є виконання співвідношення $(\mu_p B)^2 \approx 1$ і для типових значень рухливостей важких дірок $\mu_p \approx 500 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [3] перегин мав би відбуватись в магнітних полях порядку 20 Тл. Інтервал магнітних полів, в яких проводилось вимірювання коефіцієнта Холла, забезпечував перехід від слабого магнітного поля до сильного для легких дірок за виконання умови слабого поля для важких дірок і, отже, перегин на залежностях $R_H(B)$

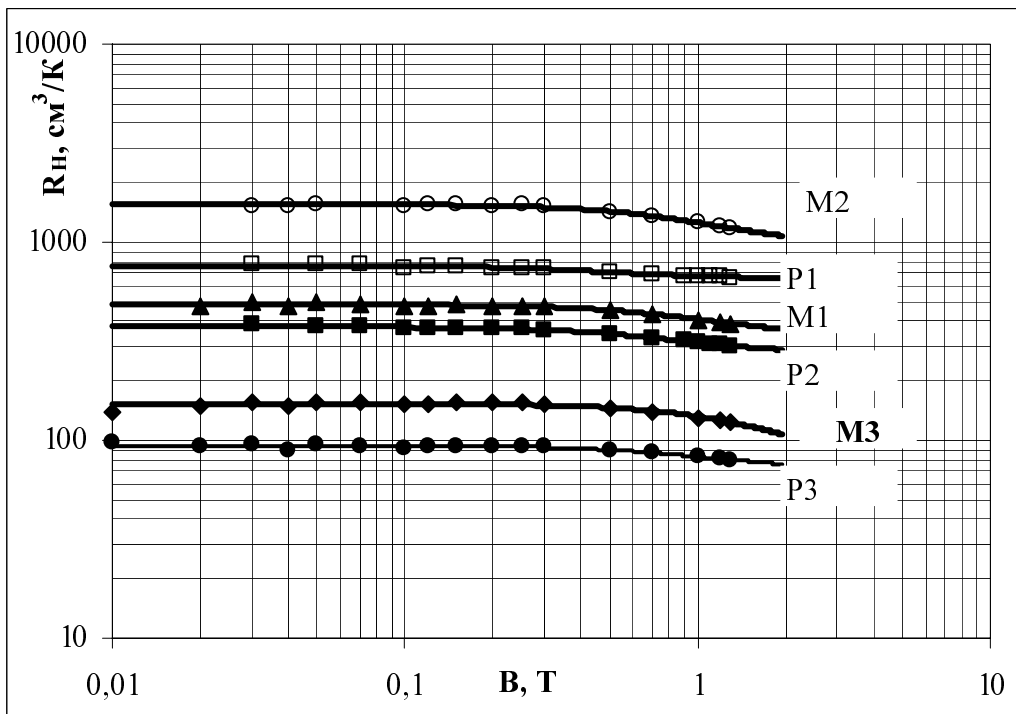


Рис.1. Залежність коефіцієнта Холла R_H від магнітного поля B в зразках $p\text{-Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$.

пов'язаний з вкладом саме легких дірок в явища переносу, що дає можливість визначити параметри легких та важких дірок на підставі аналізу цих залежностей. Параметри носіїв визначались на основі аналізу вимірюваних польових залежностей коефіцієнта Холла та провідності σ_0 за методом найменших квадратів за допомогою мінімізації функції

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[R_H^E(B_i) - R_H^T(B_i) \right]^2, \quad (2)$$

де $R_H^E(B_i)$ – експериментальні значення коефіцієнта Холла при значеннях індукції магнітного поля B_i ($i=1-N$); N – кількість значень магнітного поля, в яких проводилось вимірювання коефіцієнта Холла; $R_H^T(B_i)$ – теоретичні значення коефіцієнта Холла при тих же магнітних полях, які визначались в межах двозонної теорії провідності

$$R_H^T(B_i) = \frac{1}{e} \frac{p\mu_p^2 + p_1\mu_{p_1}^2 + B_i^2\mu_p^2\mu_{p_1}^2(p + p_1)}{(p\mu_p + p_1\mu_{p_1})^2 + B_i^2\mu_p^2\mu_{p_1}^2(p + p_1)^2}, \quad (3)$$

де μ_p , μ_{p_1} – рухливість відповідно важких та легких дірок; e – заряд електрона.

У цьому виразі значення холл-факторів легких та важких дірок прийняті такими, які дорівнюють одиниці, що є загальноприйнятим для такого аналізу [1,7] і відповідає випадку незалежних від енергії часів релаксації. Таке припущення виправдане тим, що участь в переносі двох типів носіїв зарядів з суттєво різними рухливостями в області змішаної провідності призводить до значно сильнішої залежності коефіцієнта Холла від магнітного поля, ніж врахування в (3) залежних від магнітного поля холл-факторів важких та легких дірок. Оцінки [7] дають верхню межу помилки у визначенні концентрацій носіїв у $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ не більше 5% при застосуванні використаного наближення. Крім того, врахування в (3) холл-

факторів важких та легких дірок створює значні математичні складності під час проведення процедури мінімізації функції (2).

Мінімізацію цільової функції проводили за методикою, викладеною в [6]. Визначені параметри носіїв наведено в таблиці.

**Параметри носіїв p-Cd_xHg_{1-x}Te, отримані
з аналізу польових залежностей коефіцієнта Холла**

№ зразка	x, за даними p та R при 300 K	Розрахунок за польовими залежностями коефіцієнта Холла в межах двозонної моделі (77 K)				
		σ , (Ом·см) ⁻¹	p , см ⁻³	μ_p , см ² /Вс	p_i , см ⁻³	μ_{pi} , см ² /Вс
M1	0.24	1.4	$1.9 \cdot 10^{16}$	480	$1.7 \cdot 10^{13}$	9900
M2	0.23	0.4	$6.6 \cdot 10^{15}$	390	$6 \cdot 10^{12}$	9600
M3	0.24	3.42	$8.5 \cdot 10^{16}$	260	$1.7 \cdot 10^{14}$	5600
P1	0.21	0.66	$9.6 \cdot 10^{15}$	430	$1.8 \cdot 10^{13}$	10800
P2	0.23	1.50	$2.3 \cdot 10^{16}$	410	$8.4 \cdot 10^{12}$	12600
P3	0.22	6.22	$8.8 \cdot 10^{16}$	450	$5.4 \cdot 10^{13}$	9730

Як видно з таблиці, значення рухливостей важких дірок лежать у межах типових значень, наведених в літературі [3], а рухливість легких дірок добре корелює з даними роботи [4]. Крім того, треба відзначити, що отримані значення параметрів для концентрацій та рухливостей забезпечують надзвичайно добре узгодження експериментальних та теоретично розрахованих за (3) польових залежностей коефіцієнта Холла для всіх досліджених зразків (рис.1). Це дає змогу переконливо порівнювати отримані таким способом концентрації легких та важких дірок із значеннями, що передбачає теорія.

Розрахунок

Розрахунок концентрацій легких дірок залежно від складу твердого розчину Cd_xHg_{1-x}Te та концентрації важких дірок проводили на підставі розв'язку рівняння електро-нейтральності за різних значень концентрації акцепторів N_A

$$n + N_A = p + p_1. \quad (4)$$

Концентрації електронів (n), легких та важких дірок розраховували як функції густини станів відповідних зон та енергії Фермі на підставі відомого співвідношення

$$n_\alpha = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0^\alpha}{\partial \varepsilon} \right) k_\alpha^3(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (5)$$

де f_0^α та $k_\alpha(\varepsilon)$ – функція Фермі-Дірака та закон дисперсії для відповідного типу носіїв α .

Під час розрахунків було прийнято, що зона важких дірок є параболічною, з постійною ефективною масою $m_h^* = 0,63 m_0$, а зону легких дірок розглядали як дзеркальне відображення зони провідності і тому для їх опису використовували тризонну модель Кейна [3]. Необхідне для розрахунків значення матричного елемента взаємодії зон визначали за методикою [6] так, щоб при вибраному значенні m_h^* у випадку Cd_xHg_{1-x}Te (x= 0,2) з власною провідністю (n=p) концентрація носіїв відповідала відомим літературним даним [8]. Для залежності ширини забороненої зони від складу і температури було використано

співвідношення [8]. Розраховані залежності концентрації легких дірок та важких дірок при 77 К від складу $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ для різних значень концентрації акцепторів зображено на рис.2

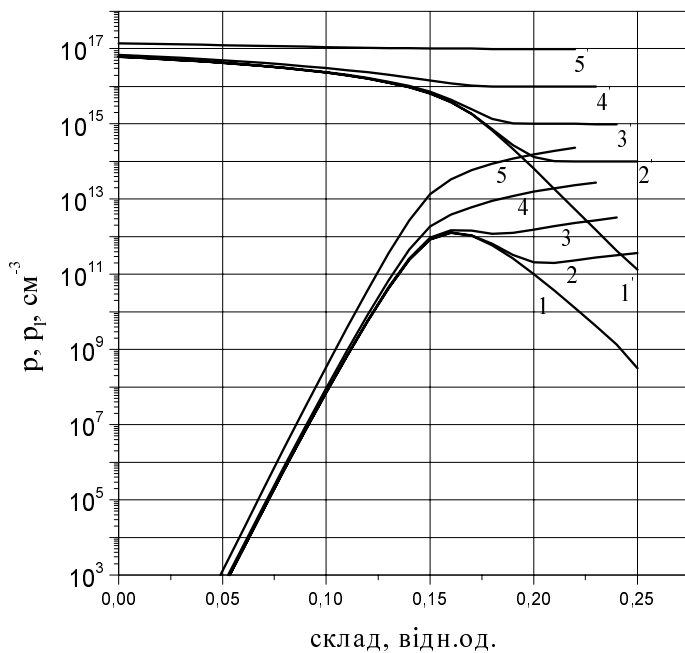


Рис.2. Залежність концентрації легких (1–5) та важких (1'–5') дірок при 77 К в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ від складу при різних значеннях концентрації акцепторів: 1, 1' – $N_A=0$; 2, 2' – $N_A=10^{14}\text{ см}^{-3}$; 3, 3' – $N_A=10^{15}\text{ см}^{-3}$; 4, 4' – $N_A=10^{16}\text{ см}^{-3}$; 5, 5' – $N_A=10^{17}\text{ см}^{-3}$.

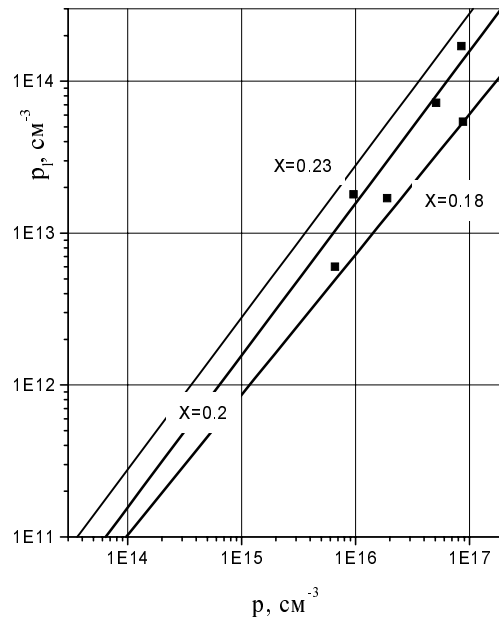


Рис.3. Залежність концентрації легких дірок від концентрації важких дірок у p - $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при 77 К для різних складів твердого розчину: суцільні лінії – теоретичні значення; точки – дані експерименту.

Вигляд кривих на рис.2 зумовлений перебудовою зонної структури в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ при зміні складу твердого розчину. Зокрема, різке зменшення концентрації легких дірок під час переходу від складу $x=0,16$ до чистого HgTe при 77 К пояснюється тим, що для цих складів $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ є безщілинним напівпровідником, в якому зона важких дірок дотикається зони провідності, а зона легких дірок відділена зазором $E_g = E(\Gamma_6) - E(\Gamma_8)$, який відіграє для легких дірок роль забороненої зони.

Для порівняння експериментально визначених концентрацій легких та важких дірок з розрахунковими даними на рис.3 показані залежності концентрації легких дірок від концентрації важких дірок для трьох складів $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (точки – експериментальні значення). Як видно, дані експерименту цілком задовільно узгоджуються з розрахованими значеннями.

Висновки

На основі аналізу досліджених польових залежностей коефіцієнта Холла в однорідних зразках p - $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ($x=0,2-0,23$) при 77 К в області домішкової провідності визначені концентрації і рухливості важких та легких дірок. Проведено порівняння експериментальних значень з результатами теоретичних розрахунків залежностей концентрації легких дірок від концентрації важких дірок і отримано добре узгодження даних експерименту та теорії. Визначені параметри легких дірок дають можливість оцінювати вклад легких дірок в

польові залежності коефіцієнта Холла в багатошарових $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ структурах, до складу яких входять шари р-типу провідності.

- [1] Meyer J.R., Hoffman C.A., Bartoli F.J. et al. // *Semicond.Sci.Technol.* 1993. 8. P.805–823.
- [2] Meyer J.R., Hoffman C.A., Antoszewski J., Faraone L. // *J.Appl.Phys.* 1997. 81. P.709–713.
- [3] Dornhaus R., Nimtz.G. // *Springer Tracts in Modern Physics.* 1982. 98. P.119–309.
- [4] Gold M.C., Nelson D.A. // *J.Vac.Sci.Technol.* 1986. A4. P.2040–2046.
- [5] Берченко Н.Н., Ижнина Н.Ю. // *Изв. вузов.Физика.* 1988. С.115–117.
- [6] Ижнин И.И. // Автореф. дис. ...канд. физ.-мат. наук. Львов, 1983.
- [7] Tobin S.P., Pultz G.N., Krueger E.E. et al. // *J.Electr.Mat.* 1993. 22. P.907–921.
- [8] Higgins W.M., Pultz G.N., Roy R.G. // *J.Vac.Sci.Technol.* 1989. A7. P.271–275.

УДК 537.311.322

Сиротюк С.В., Кинаш Ю.Є., Краєвський С.Н.

ДУ “Львівська політехніка”, кафедра напівпровідникової електроніки

ПРО ВАЖЛИВІСТЬ БАЗИСНОГО ВРАХУВАННЯ ОСТОВНО-ВАЛЕНТНИХ КОРЕЛЯЦІЙ В ЗАДАЧІ ПРО ЕЛЕКТРОННИЙ ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР НАПІВПРОВІДНИКІВ

© Сиротюк С.В., Кинаш Ю.Є., Краєвський С.Н., 2000

Розраховані електронні енергетичні зони GaP у наближенні функціоналу локальної електронної густини. Матриця гамільтоніану обчислювалась у змішаному базисі, який включає функції Блоха глибоких електронів та плоскі хвилі. Отримані зонні енергії краще узгоджуються з експериментом, ніж розраховані за методом атомних апріорних псевдопотенціалів. Зроблений висновок про важливість врахування в розрахунках енергетичних зон напівпровідників остовно-валентних кореляцій.

The electronic energy bands of GaP have been evaluated by means of the local electronic density functional approximation. The Hamiltonian matrix has been calculated on mixed basis including the core Bloch states and plane waves. The band energies obtained here are in better agreement with experiment than ones calculated within the atomic norm-conserving *ab initio* pseudopotential approach. The conclusion about importance of the core-valence correlation accounting in the energy band calculations has been made.