

PACS: 72.80.Ey, 72.80.Cw, 71.23.-k

М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВСЕСТОРОННЕГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ  
СТЕПЕНИ ВЛИЯНИЯ ФЛУКТУАЦИОННОГО ПОТЕНЦИАЛА  
НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА  
В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Институт физики Дагестанского научного центра РАН  
ул. М. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия  
E-mail: i.daunov@mail.ru

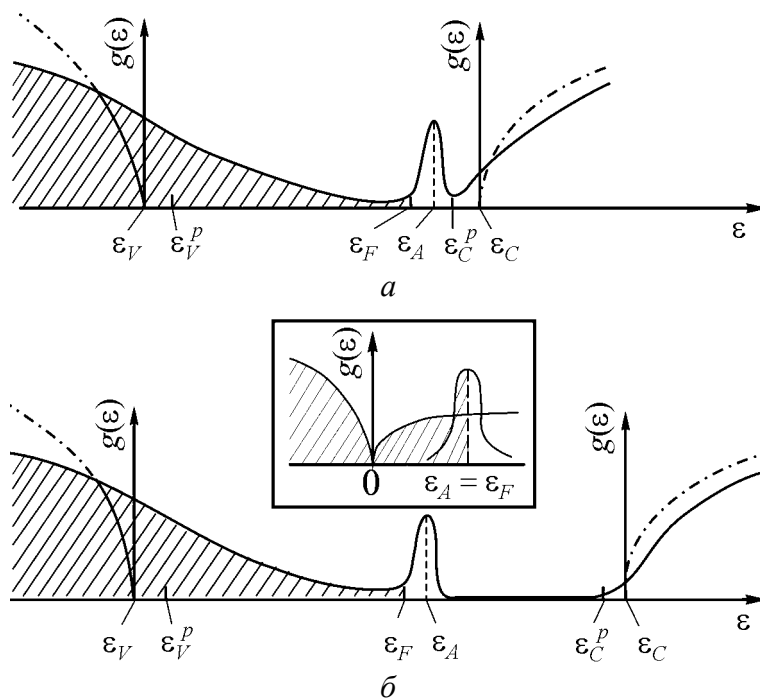
*Предлагается способ оценки корректности применения соотношений, полученных для энергетического спектра бездефектного кристалла, при анализе результатов эксперимента в легированных компенсированных кристаллах полупроводников, основанный на сравнении рассчитанных по данным об электронном транспорте при всестороннем давлении производных энергетических зазоров от давления  $d\varepsilon_i/dP$  с известными величинами. Проанализированы экспериментальные данные и результаты количественного анализа в  $Ge(Au, Sb)$ , квазибесщелевом  $CdSnAs_2(Cu)$  и бесщелевом  $p-HgTe$  полупроводниках. Выяснено, что величины  $d\varepsilon_i/dP$  энергетических зазоров, рассчитанные согласно известным законам дисперсии, с понижением температуры и увеличением давления аномально завышаются или занижаются ввиду усиливающегося влияния флуктуационного потенциала на энергетический спектр носителей заряда.*

Известно [1,2], что в легированных компенсированных полупроводниках, когда концентрация свободных носителей заряда мала по сравнению с концентрацией ионизированных примесных центров, возникают плавные крупномасштабные флуктуации случайного потенциала с типичным значением амплитуды  $\gamma$ . Влияние хаотического потенциала усиливается с понижением температуры, а при фиксированной температуре под воздействием давления – с уменьшением концентрации свободных носителей заряда [3]. Очевидно, актуален поиск способа оценки степени влияния хаотического потенциала на энергетический спектр носителей заряда и корректности применения соотношений, выведенных для бездефектного кристалла, с целью количественного анализа результатов эксперимента в каждом конкретном случае.

В связи с обсуждаемой проблемой отметим следующее. В полупроводниках при не очень высоких давлениях производные энергетических зазоров от давления  $d\varepsilon_i/dP$  практически не зависят от давления. Смещения идентичных, наиболее глубоких минимумов зоны проводимости  $\varepsilon_\Gamma$ ,  $\varepsilon_L$ ,  $\varepsilon_X$  в разных полу-

проводниках IV, II–VI, III–V, IV–VI и II–IV–V<sub>2</sub> приблизительно одинаковы [4–8]. В [5] определены  $d\varepsilon_i/dP$  экстремумов  $\varepsilon_V$ ,  $\varepsilon_L$ ,  $\varepsilon_X$  относительно абсолютного вакуума с использованием концепции независимости энергии глубоких сильно локализованных состояний от всестороннего давления в некоторых полупроводниках.

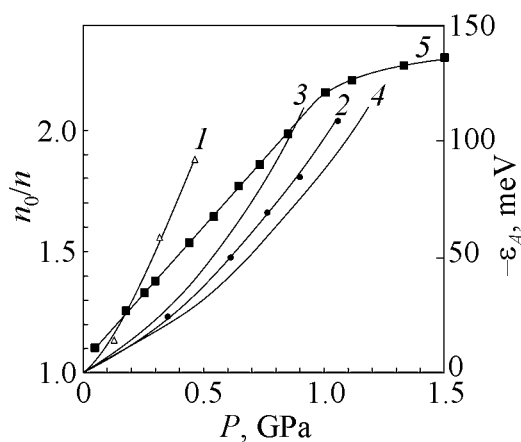
В так называемых квазибесщелевых полупроводниках [6] вблизи края собственной зоны расположена глубокая примесная зона, например в легированных компенсированных  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) [7] (рис. 1) и  $p$ -InAs с концентрацией избыточных акцепторов  $N_{\text{ext}} < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  [8]. Применение закона дисперсии для идеального полупроводника к полупроводнику со случайным потенциалом корректно до тех пор, пока вычисленная по результатам комплексного исследования электронного транспорта и соответствующих соотношений зависимость энергетических зазоров от всестороннего давления  $\Delta\varepsilon(P)$  близка к линейной. Возрастающее с понижением температуры и уменьшением концентрации свободных носителей заряда отклонение зависимости  $\Delta\varepsilon(P)$  от линейности свидетельствует о существенном влиянии случайного потенциала на закон дисперсии.



**Рис. 1.** Плотность состояний (схематически) сильнолегированного компенсированного полупроводника с глубокой акцепторной зоной  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) с коэффициентом заселенности акцепторной зоны  $K_A \approx 0$  при атмосферном (а) и всестороннем (б) давлениях. На вставке – плотность состояний слаболегированного и умеренно компенсированного бесщелевого полупроводника  $p$ -HgTe.  $\varepsilon_V$ ,  $\varepsilon_C$  – невозмущенные энергии вершины валентной зоны и дна зоны проводимости;  $\varepsilon_A$ ,  $\varepsilon_F$  – энергии глубокого акцепторного уровня и уровня Ферми;  $\varepsilon_V^p$ ,  $\varepsilon_C^p$  – энергии уровней протекания для дырок валентной зоны и электронов зоны проводимости. Штрихпунктирная линия – ход плотности состояний в идеальном кристалле. Заполненные состояния заштрихованы

В качестве примера рассмотрим ситуацию в кристаллах  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu), в которых был обнаружен глубокий акцепторный уровень (зона) собственного дефекта вакансии кадмия, расположенный на хвосте зоны проводимости (рис. 1) [3]. Здесь и далее характеристические параметры носителей заряда и  $d\varepsilon_i/dP$  рассчитывали по данным комплексных исследований кинетических коэффициентов, в частности по температурным, магнитополевым и барическим зависимостям коэффициента Холла и удельной электропроводности. Из рис. 2 видно, что в образце № 10  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) зависимость  $\varepsilon_A(P)$  при  $P > 10$  kbar существенно ослабляется, т.е. величина  $d\varepsilon_i/dP$  начинает зависеть от давления и аномально занижается, что обусловлено влиянием хаотического потенциала на энергетический спектр уже при  $T = 295$  К. В этом образце коэффициент заселенности  $K_A$  глубокой акцепторной зоны близок к нулевой величине, что и объясняет столь сильное влияние хаотического потенциала. В кристаллах  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) с  $K_A > 0$  влияние случайного потенциала выражено слабее и, по крайней мере, при  $T = 77.6$  К вблизи атмосферного давления влиянием случайного потенциала на энергетический спектр можно пренебречь [3,6].

Аналогичное аномальное убывание  $\partial|\varepsilon_A|/\partial P$  с понижением температуры от 295 до 77.6 К, обусловленное усиливающимся влиянием хаотического потенциала на энергетический спектр носителей заряда, наблюдается также в  $p$ -InAs с  $N_{\text{ext}} < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  [8].



**Рис. 2.** Зависимости нормализованных к атмосферному давлению концентраций электронов от всестороннего давления образца  $p$ -HgTe с  $N_A - N_D = 3.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  при  $T = 82$  К (кривая 1) и  $T = 297$  К (кривые 2–4). Точки – расчет по  $R(H, P)$ . Сплошные линии – теория для величин барического коэффициента  $\partial\varepsilon_g/\partial P$ , meV/GPa: 1 – 220, 2 – 85, 3 – 110, 4 – 80. Кривая 5 – зависимость энергии уровня глубокого акцептора  $\varepsilon_A$  при 280 К от давления для образца № 10  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu)

на энергетический спектр носителей заряда, наблюдается также в  $p$ -InAs с  $N_{\text{ext}} < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  [8].

Из данных [9] (таблица) для Ge(Au) и [10] для Ge(Cu) следует, что значения  $d\varepsilon_i/dP$  как будто убывают по мере удаления уровня энергии примесного центра от края валентной зоны. Отметим лишь кратко, что имеются две причины, приводящие к занижению  $\beta_{CL} = \partial(E_{CL} - E_i)/\partial P$  в области электронной проводимости и  $\beta_V = \partial(E_i - E_V)/\partial P$  в области дырочной проводимости. Это, во-первых, необходимость применения статистики Гиббса, что не было корректно учтено в [10]. В работе [9] было принято во внимание это обстоятельство, и для получения достоверных результатов в Ge(Au) измерения зависимости удельного сопротивления от давления проводили при низких температурах. Од-

нако в легированном и компенсированном германии такие слаборастворимые примеси, как Au, Hg и Cu, с высокой степенью вероятности создают кластеры.

Таблица

**Значения производных энергетических зазоров  $d\varepsilon_i/dP$  от давления для четырех уровней золота в германии\***

Уровень	Тип	$\varepsilon_C - \varepsilon_i$ , eV	$\partial(\varepsilon_{CL} - \varepsilon_i)/\partial P$ , meV/GPa	$T$ , К
$\varepsilon_4$	Акцептор	0.043	21	45–49.3
$\varepsilon_3$		0.19	29 (44 <sup>**</sup> )	112–194
$\varepsilon_2$		0.60	44	170–273
$\varepsilon_1$	Донор	0.71	49	49.5
$\varepsilon_V$		0.75	50	

\* По зависимостям удельного сопротивления от давления до 0.7 GPa [9].

\*\* По зависимостям удельного сопротивления и коэффициента Холла от давления до 7 GPa при 300 К [11].

При убывании температуры и увеличении давления концентрация свободных носителей заряда уменьшается, амплитуда случайного потенциала и соответственно флуктуационное искривление зон возрастают. Это неизбежно ведет к занижению  $d\varepsilon_i/dP$ , рассчитанных по барической зависимости концентрации носителей заряда, что иллюстрируется данными, приведенными в таблице. Очевидно также, что степень влияния хаотического потенциала тем сильнее, чем ближе к краю собственной зоны находится уровень энергии глубокого примесного центра и чем ниже температура (таблица). Согласно [5] значения  $d\varepsilon_i/dP$  между уровнями золота 2–4 и дном зоны проводимости  $\beta_{CL} = 44$  meV/GPa, а между уровнем золота 4 и потолком валентной зоны  $\beta_V = -6$  meV/GPa. Барический коэффициент ширины запрещенной зоны  $\partial\varepsilon_g/\partial P = \beta_{CL} - \beta_V = 50$  meV/GPa.

При определении значений  $d\varepsilon_i/dP$  необходим также детальный анализ данных оптических и других свойств полупроводников. В [12,13] по данным исследований оптических свойств в халькопиритных полупроводниках I–III–VI<sub>2</sub> и II–IV–V<sub>2</sub> приводятся заниженные значения барического коэффициента ширины запрещенной зоны.

В вышеперечисленных полупроводниках с увеличением всестороннего давления энергетические зазоры возрастают, а усиливающееся влияние хаотического потенциала с понижением температуры и концентрации свободных носителей заряда приводит к аномальному занижению значений  $d\varepsilon_i/dP$ .

В отличие от обычных полупроводников в бесщелевых полупроводниках с инверсной зонной структурой, например в *p*-HgTe (рис. 1),  $\beta = \partial|\varepsilon_g|/\partial P < 0$  ( $\varepsilon_g = \varepsilon_{\Gamma_6} - \varepsilon_{\Gamma_8}$ ) [14]. По экспериментальным данным о температурных, барических и магнитопольных зависимостях коэффициента Холла  $R(T, H, P)$  и

удельной электропроводности  $\sigma(T, H, P)$  был рассчитан коэффициент  $\beta$  для слаболегированного образца  $p$ -HgTe-2 [15] и сильнолегированного образца  $p$ -HgTe (рис. 2) [16]. В слаболегированном образце  $p$ -HgTe-2 при температурах 295 и 77.6 К коэффициент  $\beta = -(121 \pm 2) \text{ meV/GPa}$ , при 4.2 К  $\beta = -220 \text{ meV/GPa}$ ; в сильнолегированном образце  $p$ -HgTe (рис. 2) при  $T = 295 \text{ К}$   $\beta = -85 \text{ meV/GPa}$ , при  $T = 77.6 \text{ К}$   $\beta = -210 \text{ meV/GPa}$ . В образце  $p$ -HgTe с  $N_A - N_D = 3.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  положение уровня Ферми задается статистикой дырок валентной зоны и практически не зависит от давления ( $p \gg n$ ). Оценки сделаны с использованием известных сведений об энергетическом спектре носителей заряда и о величинах зонных параметров, приведенных в [14].

Полученные значения коэффициента  $\beta$  для образца  $p$ -HgTe-2 при 77.6 и 295 К и для образца  $p$ -HgTe при 295 К согласуются с известными данными [14,15]. Однако с понижением температуры рассчитанный коэффициент  $|\beta|$  аномально возрастает, причем в образце  $p$ -HgTe-2 с большей степенью беспорядка при более высоких температурах. Эта тенденция не зависит от того, является ли образец сильно- или слаболегированным, и обусловлена существенным влиянием случайного потенциала на электронный спектр бесщелевых полупроводников при низких температурах.

### Выводы

По результатам количественного анализа данных об электронном транспорте при всестороннем давлении в легированных компенсированных обычных, квазибесщелевых и бесщелевых полупроводниках выяснено: значения  $d\varepsilon_i/dP$ , рассчитанные согласно известным законам дисперсии, с понижением температуры и увеличением давления аномально завышаются или занижаются ввиду усиливающегося влияния флуктуационного потенциала на энергетический спектр носителей заряда. Таким образом, всестороннее давление является уникальным внешним воздействием, позволяющим определить степень влияния хаотического потенциала на энергетический спектр носителей заряда и оценить адекватность интерпретации экспериментальных данных.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 07-02-00238).

1. *Б.И. Шкловский, А.А. Эфрос*, Электронные свойства легированных полупроводников, Наука, Москва (1979).
2. *В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, А.Г. Кайпер, Р. Эндерлайн, Б. Эссер*, Электронная теория неупорядоченных полупроводников, Наука, Москва (1981).
3. *М.И. Даунов, А.Б. Магомедов, В.И. Данилов*, ФТП **26**, 467 (1991).
4. *W. Paul*, J. Appl. Phys. **32**, 2082 (1961).
5. *М.И. Даунов, И.К. Камиров, С.Ф. Габиров*, ФТТ **46**, 1766 (2004).

6. М.И. Даунов, И.К. Камиров, В.А. Елизаров, А.Б. Магомедов, В.И. Данилов, Докл. РАН **357**, 612 (1997).
7. М.И. Даунов, И.К. Камиров, А.Б. Магомедов, ЖЭТФ **111**, 562 (1997).
8. М.И. Даунов, И.К. Камиров, А.Б. Магомедов, А.Ш. Киракосян, ФТП **33**, 36 (1999).
9. M.G. Holland, W. Paul, Phys. Rev. **128**, 43 (1962).
10. Е.Г. Пель, В.И. Фистуль, А. Ягшигельдыев, А.Г. Яковенко, ФТП **14**, 1220 (1980).
11. М.И. Даунов, И.К. Камиров, С.Ф. Габиров, ФТП **35**, 59 (2001).
12. In-Hwan Chor, P.Y. Yu, Phys. Status Solidi **B211**, 143 (1999).
13. In-Hwan Chor, P.Y. Yu, Phys. Status Solidi **B235**, 307 (2003).
14. I.M. Tsidilkovski, G.I. Harus, N.G. Shelushinina, Adv. Phys. **34**, 43 (1985).
15. J. Stankiewicz, W. Giriat, Phys. Rev. **B13**, 665 (1976).
16. M.I. Daunov, E.L. Broyda, Phys. Status Solidi **B55**, K155 (1973).

*М.И. Даунов, И.К. Камиров, С.Ф. Габиров*

#### ВИКОРИСТАННЯ ВСЕБІЧНОГО ТИСКУ ДЛЯ ОЦІНКИ СТУПЕНЯ ВПЛИВУ ФЛУКТУАЦІЙНОГО ПОТЕНЦІАЛУ НА ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР НОСІЇВ ЗАРЯДУ В КРИСТАЛІЧНИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

Пропонується спосіб оцінки коректності застосування співвідношень, отриманих для енергетичного спектру бездефектного кристала, при аналізі результатів експерименту в легованих компенсованих кристалах напівпровідників, заснований на порівнянні розрахованих по даним про електронний транспорт при всебічному тиску похідних енергетичних зазорів від тиску  $d\varepsilon_i/dP$  з відомими величинами. Проаналізовано експериментальні дані і результати кількісного аналізу в Ge(Au, Sb), квазібезщільному CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) і безщільному *p*-HgTe напівпровідниках. З'ясовано, що величини  $d\varepsilon_i/dP$  енергетичних зазорів, розраховані згідно з відомими законами дисперсії, з пониженням температури і збільшенням тиску аномально завищуються або занижуються внаслідок зростаючого впливу флуктуаційного потенціалу на енергетичний спектр носіїв заряду.

*M.I. Daunov, I.K. Kamilov, S.F. Gabibov*

#### APPLICATION OF HYDROSTATIC PRESSURE FOR ESTIMATION OF THE EXTENT OF FLUCTUATION POTENTIAL EFFECT ON ENERGY SPECTRUM OF CHARGE CARRIERS IN CRYSTALLINE SEMICONDUCTORS

A method is proposed to estimate the correctness of application of relationships derived for the energy spectrum of defect-free crystal during the analysis of experimental results for doped compensated crystals of semiconductors. The method is based on comparison of derivatives of the energy gaps versus pressure  $d\varepsilon_i/dP$  calculated using data on electron transport under uniform pressure and the known values. Experimental data and results of quantitative analysis in Ge(Au, Sb), quasi-gap free CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) and gap-free *p*-HgTe semiconductors have been analysed. It has been determined that the  $d\varepsilon_i/dP$  values of en-

ergy gaps calculated by the known dispersion laws increase or decrease, with temperature decrease and pressure increase, because of growing influence of fluctuation potential on the energy spectrum of charge carries.

**Fig. 1.** Schematic diagram of the density of states (DOS) in heavily doped compensated semiconductor ( $p$ -CdSnAs<sub>2</sub>(Cu)) with a deep acceptor band with nearly zero occupancy  $K_A \approx 0$  at atmospheric ( $a$ ) and elevated hydrostatic ( $b$ ) pressure (the inset shows the DOS for the slightly doped, moderately compensated gapless semiconductor  $p$ -HgTe.  $\varepsilon_V, \varepsilon_C$  are unperturbed energies of the valence-band top and conduction-band bottom, respectively;  $\varepsilon_A, \varepsilon_F$  are the energies of a deep acceptor level and the Fermi level, respectively;  $\varepsilon_V^p, \varepsilon_C^p$  are the energies of percolation levels for holes in the valence band and electrons in the conduction band, respectively; the dash-dot curve indicates the DOS in the ideal crystal; cross-hatched regions correspond to occupied states

**Fig. 2.** Plots of the electron concentration (normalized to that at atmospheric pressure) versus hydrostatic pressure for  $p$ -HgTe with  $N_A - N_D = 3.7 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ : as determined from the pressure dependence of  $R(H, P)$  at  $T = 82$  (curve 1) and 297 K (curves 1–4). Solid lines – theory for  $\partial\varepsilon_g/\partial P$  values, meV/GPa: 1 – 220, 2 – 85, 3 – 110, 4 – 80. Curve 5 – pressure dependence of the deep acceptor level  $\varepsilon_A$  at 280 K for CdSnAs<sub>2</sub>(Cu) (sample № 10)