УДК 621.315.592

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ СВОБОДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В PbTe И $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ ПО СПЕКТРАМ ОТРАЖЕНИЯ В ДАЛЕКОЙ ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ

А. Г. Белов, Е. П. Рашевская

(кафедра физики полупроводников)

В настоящей работе предлагается бесконтактный неразрушающий метод определения концентрации свободных носителей заряда в PbTe и твердом растворе $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ в диапазоне концентраций $1\cdot10^{17}$—$5\cdot10^{18}$ см$^{-3}$ по спектрам отражения в далекой инфракрасной области (20—120 мкм).

Зонная структура PbTe и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$. Величина прямого энергетического зазора ε_g в твердом растворе $Pb_{1-x}Sn_xTe$ может быть определена с помощью следующего соотношения [1]:

$$\varepsilon_g(x,\ T)=180-520\,x+0{,}47\,T\ \ (\text{мэВ}). \qquad (1)$$

Для PbTe($x=0$) зависимость величины зазора между валентными подзонами Δ от температуры может быть записана в виде [2]

$$\Delta(T)=(200-4\cdot10^{-1}\,T)\ \ (\text{мэВ}). \qquad (2)$$

Зонная структура PbTe для $T=300$ К и $T=80$ К, рассчитанная по формулам (1) и (2), представлена на рис. 1, *а*. Зонная структура

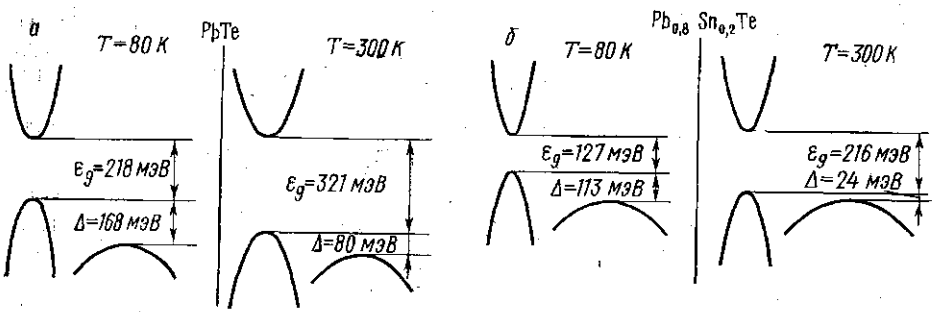

Рис. 1. Зонная структура PbTe при $T=80$ и 300 К (по данным работ [1, 2]) — *а*; зонная структура $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=80$ и 300 К (по данным работы [3]) — *б*

$Pb_{0,82}Sn_{0,18}Te$ приведена на рис. 1, *б* [3] (в дальнейшем будем пренебрегать различиями в зонных структурах $Pb_{0,82}Sn_{0,18}Te$ и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$. Согласно [3] зазор $\varepsilon_g+\Delta$ равен 240 мэВ, причем он не зависит от температуры. Как видно из рис. 1, *а*, для PbTe зазор $\varepsilon_g+\Delta$ слабо зависит от температуры: при $T=300$ К $\varepsilon_g+\Delta=401$ мэВ, а при $T=80$ К $\varepsilon_g+\Delta=386$ мэВ. Зная энергетические зазоры ε_g и Δ для PbTe и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ в интересующем нас температурном интервале, мы можем рассчитать зависимость плазменной частоты и частот смешанных плазмон-фононных мод от концентрации свободных носителей заряда.

Расчет плазменной частоты и частот смешанных плазмон-фононных мод. Если известны величины ε_g и Δ, то концентрации свободных электронов n, легких $p_л$ и тяжелых $p_т$ дырок можно определить по соотношениям, приводимым ниже. Методика расчета изложена в работе [4].

$$n = M_1 \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}\,\pi^2} \frac{(kT\varepsilon_g)^{3/2}}{P_{cv}^3} {}^0L_0^{3/2}\left(\frac{\varepsilon_F}{kT};\ \frac{kT}{\varepsilon_g}\right), \tag{3}$$

$$p_л = M_1 \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}\,\pi^2} \frac{(kT\varepsilon_g)^{3/2}}{P_{cv}^3} {}^0L_0^{3/2}\left(-\frac{\varepsilon_g+\varepsilon_F}{kT};\ \frac{kT}{\varepsilon_g}\right), \tag{4}$$

$$p_т = M_2 \frac{8\pi}{3h^3} (2m_{dT}^{(1)} kT)^{3/2} F_{3/2}\left(-\frac{\varepsilon_F+\varepsilon_g+\Delta}{kT}\right) \tag{5}$$

(обозначения аналогичны использованным в [4]).

При наличии трех типов носителей заряда плазменную частоту ω_p можно определить из соотношения

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_\infty}\left(\frac{n}{m_{n\,опт}} + \frac{p_л}{m_{p_л опт}} + \frac{p_т}{m_{p_т опт}}\right), \tag{6}$$

где ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Оптические эффективные массы электронов $m_{n\,опт}$ и легких дырок $m_{p_л\,опт}$ рассчитывались по формуле [4]

$$m_{опт} = \frac{3K_1}{2K_1+1} K_1^{-1/3} \frac{{}^0L_0^{3/2}}{{}^0L_{-1}^{3/2}} m_d^{(1)}(0), \tag{7}$$

где $K_1 = \frac{m_l}{m_t}$, а $m_d^{(1)}(0)$ задается соотношением

$$m_d^{(1)}(0) = \frac{3\hbar^2\varepsilon_g}{4P_{cv}^2}. \tag{8}$$

Для тяжелых дырок $m_{p_т опт} = 0{,}25\,m_0$ для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ и $m_{p_т опт} = 0{,}21\,m_0$ для PbTe. Эти величины получены экстраполяцией данных работы [5] для твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xTe$ с $x=0{,}5$ и $x=0{,}3$ на область $x=0{,}2$ и $x=0$. Значение $m_{p_т опт} = 0{,}21\,m_0$ (или $m_{p_т} = 1{,}1\,m_0$ — с учетом 12 долин) приводится также и в работе [2].

Анализируя данные по ИК-отражению, необходимо учитывать плазмон-фононное взаимодействие [4]. Если пренебречь затуханием плазмонов и фононов, то диэлектрическую проницаемость $\varepsilon(\omega)$ можно представить в виде [6]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty\left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\right) + \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty}{1 - \frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}\frac{\omega^2}{\omega_{L0}^2}}, \tag{9}$$

где ε_0 — статическая диэлектрическая проницаемость, ω_{L0} — частота $L0$-фонона. Утверждается [6], что частоты ω_+ и ω_-, обращающие выражение (9) в нуль, суть частоты смешанных плазмон-фононных мод. Учет затухания плазмонов и фононов изменяет величины ω_+ и ω_- незначительно [7]. Для расчетов частот ω_+ и ω_- (или соответствующих им длин волн световых квантов λ_+ и λ_-) были выбраны следующие значения параметров, входящих в формулу (9): $\varepsilon_\infty = 38$ [8], $\varepsilon_0 = 400$ [9], $\omega_{L0} = 110$ см$^{-1}$ [10]. Легко убедиться, что $\lambda_+ \leqslant 90$ мкм, а $\lambda_- > 300$ мкм. В дальнейшем нас будет интересовать лишь величина λ_+ (коротковолновая мода), так как ее легко определить экспериментально.

$\frac{\varepsilon_F}{kT}$	n, см$^{-3}$	$p_л$, см$^{-3}$	$p_т$, см$^{-3}$	$\frac{m_{n\,опт}}{m_0}$	$\frac{m_{p_л опт}}{m_0}$	λ_p, мкм	λ_+, мкм
—15,5	—	$2{,}4\cdot10^{19}$	$2{,}2\cdot10^{19}$	—	0,116	12	12
—13,5	—	$7{,}6\cdot10^{18}$	$3{,}8\cdot10^{18}$	—	0,103	22	22
—12,5	—	$3{,}6\cdot10^{18}$	$1{,}4\cdot10^{18}$	—	0,099	32	31
—11,5	—	$1{,}5\cdot10^{18}$	$5{,}3\cdot10^{17}$	—	0,097	48	43
—10,5	—	$5{,}9\cdot10^{17}$	$2{,}0\cdot10^{17}$	—	0,096	77	59
—9,5	$3{,}9\cdot10^{14}$	$2{,}2\cdot10^{17}$	$7{,}3\cdot10^{16}$	0,096	0,096	125	75
—8,5	$8{,}1\cdot10^{14}$	$8{,}2\cdot10^{16}$	$2{,}9\cdot10^{16}$	0,096	0,096	200	90
—7,5	$2{,}2\cdot10^{15}$	$3{,}0\cdot10^{16}$	$9{,}6\cdot10^{15}$	0,096	0,096	350	90
—5,0	$3{,}0\cdot10^{16}$	$2{,}2\cdot10^{15}$	$8{,}1\cdot10^{14}$	0,096	0,096	1100	90
—4,0	$8{,}2\cdot10^{16}$	$8{,}1\cdot10^{14}$	$2{,}9\cdot10^{14}$	0,096	0,096	220	90
—3,0	$2{,}2\cdot10^{17}$	$3{,}9\cdot10^{14}$	$1{,}1\cdot10^{14}$	0,096	0,096	135	76
—2,0	$5{,}9\cdot10^{17}$	—	—	0,096	—	84	62
—1,0	$1{,}5\cdot10^{18}$	—	—	0,097	—	52	45
0	$3{,}6\cdot10^{18}$	—	—	0,099	—	34	32
+1,0	$7{,}6\cdot10^{18}$	—	—	0,103	—	24	24
+2,0	$1{,}4\cdot10^{19}$	—	—	0,108	—	18	18

Результаты расчетов для PbTe при $T=300$ К представлены в таблице. Здесь приведены вычисленные по формулам (3)—(6), (7)—(9) значения концентраций носителей заряда, оптических эффективных масс носителей заряда, а также длины волн λ_p и λ_+, соответствующие частотам плазмонов ω_p и коротковолновых смешанных плазмон-фононных мод ω_+. Как видно из таблицы, если уровень Ферми лежит глубоко в запрещенной зоне ($-8{,}5 \leqslant \varepsilon_F/kT \leqslant -4{,}0$), то $\lambda_+=90$ мкм, или $\omega_+=111$ см$^{-1}$, что соответствует частоте продольного оптического фонона в PbTe [10]. Таким образом, в интервале концентраций, заключенном между двумя горизонтальными линиями в таблице, свободные носители заряда не влияют на спектр ИК-отражения, который в этом случае определяется только кристаллической решеткой вещества («остаточные лучи»). Следовательно, для теллурида свинца при $T=300$ К концентрацию свободных носителей заряда можно однозначно определить, если известно значение λ_+. Это заведомо не выполняется для $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=300$ К, где одному и тому же значению λ_+ могут соответствовать два набора n, $p_л$ и $p_т$. Для однозначного определения концентраций носителей в случае $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=300$ К необходимо сопоставить данные по ИК-отражению с результатами электрических измерений [4]. При азотной температуре λ_+ однознач-

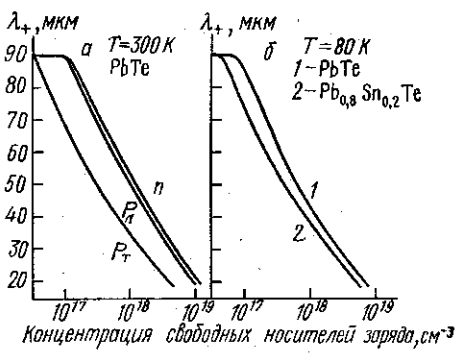

Рис. 2. Градуировочные кривые для определения концентрации свободных носителей заряда по точкам перегиба спектральных зависимостей коэффициента отражения в PbTe при $T=300$ К (*а*) и в PbTe и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=80$ К (*б*); n, $p_л$ и $p_т$ — концентрации электронов, легких и тяжелых дырок соответственно

но связана с концентрацией носителей заряда. Правда, вследствие зеркальной симметрии зоны проводимости и зоны легких дырок тип проводимости образца определить указанным методом не удается.

На рис. 2 представлены рассчитанные по приведенным выше формулам зависимости λ_+ от концентраций носителей заряда для PbTe при $T=300$ К (*а*), а также для PbTe и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=80$ К (*б*). Кривые рис. 2, *а* позволяют по известному значению λ_+ определить для образца *n*-типа концентрацию электронов, а для образца *p*-типа — легких и тяжелых дырок раздельно; кривые рис. 2, *б* относятся как к электронам, так и легким дыркам. Длину волны λ_+ можно определить из экспериментально измеренного спектра отражения образца по положению точки перегиба спектральной зависимости коэффициента отражения $R(\lambda)$ [4].

Что касается точности определения концентраций носителей заряда описанным выше методом, то здесь следует выделить три основных момента. Во-первых, это погрешность в определении λ_+ по точкам перегиба спектральных зависимостей $R(\lambda)$; она зависит от формы кривой $R(\lambda)$, а также от разрешения прибора и не превосходит, как правило, $\pm 5\%$. Во-вторых, это ошибка, обусловленная применением тех или иных теоретических концепций, введением упрощающих предположений, интерполяцией табличных интегралов ${}^mL^n_k$ и т. д. Оценки показывают, что суммарная ошибка, возникающая при этом, не превосходит $\pm 30\%$, т. е. именно эта ошибка и определяет погрешность метода. Наконец, измеряя спектр отражения, мы получаем информацию, относящуюся к тонкому (порядка $1/\alpha$, где α — коэффициент поглощения света) слою материала. Для интересующих нас материалов толщина «информативного» слоя зависит от концентрации носителей заряда в образце и составляет 10—30 мкм.

Таким образом, использование градуировочных кривых рис. 2 позволяет определять концентрацию свободных носителей заряда в PbTe при $T=300$ и 80 К и в $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$ при $T=80$ К по спектрам ИК-отражения с точностью не хуже $\pm 30\%$.

Авторы благодарят А. Г. Миронова за ценные замечания при обсуждении результатов работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Takita K., Truong Dinh Thanh, Tanaka S. Phys. Stat. Sol. (b), 1977, **80**, N 1, p. 149. [2] Виноградова М. Н., Тамарченко В. И., Прокофьева Л. В. Физ. и техн. полупроводников, 1975, **9**, № 2, с. 483. [3] Орлецкий В. Б., Сизов Ф. Ф., Лашкарев Г. В., Товстюк К. Д. Физ. и техн. полупроводников, 1975, **9**, № 2, с. 269. [4] Белов А. Г., Рашевская Е. П. Вестн. Моск. ун-та. Сер. Физ. Астрон., 1978, 19, № 2, с. 10. [5] Ocio M., Albany H. J. Phys. Lett., 1969, **30A**, N 3, p. 169. [6] Varga B. B. Phys. Rev., 1965, **137A**, N 7, p. 1896. [7] Singwi K. S., Tosi M. P. Phys. Rev., 1966, **147**, N 2, p. 658. [8] Ravich Ju. I., Efimova B. A., Tamarchenko V. I. Phys. Stat. Sol. (b), 1971, **43**, N 1, p. 11. [9] Bylander E. G., Hass M. Solid State Comm., 1966, **4**, N 1, p. 51. [10] Белов А. Г., Рашевская Е. П., Николаев М. И., Коновалов А. А. ФТТ, 1978, **20**, № 3, с. 840.

Поступила в редакцию
03.06.80