

未掺杂 P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 的点缺陷 及其电学性质

杨建荣 俞振中 汤定元

(中国科学院上海技术物理研究所)

用不同热处理条件对 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料进行了高温热处理, 样品温度的变化范围为 430°C 到 600°C , 汞源蒸汽压在样品的汞脱溶线和碲脱溶线之间变动。对淬火冷却后的样品进行变温和变磁场霍尔测量, 求得与温度和磁场无关的样品霍尔浓度和热处理条件的关系以及空穴迁移率和空穴浓度的关系。文章首先对 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料的缺陷机构作了比较系统的分析, 证明二次电离汞空位是未掺杂 P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料中受主点缺陷的唯一可能的来源, 并根据缺陷化学平衡理论和未掺杂 P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料的电学性质证明, 该材料并不存在明显的补偿。与高组份材料不同, P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料在低温简并条件下不存在载流子冻结效应, 这意味着它的受主能级已扩展成能带, 并和价带顶相交而形成带尾。接着, 使用这一缺陷模型对 P 型样品霍尔浓度、高温下样品的本征载流子浓度、PN 转变线和空穴迁移率等实验结果进行了理论分析和计算。文章结合具体的热处理过程, 运用热力学基本原理严格地导出了 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ 材料热处理过程中涉及到的所有彼此独立的缺陷化学质量作用定律方程。通过和实验结果比较证实了 Vydyanath 提出的高温下 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料的缺陷模型, 并从理论上分析了本征激发过程的热力学常数 K_i 和形成二次电离汞空位的热力学常数 $K_{V_{\text{Hg}}}$ 对实验结果的影响, 在此基础上将理论公式和随热处理条件而变的霍尔浓度的实验值进行数值拟合, 得到热力学常数 K_i 和 $K_{V_{\text{Hg}}}$ 的最佳拟合值 ($430^\circ\text{C} \leq T \leq 600^\circ\text{C}$):

$$K_i = 2.7 \times 10^{29} T^3 \exp(-0.23 \text{ eV} / k_B T) \quad (\text{cm}^{-6}),$$

$$K_{V_{\text{Hg}}} = 7.3 \times 10^{58} T^3 \exp(-2.07 \text{ eV} / k_B T) \quad (\text{cm}^{-9} \cdot \text{atm}).$$

根据热力学常数 K_i 求得的高温下 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料的本征载流子浓度明显大于现有理论的计算值, 通过分析, 我们认为这一差别可能是禁带宽度的温度系数在高温下有所减小的缘故, 通过比较得到温度系数的减小量约为 $1.8 \times 10^{-4} \text{ eV} / \text{K}$ 。将求得的热力学常数外推到 PN 转变线所在温区 ($250^\circ\text{C} \sim 450^\circ\text{C}$), 并假定材料中的施主缺陷主要是残余施主杂质, 其浓度为 $[F']$, 则求得 PN 转变线方程为

$$P_{\text{Hg}} = 5.4 \times 10^{29} [F']^{-1} \exp(-1.84 \text{ eV} / k_B T)。$$

由于残余施主杂质浓度的波动, P-N 转变线将扩展成 P-N 转变带。这一结论已被现有的实验结果所证实, 并且, 上式和现有的实验结果在定量上的一致性也是令人满意的。最后, 本文对 P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料的空穴迁移率和空穴浓度的关系进行了理论计算, 通过和实验结果比较发现 P 型 $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ 材料中的主要散射机构包括晶格散射、电离中心散射和空穴-空穴散射三部分。