Электрическая активность дислокаций и точечных дефектов деформационного происхождения в кристаллах Cd_xHg_{1-x}Te

© С.Г. Гасан-заде[¶], С.В. Старый, М.В. Стриха, Г.А. Шепельский

Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины, 01650 Киев, Украина

(Получена 26 февраля 2002 г. Принята к печати 11 апреля 2002 г.)

Генерация даже относительно невысокой плотности дислокаций $N_{dis} \leq 10^7$ см⁻² приводит к значительным изменениям кинетических коэффициентов в кристаллах $Cd_x Hg_{1-x}$ Те (x = 0.20-0.21). В кристаллах n-типа наряду с заметным ростом концентрации электронов происходит существенное уменьшение их подвижности. В кристаллах p-типа в низкотемпературном диапазоне 4.2-40 К наблюдается переход от активационной проводимости к металлической, а также знакопеременное поведение коэффициента Холла R_H в зависимости от температуры и магнитного поля. Основную роль в наблюдаемых изменениях играют не непосредственно дислокации, а электронные состояния точечных дефектов, образованных в процессе движения дислокаций. Вся совокупность данных находит свое объяснение в рамках представлений о формировании в матрице основного кристалла связанных каналов проводимости противоположного типа в виде трехмерной дислокационной сетки.

1. Введение

Узкощелевое соединение $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ), широко применяемое в инфракрасной полупроводниковой оптоэлектронике, относится к труднообрабатываемым полупроводниковым материалам. Это связано с особенностями механических свойств КРТ и прежде всего с его высокой пластичностью. Даже из-за незначительного механического воздействия в кристаллах КРТ может возникнуть заметное число дислокаций. Макроскопическая пластическая деформация, в результате которой в объеме кристалла образуются дислокации, легко протекает в КРТ при комнатной температуре. Более того, как показано в [1,2], диапазон пластичности КРТ распространяется и на область значительно более низких температур вплоть до T = 80 - 100 К. Таким образом, при различных стандартных технологических операциях, необходмых для создания полупроводниковых устройств, например механической обработке поверхности, термообработках, ионной имплантации и др., в полупроводниковом элементе может генерироваться значительное число дефектов деформационного происхождения. Такие дефекты возникают в активной части прибора и при функционировании самих полупроводниковых устройств, например при термоциклировании. Указанная проблема актуальна и при создании эпитаксиальных слоев. Из-за расхождения параметров кристаллической решетки материалов подложки и эпитаксиального слоя в пограничной области возникают упругие напряжения, релаксация которых приводит к образованию сетки дислокаций.

Деформационные дефекты могут оказывать заметное влияние на характеристики приборов и на процессы их деградации. Между тем имеющиеся данные об электрической активности образованных при пластической деформации линейных и точечных дефектов, а также о влиянии таких дефектов на электрофизические свойства КРТ в настоящее время весьма ограничены, а результаты работ противоречивы [2-5]. Такое положение объясняется сложностью проблемы, поскольку генерация и движение дислокаций вызывает сразу несколько механизмов дефектообразования. Особенно противоречивы результаты исследований кристаллов р-типа проводимости. На наш взгляд, указанные пробелы объясняются, в частности, и тем, что нижняя граница температурного диапазона исследований деформационных дефектов в КРТ, как правило, ограничивалась значением T = 77 К. А между тем расширение низкотемпературного диапазона вплоть до T = 4.2 К может облегчить идентификацию типов дефектов, возникающих при деформации, поскольку именно в этой области температур происходит "вымораживание" свободных дырок на акцепторы. В результате большая часть нескомпенсированных акцепторов переходит в нейтральное зарядовое состояние, в то время как доноры остаются ионизированными.

В настоящей работе исследуется влияние деформационных дефектов на кинетические коэффициенты КРТ в диапазоне температур T = 4.2-300 К и магнитных полей с напряженностью H до 70 кЭ. Основная цель — попытаться установить тип дефектов, образованных при пластическом течении кристалла, определить электрическую активность таких дефектов и их влияние на основные электрофизические параметры кристаллов КРТ.

2. Эксперимент

Монокристаллы КРТ, как и СdTe, под воздействием механической нагрузки деформируются пластически по системе скольжения $\langle 110 \rangle \{ 111 \}$. В наших экспериментах пластическая деформация кристаллов Cd_xHg_{1-x}Te (x = 0.20 - 0.21) осуществлялась методом одноосного сжатия при T = 300 К. В этом случае при избирательном травлении на поверхности кристалла (111)

[¶] E-mail: gassan@class.semicond.kiev.ua



Рис. 1. Микрофотографии поверхности (111) $Cd_x Hg_{1-x}$ Те. Увеличение 370[×]. *a* — до, *b* — после деформации ($N_{dis} \approx \approx 10^7 \text{ см}^{-2}$).

возникает система образованных ямками травления полос скольжения, ориентированных вдоль эквивалентных направлений [110] (рис. 1). Такая картина соответствует представлениям о генерации в КРТ главным образом 60-градусных дислокаций в системе скольжения (110) {111} [6]. Средняя плотность ростовых дислокаций в исходных кристаллах находилась в пределах $(3-5) \cdot 10^5$ см⁻². Были измерены температурные (T = 4.2-300 K) и магнитополевые зависимости электрической проводимости σ и коэффициента Холла R_H образцов до и после пластической деформации. Плотность дислокаций в кристалле N_{dis} определялась металлографически, т.е. методом избирательного травления. В наших экспериментах N_{dis} не превышала величину $10^7 \,\mathrm{cm}^{-2}$, что соответствует ситуациям, реально возникающим в кристаллах и структурах. Попытка получить значительно большую степень деформации при $T = 300 \, \text{K}$, как правило, приводила к появлению микротрещин. Выбор же столь низкой температуры деформации был связан в первую очередь с задачей получения именно первичной картины дефектообразования в кристалле, на которую слабо влияют процессы диффузии и аннигиляции образованных дефектов.

Кристаллы *n*-типа. На рис. 2 представлены типичные температурные зависимости R_H образца *n*-типа до (кривая 1) и после (кривая 2) пластической деформации. На рис. 3 показаны температурные зависимости подвижности электронов μ_n в том же образце, определяемой как произведение измеренных в эксперименте σ и R_H . Поскольку образец во всем температурном диапазоне сохраняет электронный тип проводимости, такое определение подвижности представлялось вполне допустимым. Обращают на себя внимание несколько особенностей в зависимостях $\mu_n(1/T)$ и $R_H(1/T)$, которые проявляются у образца с дислокациями (кривые 2 на рис. 2 и 3). Из вида зависимости $R_H(1/T)$ следует, что тип проводимости образца не изменяется, а концентрация электронов после введения в него дислокаций увеличивается. Параметры нескольких образцов *n*-типа при T = 77 K до и после деформации приведены в таблице. Из нее видно, что рост концентрации электронов *n* и одновременное уменьшение подвижности μ_n наблюдается у всех образцов. Что касается самой μ_n , то как



Рис. 2. Температурные зависимости R_H образца *n*-Cd_xHg_{1-x}Te № 4. *1* — до, *2* — после генерации дислокаций $N_{\rm dis} \approx 7 \cdot 10^6$ см⁻²; сплошные — эксперимент, штриховая — расчетная.



Рис. 3. Температурные зависимости подвижности электронов образца № 4. *1* — до, 2 — после деформации.

видно из рис. 3, характер ее температурной зависимости претерпевает после деформации более сильные изменения по сравнению с изменениями $R_H(1/T)$. Появляется отчетливый максимум μ_n , который с увеличением плотности дислокаций смещается в сторону более высоких температур. Обращает на себя внимание также то, что с низкотемпературной стороны от максимума происходит резкий спад μ_n , при этом в зависимости $\mu_n(1/T)$ наблюдается активационный участок. Последнее свидетельствует о появлении нового дополнительного механизма рассеяния носителей тока, который может иметь барьерный характер. Заметим, что исходный кристалл *п*-КРТ имел достаточно высокую подвижность электронов $2 \cdot 10^5$ см²/В · с при T = 77 К с относительно слабым рассеянием на ионизированных примесях в низкотемпературном диапазоне (рис. 3, кривая 1).

№ образца	$n \cdot 10^{-14}, \mathrm{cm}^{-3}$		$\mu_n \cdot 10^{-4}$, см ² /В · с	
	до	после	до	после
4	1.4	27	18	0.2
12	1.1	3.8	7.6	0.3
14	3.1	19	23	1.1
17	21	41	14	0.65

Из зависимостей, приведенных на рис. 2 и 3, и данных таблицы также видно, что при образовании одной и той же плотности дислокаций в кристалле относительные изменения подвижности носителей, как правило, оказываются более сильными по сравнению с изменениями концентрации. Особенно отчетливо такая закономерность проявляется у образцов с исходной концентрацией примесных электронов, превышающей 10¹⁴ см⁻³. Этот факт свидетельствует о взаимной компенсации значительной части образованных при деформации дефектов. В результате такие дефекты вносят вклад лишь в рассеяние носителей тока, практически не влияя на их концентрацию. Следует заметить, что к прямым оценкам параметров образцов, например подвижности μ_n из произведения σ и R_H в деформированных образцах, все же следует подходить с осторожностью. В самом деле, в температурной зависимости $R_H(1/T)$ у образцов с дислокациями, как правило, наблюдается небольшой, но характерный максимум (рис. 2), который указывает на наличие в образце по крайней мере двух типов носителей заряда с разной подвижностью [7].

Из приведенных выше данных следует, что при движении дислокаций в кристаллах КРТ одновременно образуются дефекты как донорного, так и акцепторного типа. Поэтому представлялось интересным оценить результирующую электрическую активность совокупности образованных дефектов, попытавшись выделить одну из составляющих проводимости. С этой целью были выполнены измерения магнитополевых зависимостей коэффициента Холла при T = 77 К в поле с напряженностью до 70 кЭ (рис. 4). Столь сильные магнитные поля в температурной области истощения примесей $(T > 50-60 \,\mathrm{K})$ обычно позволяют легко выявить в КРТ наличие дырочной проводимости, замаскированной в отсутствие поля вкладом в проводимость электронной составляющей. Такая маскировка объясняется большим отношением подвижностей электронов и дырок $b = \mu_n / \mu_h \approx 100$. По этой причине электроны могут доминировать в проводимости даже в том случае, если их концентрация в образце заметно меньше концентрации дырок, т.е. когда выполняется неравенство $N_A > N_D$. В сильном же для электронов $(\mu_n H/c \gg 1)$, но в то же время слабом для дырок $(\mu_h H/c \ll 1)$ магнитном поле происходит "замагничивание" электронов. В результате электронная составляющая оказывается практически выключенной из проводимости уже при $H > 4-6 \, \text{к}$ Э, и коэффициент Холла в пределе сильных полей имеет простое выражение $R_H = 1/e(p-n)$ [8]. В эксперименте эффект "замагничивания" электронов в кристаллах р-типа должен проявляться в изменении знака коэффициента Холла в сильном поле от отрицательного к положительному и выходе зависимости $R_H(H)$ на полку [8]. Однако, как видно из полевых зависимостей R_H на рис. 4, в наших экспериментах во всем диапазоне Н не наблюдается какой-либо тенденции к смене знака R_H. Более же сильная полевая зависимость R_H у деформированного кристалла по сравнению с исходной связана или с увеличением степени неоднородности кристалла, либо с наличием в образце по крайней мере двух типов носителей тока с разными подвижностями. Последнее заключение согласуется и с данными рис. 2 и 3.

На основании полученных результатов и данных металлографии попытаемся сделать некоторые количест-



Рис. 4. Полевые зависимости R_H при T = 77 К. Образец № 4. I - до, 2 - после деформации.

Физика и техника полупроводников, 2003, том 37, вып. 1

венные оценки с целью выяснения природы электронных состояний дефектов, которые вводятся в кристаллы КРТ при деформации. Принято считать, что при пластической деформации полупроводника помимо дислокаций в кристалле одновременно генерируется значительное число точечных дефектов [9]. Существует несколько механизмов образования точечных дефектов движущимися дислокациями. Важную роль в этих механизмах играют дислокационные ступеньки. В соединениях А^{II}В^{VI}, в частности Cd_xHg_{1-x} Te, ступеньки являются источниками вакансий и межузельных дефектов и, кроме того, сами по себе могут действовать как доноры и акцепторы [10]. Вопрос сводится по существу к следующему. Какой из двух типов электронных состояний, а именно: принадлежащий непосредственно ядру дислокации или же — собственному точечному дефекту, образованному при движении дислокации, вносит основной вклад в наблюдаемые изменения концентрации и подвижности электронов. Если исходить из наиболее приемлемой для КРТ модели оборванных (болтающихся) связей, то оказывается, что на единицу длины дислокации приходится $2 \cdot 10^7 \, \text{см}^{-1}$ ионных мест, т.е. атомов с нарушенной координацией химической связи в дислокационном ядре. При этом плотность заряда, приходящегося на одно состояние, значительно меньше единицы и равна 0.12 (последнее связано с кулоновским отталкиванием одноименных зарядов и вытекает из статистики Рида для электронных состояний ядра дислокации [11]). Тогда при плотности дислокаций 10⁷ см⁻² максимальное число электронных состояний на оборванных связях не превышает величины 2 · 10¹³ см⁻³. Однако из полученных в эксперименте значений R_H следует, что плотность вводимых деформацией электронных состояний превышает эту величину по крайней мере на 2 порядка: (2-4) · 10¹⁵ см⁻³. В действительности с учетом наблюдаемого роста степени компенсации превышение может быть еще большим. Оценка плотности ионизированных дефектов $N_D - N_A$ из соотношения Брукса-Херринга для подвижности электронов требует значения концентрации дефектов (7-8) · 10¹⁵ см⁻³. Последняя цифра

оказывается близкой и к оценочной плотности точечных дефектов, вводимых в кристаллическую решетку дислокационными ступеньками при такой степени деформации, которая обеспечивает генерацию дислокаций $N_{\rm dis} \approx 10^7 \,{\rm cm}^{-2}$ [9].

Таким образом, можно заключить, что при пластической деформации в кристаллах КРТ *n*-типа основной вклад в изменения проводимости вносят не непосредственно дислокации, а точечные дефекты деформационного происхождения, которые возникают в соответствующих плоскостях скольжения как результат движения дислокаций.

Кристаллы *р*-типа. В исходном состоянии кристаллы с проводимостью *р*-типа имели относительно невысокую концентрацию дырок $p = (4-8) \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, определяемую разностью $N_A - N_D$. Температурные зависимости удельного электрического сопротивления ρ



Рис. 5. Температурные зависимости ρ образца p-Cd_xHg_{1-x}Te. I — до, 2 — после деформации. Исходные параметры образца при 77 К: $p = 3.8 \cdot 10^{15}$ см⁻³, $\mu_p = 4.2 \cdot 10^2$ см²/В · с.

и R_H у таких кристаллов до деформации имели обычный для однородных образцов *p*-КРТ вид (рис. 5). При этом на температурных зависимостях ρ и R_H по мере понижения температуры последовательно проявляются характерные участки: область собственной проводимости, область истощения примесей (акцепторов), область вымораживания дырок на акцепторы и, наконец, участок проводимости по примесной зоне (прыжковая проводимость). Первый и третий участки характеризуются экспонентами, при этом в логарифмическом масштабе наклон линий $\rho(T)$ соответствует для первого участка ширине запрещенной зоны E_g, для третьего — приближенно глубине залегания акцепторов ЕА. Величина ЕА зависит от степени компенсации и концентрации акцепторов и для исследуемых кристаллов находилась в пределах 6-8 мэВ.

В кристаллах *p*-типа в области собственной проводимости коэффициент Холла всегда имеет отрицательный знак из-за большой величины отношения μ_n/μ_h . При понижении температуры R_H меняет знак (переход от собственной проводимости к примесной). При дальнейшем уменьшении *T* из-за вымораживания дырок на акцепторный уровень происходит быстрый рост R_H . В диапазоне же температур T < 10 K, когда электрическое сопротивление образца достигает больших значений, а проводимость определяется прыжковым механизмом, коэффициент Холла, как правило, вообще не удается надежно измерить.



Рис. 6. Температурные зависимости $|R_H|$. Образец тот же, что и на рис. 5. I — до, 2 — после деформации; сплошные — при H = 1.5 кЭ, штриховая — H = 6 кЭ.

После введения дислокаций вид температурных зависимостей R_H и ρ существенно изменяется. Следует перечислисть эти изменения.

1. Температурная точка смены знака $R_H(1/T)$ при переходе от собственной проводимости к примесной (дырочного типа) сдвигается в сторону более низких температур. При этом в области дырочной проводимости R_H оказывается по абсолютной величине меньше, чем в исходном кристалле.

2. При достаточно большой концентрации дислокаций $(N_{\rm dis} \ge (7-8) \cdot 10^6 \, {\rm cm}^{-2})$ на кривых R_H и ρ практически исчезают активационные участки, связанные с "вымораживанием" дырок на акцепторы, а также участок прыжковой проводимости, т.е. происходит переход к проводимости металлического типа.

3. В силу вышеизложенного проводимость деформированного образца в диапазоне самых низких температур (4.2-30 K) возрастает на несколько порядков по сравнению с проводимостью исходного кристалла. Однако в температурной области истощения примесей (50-110 K) проводимость образца с дислокациями, напротив, оказывается ниже исходной. В то же время, несмотря на достаточно высокую проводимость образца с дислокациями, измерение коэффициента Холла при T < 40 K сталкивается с заметными трудностями из-за его знакопеременного поведения (R_H изменяет знак несколько раз). Причем в этом температурном диапазоне электронный знак R_H может быть изменен на дырочный с помощью магнитного поля H = 5-6 кЭ.

4. В диапазоне T = 4.2-40 К при $N_{\rm dis} \ge 2 (6-8) \cdot 10^6$ см⁻² поперечное магнитносопротивление *p*-КРТ в области полей H = 1-5 кЭ имеет, как правило, отрицательный знак, что характерно для проводимости по примесной зоне.

3. Обсуждение результатов

Очевидно, что кристалл с достаточно большой плотностью дислокаций следует рассматривать как неоднородную систему. Однако в том случае, когда степень пластической деформации в объеме образца одинакова, указанную неоднородность можно считать не хаотической, а упорядоченной. Из картины избирательного травления (рис. 1) видно, что на однородный до деформации образец накладывается сетка, состоящая из практически равноудаленных линий с приблизительно одной и той же плотностью ямок травления. Таким образом, к кристаллу с дислокациями применим подход, когда он может быть разделен на основную матрицу (с исходными параметрами кристалла) и сетку протяженных микрокластеров с резко отличными от основной матрицы электронными свойствами. В рамках такой модели обсудим экспериментальные особенности кинетических коэффициентов в образцах КРТ с дислокациями. Основное внимание следует уделить зависимостям $R_H(1/T)$ и $\mu(1/T)$.

Отметим, что вопросы возникновения аномалий на зависимостях $R_H(1/T)$ в КРТ (дополнительный небольшой пик в области перехода к собственной проводимости в материале *n*-типа, двойная инверсия знака в материале р-типа) наблюдавшихся в так называемых однородных образцах КРТ, обсуждались в течение достаточно длительного времени. Разные теоретические подходы для описания таких аномалий исходили из нескольких моделей: наличия в образце микронеоднородностей с различными типами проводимости; слоистой структуры самого образца; наличия поверхностного слоя со свойствами носителей, отличающимися от свойств основных носителей в объеме (см., например, [12,13]). Однако при всем кажущемся разнообразии использованных моделей речь идет, по сути, о разных способах усреднения известного выражения для коэффициента Холла в предположении нескольких типов носителей:

$$R_{H} = \sum \sigma^{(i)} \mu_{H}^{(i)} / c \left[\left(\sum \sigma^{(i)} \right)^{2} + (H/c)^{2} \left(\sum \sigma^{(i)} \mu_{H}^{(i)} \right)^{2} \right].$$
(1)

Здесь суммы берутся по всем i различным типам имеющихся в образце носителей; $\sigma^{(i)} = en^{(i)}\mu^{(i)}$; μ_H — холловская подвижность.

Важную информацию о том, какие именно группы носителей имеются в исследуемом нами случае, дает полевая зависимость коэффициента Холла, изображенная на рис. 4. Отметим, что в случае существования в *n*-образце только электронов в пределе слабых магнитных полей $R_H = -\gamma/en$, где $\gamma = \mu_H/\mu$ — холловский

фактор для электронов. Учет зависимости γ от величины магнитного поля H может привести к некоторому убыванию R_H с увеличением H. Однако величина такого убывания для КРТ в актуальном диапазоне температур и полей не должна превышать значения 1.93 при рассеянии носителей на заряженных примесях (см. [14]). На опыте наблюдается значительно более резкое убывание коэффициента Холла.

В то же время наличие характерного максимума на кривой $R_H(1/T)$ в полупроводнике *n*-типа (рис. 2, кривая 2) в температурной области перехода от собственной к примесной проводимости не может быть объяснено в рамках рассмотрения только носителей одного знака заряда — электронов [7].

Совокупность отмеченных выше экспериментальных данных можно объяснить, предположив наличие в пластически деформированном образце наряду с областями с электронной проводимостью также областей с дырочной проводимостью. В принципе (см. [12]) *p*-области могут иметь вид приповерхностных слоев, однако химическое травление образцов не приводило к существенному изменению экспериментальных результатов, что заставляет пренебречь далее ролью поверхности. В то же время вносимые в образец пластической деформацией дислокации сами по себе являются протяженными дефектами, и с ними, вообще говоря, могут быть связаны "каналы" с измененными свойствами проводимости.

Действительно, возникающая в КРТ 60-градусная краевая дислокация может обрываться как на ряде атомов Те, так и на ряде Cd и Hg [15]. В первом случае ненасыщенные связи создают отрицательный заряд ядра дислокации, во втором — положительный. Такие заряженные ядра создают вдоль себя "трубки" пространственного заряда. Отрицательно заряженная линия акцепторов отталкивает свободные электроны и образует в материале *n*-типа положительный заряд, усредненное значение которого в единице объема равно $e(N_D - N_A)$.

Вокруг дислокации можно построить цилиндр радиуса r, который определяется из условия равенства положительного заряда цилиндра отрицательному заряду дислокации. Этот радиус равен: $r = [a\pi(N_D - N_A)]^{-1/2}$. Здесь а — расстояние между зарядами в дислокационной линии. Оценка для приведенных выше параметров n-КРТ дает значения радиуса "трубки" около полмикрона, что на порядки превышает собственно размеры ядра дислокации. При $N_{\rm dis} \approx 10^7 \,{\rm cm}^{-2}$ это означает, что трубки с положительным пространственным зарядом (их число равно числу трубок с отрицательным зарядом) занимают около 4% площади перпендикулярно пересекающей их плоскости. При этом акцепторы внутри области объемного пространственного заряда (ОПЗ) в силу возникающего изгиба валентной зоны ионизированы даже тогда, когда в остальном объеме они "вымораживаются" с понижением температуры. В результате в "трубки" возникает канал с дырочной проводимостью.

Таким образом, мы можем рассматривать наш образец *n*-типа как равномерно по объему "прошитый" каналами с иным типом проводимости — как дырочным, так и электронным (в силу связанности с дислокацией протяженного дипольного слоя). Наличие дополнительных "электронных" каналов, связанных с дислокациями, из-за малости их объема по сравнению с объемом матрицы, очевидно не влияет существенно на электронные свойства образцов *n*-типа, однако может проявляться в образцах *p*-типа.

Припишем "дырочным" трубкам дырочную проводимость σ_p . При этом концентрация носителей p в таких каналах будет определяться точечными дефектами деформационного происхождения. Отметим, что похожая модель безотносительно к дислокациям была привлечена для объяснения аномалий эффекта Холла в пленках КРТ [7]. При этом рассматривалась такая модель p-n-переходов, в которой выпрямлением вплоть до самых низких температур при малых токах можно пренебречь. Электронное рассеяние на p-n-переходах также считалось несущественным.

Такой подход позволяет воспользоваться классической "моделью разных слоев" Петрица [16], разбивая образец на малые "блоки" p-n-p- или n-p-n-структур. Следующее упрощение заключалось в том, что магнитное поле полагалось всегда параллельным границе раздела дырочного и электронного слоя. При этом отдельно рассматривались компоненты тока I, параллельные (I_l) и перпендикулярные (I_t) к границе раздела n- и p-областей. Понятно при этом, что холловское напряжение в первом случае следует рассчитывать для последовательности параллельно включенных n-p-n-областей, а во втором случае — для таких областей, включенных последовательно. Однако расчет приводит (см. [7]) к одинаковому ответу для обоих случаев:

$$R_{H} = \left[R_{p} \sigma_{p} D_{p} + R_{n} \sigma_{n} D_{n} \right] / \left[\sigma_{p} D_{p} + \sigma_{n} D_{n} \right].$$
(2)

Здесь R_i — коэффициент Холла для *i*-области (i = n, p), σ_i — проводимость такой области, D_i — толщина этой области (для направления тока, перпендикулярного к плоскости p-n-перехода), или площадь такой области (для направления тока вдоль границы p-n-перехода). Проводимость для тока I_l легко записать с учетом того, что в этом случае области с электронной и дырочной проводимостью действуют как параллельные сопротивления: $\sigma_l = \sigma_p D_p + \sigma_n D_n$. Для "перпендикулярного" же направления тока I_t указанные области подключены как последовательные сопротивления, и поэтому $\sigma_t = 1/[\sigma_p D_p + \sigma_n D_n]$. В общем случае случайного распределения "блоков" типа n-p-n проводимость запишется как

$$\sigma = \sum \sigma_l(D^{(i)})P^i + \sum \sigma_t(D^{(i)})[1-P^i].$$
(3)

Здесь P^i — вероятность того, что для *i*-го "блока" ток протекает в направлении, параллельном к границе p-n-перехода. Сумма в (3) берется по всем возможным "блокам" образца. Однако вычисление такого сложного выражения требует дальнейших упрощений. В наиболее

простом случае [15] полагалось, что P^i не зависит от номера "блока", а все σ_i и σ_i одинаковы. Тогда выражение (3) можно записать в простом для вычисления виде:

$$\sigma = \sigma_l P + \sigma_t [1 - P]. \tag{4}$$

В дальнейшем выражение (2) рассчитывалось с учетом (4). При этом концентрация электронов в *n*-области рассчитывалась с учетом собственной и примесной концентраций. Аналогично рассчитывались концентрации дырок в *p*-области, но при этом учитывалась температурная зависимость заполнения акцепторов с энергией связи E_A . Концентрации неосновных носителей в обеих областях считались равными их собственным концентрациям.

Концентрация доноров N_D бралась из значения R_H в области низких температур. Концентрация акцепторов, отношение D_p/D_n и вероятность P считались подгоночными параметрами теории. Для электронных и дырочных подвижностей использовались эмпирические формулы из работы [17]. Из полученных выражений следует, что максимумы R_H и холловской подвижности взаимосвязаны. При этом наилучшее соответствие теории с кривыми рис. 2 и 3 достигалось для значений $D_p/D_n = 0.1, P = 0.5, N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}.$

Отметим, что величина $D_p/D_n = 0.1$ того же порядка, что и полученная выше из простой оценки радиуса r (0.04). Лучшего соответствия вряд ли следовало ожидать ввиду многочисленности приближений, сделанных выше. Приведем простую качественную интерпретацию пика, наблюдаемого на кривой $R_H(1/T)$. Очевидно, что в температурном диапазоне перехода от собственной проводимости к примесной R_H в "матрице" не испытывает значительных аномалий: он остается отрицательным и достигает значений, близких к разности $N_D - N_A$. На эту кривую налагается зависимость $R_H(1/T)$ в системе протяженных микрокластеров *р*-типа. В области собственной проводимости знак коэффициента Холла здесь также отрицательный (определяется более подвижными электронами). Однако при переходе к дырочной примесной проводимости знак R_{H} становится положительным, а сам коэффициент возрастает в силу уменьшения концентрации свободных дырок с температурой. Это и приводит к появлению небольшого пика на кривой $R_H(1/T)$ в системе "матрица-микрокластеры" в области перехода от собственной проводимости к примесной дырочной (в микрокластерах) и к дальнейшему слабому убыванию этого коэффициента с понижением температуры.

При рассмотрении экспериментальных результатов, полученных на образцах *p*-типа, сразу обращает на себя внимание следующее обстоятельство. Если при измерениях R_H и ρ ограничиться температурным диапазоном выше T = 77 K, то на основании полученных из эксперимента данных можно прийти к ошибочному заключению (как это и было сделано в некоторых работах) об изменении в результате деформации типа проводимости (от *p*- к *n*-типу). В действительности, как это видно из сопоставления всего температурного диапазона кривых, ничего подобного не происходит. Ошибочное же предположение связано со сдвигом температурной точки перехода проводимости от собственной к примесной (изменение знака R_H) у деформированного кристалла в сторону более низких температур.

Остановимся более подробно на этой особенности в зависимости $R_H(1/T)$. Тот факт, что точка инверсии R_H с увеличением концентрации деформационных дефектов смещается в сторону более низких температур, на первый взгляд свидетельствует (как и в кристаллах *n*-типа) о донорной результирующей активности вводимых при деформации дефектов. Однако в этом случае возникает следующее противоречие: если добавочная концентрация электронов, связанная с деформационными дефектами донорного типа, оказывается достаточной для того чтобы сохранить отрицательный знак R_H в некотором температурном диапазоне примесной проводимости, то при дальнейшем понижении температуры смены знака R_H тем более не должно происходить. Действительно, с понижением температуры общая концентрация дырок может только уменьшаться, а при $T < 40 \, {\rm K}$ экспоненциально убывать из-за их "вымораживания" на акцепторы. В то же время концентрация электронов в этом температурном диапазоне за счет наличия определяющей примесной компоненты будет оставаться практически неизменной (доноры пребывают в ионизованном состоянии вплоть до самых низких температур). Однако в эксперименте инверсия происходит, и R_H при T < 50 K становится положительной. По-видимому, разрешение указанного противоречия следует искать в особенностях температурной зависимости подвижности носителей в деформированных кристаллах. При наличии двух типов носителей разного знака (электронов и дырок) коэффициент Холла описывается выражением $R_{H} = [(p - b^{2}n)/(p + bn)^{2}]/e$. В этом случае смена знака R_H должна происходить при выполнении равенства $p - b^2 n = 0$. Нетрудно видеть, что резкое уменьшение подвижности электронов (рис. 3) в деформированных кристаллах при понижении температуры в диапазоне T = 50-100 К может оказаться главной причиной сдвига температурной точки инверсии R_H (подвижность тяжелых дырок при этом уменьшается незначительно). Действительно, изменение множителя b^2 оказывается определяющим, поскольку именно в указанном диапазоне Т концентрация носителей изменяется слабо, что видно из рис. 2.

Изменение коэффициента *b* очевидно связано с различным влиянием внесенных деформацией дислокаций на подвижности электронов и дырок. На качественном уровне можно воспользоваться простым выражением для времени рассеяния на краевой дислокации: $1/\tau = N_{\rm dis}v_ts$. Здесь v_t — компонента вектора скорости рассеиваемого носителя в плоскости, перпендикулярной оси дислокации, *s* — поперечное сечение рассеяния носителей на дислокации, имеющее размерность длины

из-за плоскостного характера задачи. Из приведенного соотношения видно, что при введении определенной концентрации дислокаций $N_{\rm dis}$ значительно сильнее рассеиваются "быстрые" высокоподвижные электроны. Последнее и приводит к резкому уменьшению параметра b.

Требует объяснения и другая особенность образцов р-типа с дислокациями — уменьшение по мере роста N_{dis} энергии активации акцепторов и переход к безактивационной проводимости в низкотемпературном диапазоне. В однородном кристалле переход к безактивационной проводимости (переход Мотта) обеспечивается перекрытием волновых функций акцепторных состояний по мере уменьшения расстояния между примесями. В р-КРТ для этого требуется концентрация акцепторов $N_A = (2-3) \cdot 10^{17} \,\mathrm{cm}^{-3}$ [18]. Такая плотность дырочных состояний совершенно нереальна для наших условий. Согласно экспериментальным значениям R_{H} , с одной стороны, и оценке плотности образованных при пластической деформации состояний, с другой стороны, концентрация дырок в деформированных кристаллах $(N_{\rm dis} \le 10^7 \,{\rm cm}^{-2})$ не может превышать $10^{16} \,{\rm cm}^{-3}$. Поэтому объяснение очевидно опять следует искать в неоднородном характере кристалла с дислокациями. Здесь могут действовать два основных конкурирующих фактора. Как показано в [19], уширение примесных уровней, обусловленное неоднородностью кристалла, пропорционально "степени неупорядоченности" и определяется характерной энергией сдвига края зоны на корреляционной длине неоднородности. В нашем случае масштаб таких сдвигов краев зон определяется свойствами ОПЗ вблизи дислокационных трубок и по оценке при указанной концентрации вносимых дефектов может достигать величины порядка 10 мэВ. Этого было бы вполне достаточно для уширения акцепторного уровня, необходимого для перехода к безактивационной проводимости. Однако в приведенной оценке не учтено изменение степени компенсации кристалла при введении дислокаций. Рост степени компенсации, как известно, ведет к увеличению E_A и, таким образом, препятствует переходу к безактивационной проводимости. Постепенное уменьшение энергии активации акцепторов с ростом N_{dis} свидетельствует о преимуществе первого из упомянутых факторов. Однако этот механизм не в состоянии объяснить особенности R_H. Действительно, знакопеременное поведение R_H с изменением T и магнитного поля указывает на наличие (как и в образцах *n*-типа) двух типов носителей тока разного знака, которые в кристаллах р-типа вносят сопоставимый вклад в проводимость. Появление в кристаллах р-типа электронной составляющей можно объяснить только образованием в результате деформации проводящих каналов *n*-типа. Последние могут возникать как "дислокационные трубки" вокруг цепочек катионов. Очевидно, что по мере увеличения плотности таких трубок вклад электронной компоненты увеличивается прежде всего в низкотемпературном диапазоне, где вклад дырочной составляющей должен уменьшаться.

Переход же в результате деформации типа проводимости от р-к п-типу во всем температурном диапазоне несобственной проводимости в кристаллах р-КРТ в наших экспериментах, за исключением одного образца, не наблюдался. Этому может быть несколько причин. Хорошо известно, что кристаллы р-типа являются значительно более дефектными по сравнению с кристаллами п-типа. Исходная суммарная концентрация нескомпенсированных акцепторов, включая глубокие центры, в кристаллах р-типа, как правило, превышает величину $10^{16} \, \text{см}^{-3}$ (относительно низкая концентрация примесных дырок достигается сильной компенсацией). Можно предположить, что деформационные доноры оказываются полностью скомпенсированными, поскольку и после деформации соотношение $N_A > N_D$ остается в силе, и кристалл сохраняет таким образом дырочный тип проводимости. Некоторое увеличение плотности дырок, по-видимому, следует связать с известным механизмом перезарядки движущимися дислокациями дефектов, которые имеются в исходном состоянии кристаллов р-типа и отсутствуют у кристаллов *n*-типа.

Для перехода от проводимости *р*-типа к *n*-типу, по-видимому, необходима меньшая исходная концентрация N_A в образце. Уверенная инверсия типа проводимости в результате введения дислокаций ($N_{\rm dis} \approx 10^7\,{\rm cm}^{-2}$) была получена нами лишь на одном из исследованных кристаллов *p*-КРТ с $N_A = (3-4) \cdot 10^{15} \,\mathrm{cm}^{-2}$ и относительно слабой компенсацией. О последнем свидетельствовала и более высокая по сравнению с другими образцами подвижность дырок. Другая возможность инверсии типа проводимости заключается в большей, чем в наших экспериментах, степени пластической деформации, когда плотность дислокаций будет значительно превышать величину 10⁷ см⁻². Однако этот случай, с нашей точки зрения, представляет меньший интерес, поскольку редко встречается на практике. Исключение — образование КРТ нарушенных слоев значительной толщины в результате скола [10] или в процессе механической обработки поверхности [20]. В итоге в кристалле возникает большая концентрация дислокационных петель и так называемых механодоноров, которые приводят к изменению типа проводимости. Однако в этом случае трудно говорить об однородности пластической деформации кристалла.

Список литературы

- П.И. Баранский, Ю.Н. Гаврилюк, А.И. Елизаров, В.А. Кулик. ФТП, 11, 1560 (1977).
- [2] С.Г. Гасан-заде, Е.А. Сальков, Г.А. Шепельский. ФТП, 17, 1913 (1983).
- [3] J.H. Tregigals, T.L. Polgreen, M.C. Chen. J. Cryst. Growth, 88, 460 (1988).
- [4] С.Г. Гасан-заде, И.П. Жадько, Э.А. Зинченко, В.А. Романов, Е.А. Сальков, Г.А. Шепельский. ФТП, 23, 85 (1989).
- [5] B. Pelliciari, G. Beret. J. Appl. Phys., 62, 3986 (1987).

- [6] S. Cole, A.F.W. Willoughby, M. Brown. J. Cryst. Growth, 59, 370 (1988).
- [7] M.C. Chen, S.G. Parker, D.F. Weirauch. J. Appl. Phys., 58, 3150 (1985).
- [8] Ю.Г. Арапов, Б.Б. Поникаров, И.М. Цидильковский, Н.Г. Шелушинина. ФТП, 13, 695 (1979).
- [9] Yu.A. Osipyan, V.F. Petrenko, G.K. Strukova, I.I. Khodos. Phys. St. Sol. (a), 57, 477 (1980).
- [10] J.P. Hirth, H. Erenreich. J. Vac. Sci. and Technol., 3, 367 (1985).
- [11] W.T. Reed. Phys. Mag., 46, 111 (1955).
- [12] V.I. Ivanov-Omskii, N.N. Berchrnko, A.I. Elizarov. Phys. St. Sol. (a), **103**, 11 (1987).
- [13] K.K. Parat, N.R. Taskar, I.B. Bhat, S.K. Ghandhi. J. Cryst. Growth, **102**, 413 (1990).
- [14] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках (М., Наука, 1984).
- [15] Г. Матаре. Электроника дефектов в полупроводниках (М., Мир, 1974).
- [16] R.L. Petritz. Phys. Rev., **110**, 1254 (1958).
- [17] L.F. Lou, W.H. Frye. J. Appl. Phys., 56, 2253 (1984).
- [18] А.И. Елизаров, В.В. Богобоящий, Н.Н. Берченко. ФТП, 18, 455 (1984).
- [19] M.V. Strikha, F.T. Vasko. J. Phys.: Condens. Matter., 9, 663 (1997).
- [20] Л.А. Бовина, В.Н. Стафеев, А.В. Фролов, А.Г. Рубцов. Матер. Всес. сем. "Физика и химия полупроводников" (Павлодар, 1987) с. 218.

Редактор Л.В. Беляков

Electrical activity of dislocations and point defects of deformation origin in $Cd_xHg_{1-x}Te$ crystal

S.G. Gasa-zade, S.V. Staryj, M.V. Strikha, G.A. Shepelskii

Institute of Semiconductor Physics, Ukrainian National Academy of Sciences, 01650 Kiev, Ukraine

Abstract The generation of even relatively low dislocations density $N_{\rm dis} \leq 10^{17}\,{\rm cm}^{-2}$ causes essential quantitative changes of kinetic coefficients in $Cd_xHg_{1-x}Te$ (x = 0.20-0.21) crystal. In *n*-type crystal the electron concentration increases considerably, the electron mobility at the same time decreasing dramatically. In *p*-type crystals the change of sign of R_H was observed as a function of temperature and magnetic field in the low temperature region (T = 4.2 - 40 K), together with a transition from activation conductivity to metallic one. It has been show that these changes are not caused by electronic states of the dislocation core only, but by point defects that were generated in the process of dislocation movement, and then were concentrated in the gliding planes. The experimental data obtained can be explained in terms of formation of conducting binding channels of another type of conductivity which are interconnected by the dislocations net in the matrix of the crystal.