

PACS: 72.20.-i

Р.К. Арсланов<sup>1</sup>, М.М. Гаджиалиев<sup>1</sup>, М.И. Даунов<sup>1</sup>, Е.В. Картунова<sup>2</sup>,  
П.П. Хохлачев<sup>1</sup>, П.П. Шванский<sup>2</sup>

## ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ЦИНКИТА ПРИ НОРМАЛЬНОМ И ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

<sup>1</sup>Институт физики Дагестанского научного центра РАН  
ул. Ярагского, 94, г. Махачкала, 367003, Россия  
E-mail: fvd@xtreem.ru

<sup>2</sup>Всесоюзный научно-исследовательский институт синтеза минерального сырья  
г. Александров, Владимирская обл.

*На объемных монокристаллических образцах  $n$ -ZnO, выращенных гидротермальным методом, с концентрацией электронов  $10^{13}$ – $10^{17}$   $\text{см}^{-3}$  измерены электропроводность  $\sigma$  и коэффициент Холла  $R_H$  при атмосферном давлении в интервале температур 77–400 К и гидростатическом давлении до  $P = 7$  GPa при 300 К. Установлено, что характер кинетических свойств оксида цинка определяется мелким водородоподобным донором, энергия ионизации которого  $E_d = (0.052 - 2.76 \cdot 10^{-8} N_d^{1/3} + 0.005P)$  eV.*

### 1. Введение

Наметившийся в последние годы прогресс в росте кристаллов ZnO и их уникальные физические характеристики (высокое значение коэффициента электромеханической связи, большая ширина запрещенной зоны, люминесцентные свойства, радиационная стойкость и др.) [1] делают актуальным исследование электронного спектра и транспорта в этом соединении. Тем не менее данных о кинетических явлениях, полученных на объемных кристаллах, недостаточно. Следует отметить противоречивость приводимых в литературе величин зонных параметров [1–3]. В частности, значение эффективной массы электронов варьирует от  $0.06m_0$  до  $0.5m_0$ , барический коэффициент ширины запрещенной зоны  $dE_g/dP$  – от 6 до 20 meV.

### 2. Экспериментальные результаты и их обсуждение

В интервале температур 77–400 К на объемных кристаллах  $n$ -ZnO с концентрацией примесей  $10^{17}$ – $10^{18}$   $\text{см}^{-3}$  измерены кинетические коэффициенты: электропроводность  $\sigma$  и коэффициент Холла  $R_H$  при атмосферном и гид-

ростатическом (до  $P = 7$  GPa) давлениях. Методика и техника эксперимента описаны в [4]. Монокристаллы выращены гидротермальным методом [1] в концентрированных растворах щелочей на моноэдрических затравках при температурах кристаллизации 330–350°C, давлении 30–50 МПа и прямом перепаде температур 6–20 градусов между камерами роста и растворения автоклава. Длительность цикла выращивания кристаллов 130–150 д.

Основные характеристики некоторых образцов цинкита приведены в таблице. Результаты эксперимента представлены на рис. 1, 2.

Таблица

Коэффициент Холла, холловская подвижность и характеристические параметры образцов *n*-ZnO

Образцы	$ R_H , \text{cm}^3/\text{C}$		$\mu_H, \text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$		$N_d, 10^{-18} \text{cm}^{-3}$	$N_a, 10^{-18} \text{cm}^{-3}$	$E_d, \text{meV}$
	77.4 К	300 К	77.4 К	300 К			
2.3	42800	350	142	150	0.20	0.164	35.7
2.2	35400	395	155	130	0.27	0.24	30.8
3.1	5994	91	77	105	0.79	0.59	26.4

Известно [1], что характер кинетических свойств оксида цинка определяется мелким водородоподобным донором, уровень энергии которого расположен под дном зоны проводимости на расстоянии  $E_d \approx 50$  meV при нормальном давлении [1].

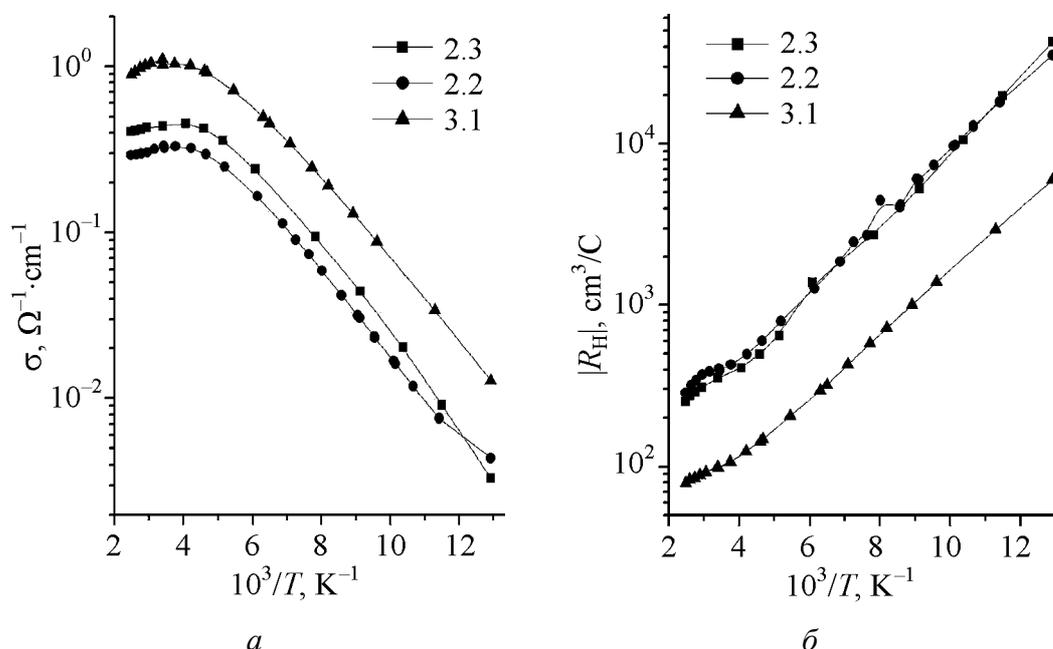
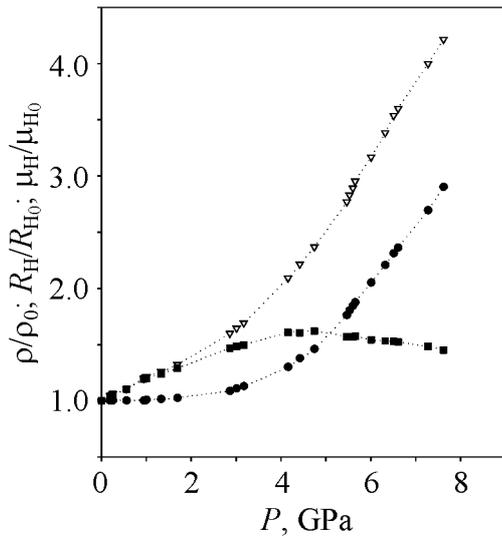


Рис. 1. Температурная зависимость электропроводности (а) и коэффициента Холла (б) образцов ZnO при атмосферном давлении



**Рис. 2.** Зависимости нормализованного удельного сопротивления  $\rho/\rho_0$  ( $\bullet$ ), коэффициента Холла  $R_H/R_{H_0}$  ( $\nabla$ ) и холловской подвижности  $\mu_H/\mu_{H_0}$  ( $\blacksquare$ ) от давления при  $T = 300$  К образца ZnO с  $R_H = -25$  см<sup>3</sup>/C,  $\rho = 0.16$  Ω·см и  $\mu_H = 156$  см<sup>2</sup>/V·с

Всестороннее давление вследствие сокращения расстояния между примесными центрами и соответственно возрастания их концентрации  $N_i$  – объемно-концентрационный эффект [5] – способствует «металлизации» полупроводников. Однако в полупроводниках значительно сильнее изменяется эффективный боровский радиус. На рис. 2 приведены барические зависимости коэффициента Холла, удельного сопротивления и холловской подвижности монокристаллического  $n$ -ZnO с  $R_H = -25$  см<sup>3</sup>/C,  $\rho = 0.16$  Ω·см и  $\mu_H = 156$  см<sup>2</sup>/V·с при  $T = 300$  К.

По зависимости  $R_H(P)$ , носящей экспоненциальный характер, выяснено, что этот уровень удаляется от дна зоны проводимости со скоростью  $\partial E_d/\partial P = 5$  meV/GPa. Далее по соотношениям (1)–(5) и по известным значениям [3]  $E_g(P = 0) = 3.25$  eV,  $\partial E_g/\partial P = 0.02$  eV/GPa,  $B = 500$  GPa получено  $(\partial\chi/\partial P)\chi^{-1} = -0.029$ .

$$E_d = (0.052 + 0.005P) \text{ eV/GPa}, \quad (2)$$

$$m = m(P = 0)[1 + \Delta E_g/E_g], \quad (3)$$

$$(\partial E_d/\partial P)E_d^{-1} = -2(\partial\chi/\partial P)\chi^{-1} + (\partial m/\partial P)m^{-1}, \quad (4)$$

$$N_i = N_i(P = 0)(1 + PB^{-1}), \quad (5)$$

здесь  $P$  – всестороннее давление,  $m$  – эффективная масса электронов,  $\chi$  – диэлектрическая постоянная,  $B$  – объемный модуль.

Температурная зависимость холловской подвижности  $\mu_H(T)$  в интервалах температур 77–120 и 250–400 К указывает на то, что в первом интервале доминирует рассеяние электронов на ионах примеси, а во втором – на колебаниях решетки.

По температурной зависимости коэффициента Холла (рис. 1,б) и уравнению электронейтральности

$$n + N_a = N_d[1 + \beta^{-1}\exp(\varepsilon_d + \eta)]^{-1} \quad (1)$$

определены энергия ионизации донорного примесного центра  $E_d = (0.052 - 2.76 \cdot 10^{-8} N_d^{1/3})$  eV и концентрации доноров  $N_d$  и компенсирующих акцепторов  $N_a$  (таблица). Здесь  $\varepsilon_d = E_d/k_0T$  и  $\eta = E_F/k_0T$  – приведенные энергии донорного центра Ферми,  $k_0$  – постоянная Больцмана.

Таким образом, при возрастании давления от нормального до  $P = 1$  GPa боровский радиус убывает на 6.6%, в то время как среднее расстояние между примесными центрами сокращается менее чем на 0.1% (объемно-концентрационный эффект [5]), т.е. имеет место выраженная тенденция к локализации электронов на мелких донорах с ростом давления.

Данный эффект особенно сильно проявляется в алмазоподобных прямозонных с кейновским законом дисперсии узкозонных полупроводниках  $n$ -типа III–V InSb, InAs и II–IV–V<sub>2</sub> CdSnAs<sub>2</sub>, CdGeAs<sub>2</sub>. В этих полупроводниках с учетом полученной экспериментально барической зависимости диэлектрической проницаемости  $\chi(P)$  [6]:

$$a_B = a_{B_0} \left\{ \left[ 1 + \left( d\varepsilon_g / dP \right) P / \varepsilon_{g_0} \right] \left( 1 + \Theta P / \varepsilon_{g_0} \right) \right\}^{-1}. \quad (6)$$

Здесь  $\Theta = 0.025$  eV/GPa, значок «0» соответствует атмосферному давлению. Согласно (6) в  $n$ -InSb, например, при увеличении давления до 1 GPa  $a_B$  убывает в 1.9 раза, пороговая величина концентрации доноров  $N_i^{(M)}$  перехода металл–диэлектрик (переход Мотта) возрастает в 7 раз, а энергия основного состояния донора – более чем в 2 раза. При определенном уровне легирования и компенсации вследствие эффекта барического «вымораживания» (аналог магнитного «вымораживания») носителей заряда на примесные центры могут наблюдаться фазовый переход металл–диэлектрик и переход от состояния сильного легирования к состоянию слабого легирования.

### 3. Заключение

Выяснено на примере цинкита, что воздействие всестороннего давления, несмотря на сближение примесных центров, приводит к локализации электронов в прямозонных полупроводниках, т.е. наблюдается специфический эффект барического «вымораживания» электронов (аналог магнитного «вымораживания»). Тенденция к локализации электронов с увеличением давления должна быть существеннее в узкозонных прямозонных с Кейновским законом дисперсии полупроводниках из-за возрастания эффективной массы электронов.

Значительно меньшая величина коэффициента давления донорного уровня ZnO (5 meV/GPa) в сравнении с барическим коэффициентом ширины запрещенной зоны (20 meV/GPa [3]) означает, что этот примесный центр является мелким водородоподобным донором [7,8].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 02-02-17888).

1. И.П. Кузьмина, В.А. Никитенко, Окись цинка, Наука, Москва (1984).
2. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ. Справочник, Наука, Москва (1979).

3. П.Ю.М. Кардона, Основы физики полупроводников, Физматлит, Москва (2002).
4. А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, М.И. Даунов, Л.А. Сайпулаева, ФТВД **13**, № 1, 29 (2003).
5. М.И. Даунов, А.Б. Магомедов, А.Э. Рамазанова, ФТП **19**, 936 (1985).
6. М.И. Даунов, А.Б. Магомедов, А.Э. Рамазанова, Изв. вузов, Физика **29**, № 8, 98 (1986).
7. М.И. Даунов, И.К. Камиллов, С.Ф. Габибов, ФТП **35**, 59 (2001).
8. M.I. Daunov, I.K. Kamilov, S.F. Gabibov, R.Rh. Akchurin, Phys. Status Solidi **B223**, 529 (2001).

R.K. Arslanov, M.M. Gadjialiev, M.I. Daunov, E.B. Kortunova, P.P. Hohlachev, P.P. Shvansky

### ELECTRONIC TRANSPORT MONOCRYSTAL ZnO AT NORMAL AND A HIGH PRESSURE

On bulk crystal samples *n*-ZnO, grown up by a hydrothermal method, with concentration of electron  $10^{13}$ – $10^{17}$  cm<sup>-3</sup> are measured conductivity  $\sigma$  and coefficient of Hall  $R_H$  at atmospheric pressure an interval of temperatures 77–400 K and hydrostatic pressure up to  $P = 7$  GPa under 300 K. It is established, that character of kinetic properties oxide zinc is defined shallow hydrogen-like by the donor energy of ionization that  $E_d = (0.052 - 2.76 \cdot 10^{-8} N_d^{1/3} + 0.005P)$  eV.

**Fig. 1.** The temperature dependence conductivity (*a*) and coefficient Hall (*b*) of samples ZnO under atmospheric pressure

**Fig. 2.** Dependences normalized specific resistance  $\rho/\rho_0$  (●), coefficient Hall  $R_H/R_{H0}$  (∇) and hall mobility  $\mu_H/\mu_{H0}$  (■) from pressure at  $T = 300$  K of sample ZnO with  $R_H = -25$  cm<sup>3</sup>/C,  $\rho = 0.16$  Ω·cm and  $\mu_H = 156$  cm<sup>2</sup>/V·s

**На этом завершаем публикацию материалов VIII Международной конференции «Высокие давления – 2004: Фундаментальные и прикладные аспекты».**