

## Особенности явлений переноса в эпитаксиальных пленках $n\text{-Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$

© Г.В. Бекетов, А.Е. Беляев, С.А. Витусевич, С.В. Каверцев, С.М. Комиренко

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины,  
252650 Киев, Украина

(Получена 11 марта 1996 г. Принята к печати 8 апреля 1996 г.)

Приводятся результаты исследования образцов, полученных путем выращивания методом жидкофазной эпитаксии пленок  $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  на подложке  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ . Показано, что в результате диффузии кадмия из подложки образуется пленка  $\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Hg}_{1-x-y}\text{Te}$  с варизонным слоем вблизи поверхности раздела (эпитаксиальная пленка)–подложка. Обнаружено проявление этой варизонности в явлениях переноса. Из результатов теоретического анализа температурных зависимостей концентрации свободных носителей и их подвижности определена температурная зависимость ширины запрещенной зоны  $E_g(T)$  в линейном приближении по  $T$ . Показано что использование усреднения полуэмпирических зависимостей для крайних по составу тройных соединений в рамках приближения виртуального кристалла может приводить к большим погрешностям при определении  $E_g(T)$  в конкретном полупроводнике.

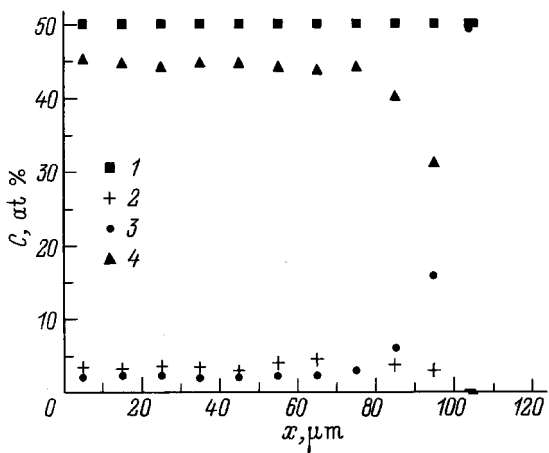
По сравнению с хорошо известными полупроводниками  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ , которые широко используются в современной микроэлектронике, полумагнитные полупроводники системы  $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  (МРТ) обладают рядом преимуществ. Кристаллы МРТ характеризуются относительно высокой стабильностью объемных и поверхностных свойств. Наличие в решетке магнитных ионов Mn позволяет эффективно управлять зонными параметрами материала при помощи магнитного поля. Однако в настоящее время многие вопросы технологии и использования элементной базы на основе узкощелевых полумагнитных полупроводников изучены недостаточно. К таким вопросам, в частности, относится проблема выращивания методом жидкофазной эпитаксии пленок МРТ на широкозонной подложке. Синтез идеальной ( $\text{MnTe}$ ) подложки для выращивания таких пленок оказывается достаточно сложной задачей. Поэтому в качестве подложек используются другие материалы, обладающие наиболее оптимальными для этой цели параметрами. Таким образом, для успешного прогнозирования свойств указанных структур необходимо выяснение степени влияния „неидеальности“ подложки на параметры выращиваемой эпитаксиальной пленки. Решению этой проблемы, в частном случае подложки  $\text{CdZnTe}$ , посвящена настоящая работа.

Слои МРТ выращивались методом жидкофазной эпитаксии на химико-механически полированных подложках  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  (111) А. Монокристаллы  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  выращивались вертикальным методом Бриджмена. Плотность дислокаций в них не превышала  $5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-2}$ . Эпитаксиальные пленки выращивались при температуре 848 К с интервалом охлаждения  $5 \div 15 \text{ К}$ . Затем пленки отжигались в парах ртути при температуре 523 К в течение 100 ч. После отжига электронная концентрация при температуре жидкого гелия составляла примерно  $10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Измерения коэффициента Холла и удельной проводимости

проводились методом Ван-дер-Пау. Перед измерениями поверхность пленок подвергалась травлению в 2%-растворе Вг в диметилформамиде. Однородность по составу контролировалась рентгеновским микроанализатором КАМСКАН. Толщина пленок контролировалась также при помощи интерференционного микроскопа МИИ-4.

Исследования профилей распределения компонент по толщине структуры показало наличие в эпитаксиальной пленке однородно распределенного кадмия. При этом процентный состав кадмия оказывается настолько большим, что, строго говоря, полученные пленки должны рассматриваться как черырёхкомпонентные твердые растворы  $\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Hg}_{1-x-y}\text{Te}$  (КМРТ). На рис. 1 показан профиль распределения компонент в одной из исследованных структур ( $x \approx 0.04$ ,  $y \approx 0.07$ ), которая будет использоваться в дальнейшем в качестве характерного примера. На поверхности раздела подложка–пленка исследуемая структура содержит переходной слой толщиной порядка 30 мкм с большим градиентом по составу. При этом изменение процентного содержания Cd качественно отражает изменение ширины запрещенной зоны по толщине структуры. Таким образом, в отличие от объемных кристаллов, в исследуемых эпитаксиальных пленках ширина запрещенной зоны  $E_g$  (энергетический зазор между экстремумами зон  $\Gamma_6$  и  $\Gamma_8$ ) является функцией не только состава и температуры, но и толщины.

А priori трудно предугадать, в какой мере наличие варизонного слоя проявится в явлениях переноса при температурах, актуальных для использования приборов на основе КМРТ. Поэтому после измерений отожженных структур подложка удалялась химико-динамическим полированием до толщины пленки порядка 10 мкм с тем, чтобы исключить возможное влияние переходного слоя пленка–подложка на измеряемые величины. Было обнаружено, что в области



**Рис. 1.** Распределение содержания  $C$  компонент твердого раствора по толщине структуры. Компоненты: 1 — Te, 2 — Mn, 3 — Cd, 4 — Hg;  $x$  — расстояние от поверхности.

температур  $T > 70\text{ K}$  температурные зависимости холловской концентрации  $n(T)$ , измеренные на пленках с варизонным слоем и без него, заметно отличаются (рис. 2). Аналогичные отличия наблюдаются также и на температурных зависимостях холловской подвижности  $\mu(T)$  (рис. 3). При более низких температурах обе зависимости практически совпадают.

Наблюдаемые отличия зависимостей  $n(T)$  можно качественно объяснить следующим образом. При низкой температуре уровень Ферми находится вблизи дна зоны проводимости и, следовательно, эффективная добавка к плотности электронных состояний, вызванная наличием варизонного слоя, оказывается пренебрежимо малой. С повышением температуры вклад варизонной части возрастает как за счет повышения уровня Ферми, так и за счет более быстрого роста величины  $E_g$  в узкозонной части структуры [1]. На зависимости  $n(T)$  это проявляется в виде увеличения наклона в области собственной проводимости, отражая тот факт, что плотность электронных состояний в зоне проводимости такой варизонной структуры увеличивается быстрее чем в обычном полупроводнике.

Это утверждение можно проиллюстрировать, используя самосогласованный подход к совместному описанию зависимостей  $n(T)$  и  $\mu(T)$ . Даже в объемных образцах КМРТ такая задача является нетривиальной, что связано главным образом с трудностями в определении зависимости  $E_g(T)$ . Как будет показано далее, использование для этих целей известной процедуры усреднения имеющихся полуэмпирических зависимостей для тройных составов [2] может приводить к достаточно большим погрешностям. Поэтому для решения этой задачи мы использовали подход, описанный в [3], где температурная зависимость энергетического зазора

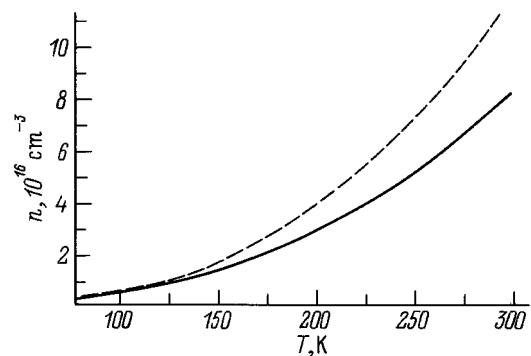
$$E_g = E_{\Gamma_6}^{k=0} - E_{\Gamma_8}^{k=0}$$

определяется из измерений  $n(T)$  на данном кристалле. Затем полученная зависимость используется при теоретическом описании подвижности. К настоящему времени [3–6] можно считать установленным, что при расчете  $\mu$  в диапазоне  $4\text{ K} \leq T \leq 300\text{ K}$  для полупроводников данного класса достаточно учесть три основных механизма рассеяния: рассеяние на ионизированных примесях и на дырках, на потенциале разупорядочения и неупругое рассеяние на оптических фононах. Поскольку при каждой температуре плотность электронных состояний в зоне проводимости существенно, хотя и различным образом, влияет на эффективность указанных механизмов, совпадение теоретически рассчитанной кривой с экспериментом служит хорошим критерием корректности определенных таким образом значений  $E_g(T)$ .

Детали проводимого вариационным методом расчета подвижности [4,7], а также расчета основных энергетических параметров приведены в работе [3]. И использованные параметры материалов и результаты расчетов приведены в таблице. При расчете подвижности мы учли трехмодовый характер фононного спектра, а также температурную зависимость вклада в высокочастотную часть диэлектрической функции от виртуальных межзонных переходов по всей зоне Бриллюэна [8],  $\kappa_{BG} = 10.4 - 10.37y - 3x$  при  $T < 100\text{ K}$  и  $\kappa_{BG} = 6.24 + 0.017(300 - T)$  в диапазоне  $100\text{ K} \leq T \leq 300\text{ K}$ , полагая для  $\text{Mn}_f\text{Hg}_{1-f}\text{Te}$   $\kappa_{BG} = 10.4 - 10.37f$  [9]. Частоты  $\omega_{LO}^{(i)} \approx \omega_{LO}^{(i)}(k_F)$ , где  $k_F$  — волновой вектор электронов на уровне Ферми. Расчет эффективности рассеяния на потенциале разупорядочения проводился в рамках приближения когерентных фаз [5] с использованием усреднения

$$\mu_{\text{dis}} = W [xyd_1^2 + xzd_2^2 + yzd_3^2]^{-1},$$

где  $W$  — некоторая функция, зависящая от энергетических параметров кристалла [5];  $d_i$  — значения потенциалов разупорядочения для твердых растворов  $\text{CdMnTe}$  ( $i = 1$ ),  $\text{CdHgTe}$  ( $i = 2$ ) и  $\text{MnHgTe}$  ( $i = 3$ );



**Рис. 2.** Температурные зависимости концентрации электронов проводимости  $n$  в варизонной структуре (штриховая кривая) и в эпитаксиальной пленке после удаления подложки вместе с варизонным слоем (сплошная кривая).

Использованные параметры материалов

Параметр решетки, $10^{-8}$ см	$a_0 = (6.4605x + 6.3300y + 6.4820z)$	[9],[14]
Матричный элемент кейновской модели, эВ·см	$P = 8.1 \cdot 10^{-8}$	[2]
Величина спин-орбитального расщепления, Эв	$\Delta = 1.08$	[4]
Параметры Латтинжера	$\gamma_1 = 2; \gamma_2 = \gamma_3 = 0$	
$\hbar\omega_{TO}^{(i)}$ , мэВ	CdTe: $17.3 + 1.1(1-x)$ ,	[4]
	MnTe: 23.1,	[6]
	HgTe: $14.5 + 1.5x$	[4]
Диэлектрические постоянные решетки	CdTe: $3.1x$	[4]
	MnTe: $4.5y$	[15]
	HgTe: $4.7(1-x-y)$	[4]
Потенциалы разупорядочения, эВ	$d_1 = d_3 - d_2 = 1.9$	
	$d_2 = 1.6$	[5]
	$d_3 = 3.5$	[6]
Константы неполярного деформационного потенциала, эВ	$p_0 = 29.3$	[4]
	$p_1 = 5$	

Рассчитанные параметры

Образец без варизонного слоя	Варизонная структура
$E_g(T) = 0.010819 + 2.41569e - 4xT, \text{ эВ}$ $N_D = 2.53 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ $N_A = 1.27 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$	$E_g(T) = 0.023324 + 9.187e - 5xT, \text{ эВ}$ $N_D = 2.1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ $N_A = 0.9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$

$z = 1 - x - y$ ;  $\mu_{dis}$  — подвижность электронов, ограниченная рассеянием на потенциале разупорядочения.

Как видно из рис. 3, в образце без варизонного слоя теория достаточно хорошо описывает эксперимент, в то время как в варизонной структуре отмечается существенное расхождение, увеличивающееся с температурой. Такое расхождение хорошо подтверждает высказанные выше качественные соображения, поскольку оно наблюдается в диапазоне температур,

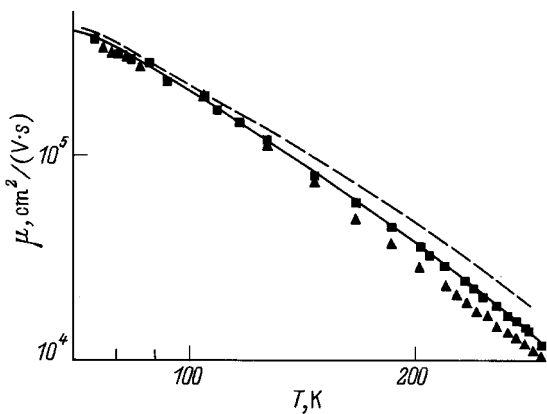
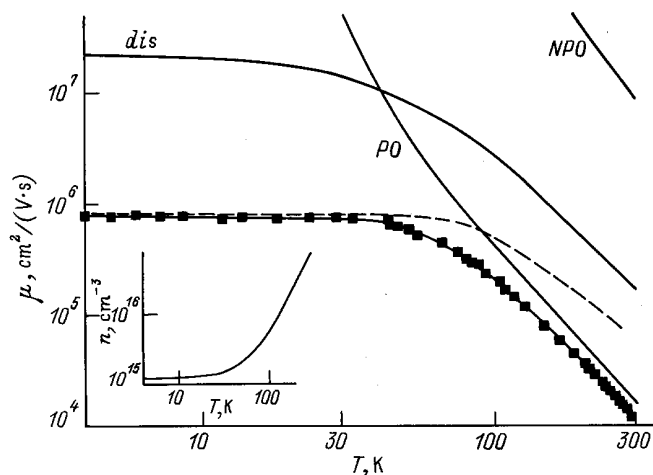


Рис. 3. Температурные зависимости холловской и рассчитанной подвижностей электронов проводимости соответственно в варизонной структуре (треугольники и штриховая кривая) и в эпитаксиальной пленке после удаления подложки вместе с варизонным слоем (квадраты и сплошная кривая).

где доминирующим является рассеяние на оптических фононах, при расчете которого корректный учет зависимости  $E_g(T)$  является определяющим фактором. Поскольку в обоих случаях при расчете  $E_g(T)$  использовалась трехзонная модель Кейна, в которой зависимость ширины запрещенной зоны от координаты не учитывалась, можно утверждать, что указанное расхождение связано с проявлением варизонного слоя в явлениях переноса.

Следует отметить, что в области температур  $T < 70$  К для варизонной структуры удается достичь согласования экспериментальной и теоретически рассчитанной подвижностей простой подгонкой суммарной концентрации ионизированных доноров  $N_D$ - и акцепторов  $N_{A+}$ . Однако ошибка в определении  $E_g(T)$  приводит к тому, что эта концентрация оказывается примерно на 25% меньше, чем концентрация ионизированных примесей, рассчитанная для эпитаксиальной пленки без варизонного слоя.

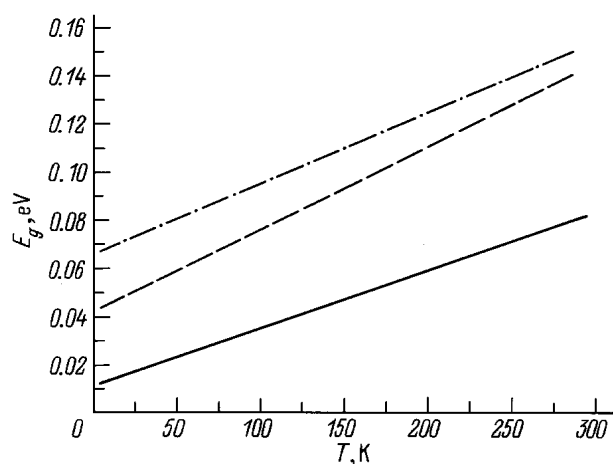
На рис. 4 изображена температурная зависимость электронной подвижности во всем исследованном интервале температур для случая, когда варизонный слой отсутствует. Как и предполагалось, для образцов данного состава достаточно учесть рассеяние на заряженных центрах, потенциале разупорядочения и полярных оптических фононах. Совпадение теории и эксперимента в данном случае свидетельствует также об отсутствии глубокого резонансного акцепторного центра, способного влиять на наблюдаемые величины. Таким образом, используемый подход по-



**Рис. 4.** Экспериментальная (квадраты) и теоретически рассчитанная (сплошная линия без обозначений) зависимости  $\mu(T)$  в пленке без варизонного слоя. При расчете учитывалось рассеяние на заряженных примесях и дырках (штриховая кривая), потенциале разупорядочения (*dis*), полярных (*PO*) и неполярных (*NPO*) оптических фононах. На вставке приведена зависимость  $n(T)$ , используемая при расчете.

звolyет не только описать набор экспериментальных данных, но и установить температурную зависимость параметра  $E_g$ .

На рис. 5 показано, что величины  $E_g(x, y, T)$ , рассчитанные по различным полуэмпирическим зависимостям в приближении виртуального кристалла, существенно отличаются как между собой (штриховая и штрихпунктирная прямые), так и от полученной нами зависимости (сплошная линия). Зависимость, изображенная на рисунке штрихпунктирной прямой, получена с использованием формул для крайних



**Рис. 5.** Зависимости  $E_g(T)$ : сплошная линия — получена в данной работе; штрихпунктирная и штриховая — рассчитаны в приближении виртуального кристалла (см. текст).

тройных соединений, приведенных в работе [2]. Значения  $E_g(x, y, T)$ , изображенные штриховой прямой, получены с использованием данных работ [10] для  $\text{CdHgTe}$ , [11] для  $\text{MnHgTe}$  и [12] для  $\text{CdMnTe}$ . При определении полуэмпирических зависимостей  $E_g$  от состава и температуры используются различные экспериментальные методы (см., например, обзоры [10,13]), чувствительность которых часто зависит от температуры и параметров конкретных образцов. С другой стороны, эти формулы, как правило, не являются универсальными по отношению к составу. Поэтому не удивительно, что усреднение таких зависимостей по методу виртуального кристалла может приводить к значительным погрешностям при попытке определить  $E_g(T)$  в реальном полупроводнике.

Результаты настоящей работы позволяют сделать следующие выводы.

1. В результате диффузии Cd при выращивании методом жидкофазной эпитаксии пленок  $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  на подложках типа CdTe образуются четырехкомпонентные эпитаксиальные пленки  $\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Hg}_{1-x-y}\text{Te}$ .

2. В области температур, где доминирует собственная проводимость, наличие варизонного слоя вблизи поверхности раздела (эпитаксиальная пленка)–подложка проявляется в явлениях переноса. Это обстоятельство необходимо учитывать при расчете энергетических параметров структуры.

3. Даже в отсутствие варизонного слоя температурная зависимость параметра  $E_g$  в узкозонных полупроводниках  $n\text{-Cd}_x\text{Mn}_y\text{Hg}_{1-x-y}\text{Te}$  должна определяться в каждом конкретном случае самосогласованно из экспериментальных данных, так как использование для этих целей усреднения известных полуэмпирических зависимостей для тройных соединений в рамках приближения виртуального кристалла может приводить к большим погрешностям.

### Список литературы

- [1] J.M. Pawlikowski, E. Popko. Sol. St. Commun., **22**, 4,231 (1977).
- [2] Shojiro Takeyama, Shin-ichiro Narita. J. Phys. Soc. Japan, **55**, 1, 274 (1986).
- [3] S.M. Komirenko. Semicond. Sci. Technol., **9**, 19 (1994).
- [4] J.J. Dubowski, T. Dietl, W. Shymanska, R.R. Galazka. J. Phys. Chem. Sol., **42**, 351 (1981).
- [5] D.S. Montgomery. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **16**, 2923.
- [6] Wafaa A. Gobba, J.D. Patterson, S.L. Lehoczky. Infr. Phys., **34**, 311 (1993).
- [7] W. Szymanska, T. Dietl. J. Phys. Chem. Sol., **39**, 1025 (1978).
- [8] M. Grynberg, R. Le Toullec, M. Balkanski. Phys. Rev. B, **9**, 517 (1974).
- [9] Н.Н. Берченко, В.Е. Кревс, В.Г. Средин. Полупроводниковые твердые растворы  $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ , и их применение (М., Воениздат, 1982).
- [10] M.H. Weiler. Semicond. Semimet., **16**, 119 (1981).

- [11] J. Kaniewski, A. Mysielski. Sol. St. Commun., **41**, 959 (1982).
- [12] T. Kendelwicz. Sol. St. Commun., **36**, 127 (1980).
- [13] R. Dornhaus, G. Nimtz. *The Properties and Applications of the CdHgTe, Alloy System. Narrow Gap Semiconductors* (Berlin, Springer, 1983).
- [14] S.M. Durbin, J. Han, O. Sungki, M. Kobayachi, D.R. Menke, R.L. Gunshor, Q. Fu, N. Pelekanos, A.V. Nurmikko, D. Li, J. Gonsalves, N. Otsuka. Appl. Phys. Lett., **55**, 2087 (1989).
- [15] P.I. Baranskii, O.P. Gorodnichii, N.V. Shevchenko. Infr. Phys., **30**, 259 (1990).

Редактор И.А. Полянская

### **Peculiarities of transport phenomena in $n$ - $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}/\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$ epitaxial films**

G.V. Beketov, A.E. Belyaev, A.A. Vitusevich,  
S.V. Kavertsev, S.M. Komirenko

Institute of Semiconductor Physics,  
Ukrainian Academy of Sciences,  
252028 Kiev, the Ukraine

**Abstract** In the paper the findings of investigation of the samples resulting from liquid phase epitaxy growth of the  $\text{Mn}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$  layers on  $\text{Cd}_{0.96}\text{Zn}_{0.04}\text{Te}$  substrate are presented. It is shown that the  $\text{Cd}_x\text{Mn}_y\text{Hg}_{1-x-y}\text{Te}$  film with a varying-gap layer near the epitaxial film-substrate interface arises as a result of cadmium diffusion from the substrate. The manifestation of gap variation in transport phenomena is detected. The temperature dependence of forbidden gap width ( $E_g(T)$ ) in a linear  $T$  approximation is obtained from the results of theoretical analysis of temperature dependencies of the concentration of free carries and their mobility. It is demonstrated that the averaging of semiempirical formulas for extreme ternary compounds in the framework of virtual crystal approximation may lead to great errors when determining  $E_G(T)$  in a particular semiconductor.

E-mail: kom@field.kiev.ua (S.M.Komirenko)