

Физика

УДК 621.315.592

А. И. ВАГАНЯН

ИЗМЕНЕНИЕ ПОЛОЖЕНИЙ ОСНОВНЫХ МИНИМУМОВ ЗОНЫ
ПРОВОДИМОСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИХ
СОСТАВА

Предлагается формула, которая позволяет определить изменения положений основных минимумов зоны проводимости твердых растворов в зависимости от их состава. Результаты, полученные приведенной формулой, находятся в достаточно хорошем согласии с результатами, полученными другими методами.

Введение. Для исследования кинетических свойств твердых растворов и объяснения полученных результатов важно знать их зонную структуру. В свою очередь, знание зонной структуры дает возможность выбором состава получить твердые растворы с определенными значениями параметров. Поэтому важно знать, как изменяются положения различных минимумов зоны проводимости в зависимости от состава твердых растворов.

Результаты и обсуждение. Во многих работах (напр., в [1]) изменение положений минимумов в зависимости от состава определяется по квадратичному закону

$$E_i(x) = a + bx + cx^2 \quad (1)$$

или

$$E_i(x) = a + bx + cx(1-x), \quad (2)$$

где a , b и c определяются экспериментально и для каждого минимума отдельно.

В работе [2] приводится более общее выражение для определения изменения положений основных минимумов в зоне проводимости в твердых растворах между соединениями типа A^3B^5 и A^2B^6 :

$$E_i(x) = E_i(0) + [E_i(1) - E_i(0)]x - \frac{0,3x(1-x)}{\sqrt{0,5[E_i(1) + E_i(0)]}}, \quad (3)$$

где i – Γ, X или L -минимумы. Для твердых растворов типа $A_{1-x}B_xC$ $x=0$ или $x=1$. Это эмпирическая формула, которая в ряде случаев достаточно хорошо описывает изменения Γ, X, L -минимумов в зависимости от состава твердого раствора. Несоответствие размерностей в формуле (3) можно легко уstra-

нить, вводя в третий член единичный коэффициент с соответствующей размерностью. Заметим, что когда $E_i(0)$ и $E_i(1)$ близки по значению, ход изменения минимумов от состава по формуле (3) почти всегда дает минимум в средней части зависимости, что, на наш взгляд, маловероятно и труднообъяснимо. Более характерной для твердых растворов является монотонность хода $E_i(x)$. А когда энергетические расстояния между $E_i(0)$ и $E_i(1)$ велики, роль второго члена в формуле (3) возрастает и, наоборот, роль третьего члена уменьшается. Тогда ход изменения $E_i(x)$ получается близким к линейному, что также маловероятно.

В данной работе предлагается новый подход для определения положений минимумов. Если для соединений типа A^3B^5 и A^2B^6 построить график зависимости $\ln \frac{E_{gi}}{a_i^3}$ от изменения постоянной решетки (a_i), то для различных групп соединений значения $\ln \frac{E_{gi}}{a_i^3}$ располагаются на прямых линиях. Это приводит к мысли, что такая линейная зависимость может иметь место и для твердых растворов. Согласно закону Вегарда, изменение постоянной решетки линейно зависит от состава. Следовательно, изменение состава твердого раствора приводит к изменению постоянной решетки, а это, в свою очередь, к пропорциональному изменению вышеуказанной величины $\ln \frac{E_{gi}}{a_i^3}$.

Из сказанного следует

$$\ln \left[\frac{E_i(x)}{a_x^3} \right] - \ln \left[\frac{E_i(0)}{a_0^3} \right] = k(a_x - a_0), \quad (4)$$

откуда получим

$$E_i(x) = E_i(0) \left(\frac{a_x}{a_0} \right)^3 \exp[k(a_x - a_0)], \quad (5)$$

где коэффициент k определяется выражением

$$k = \frac{\ln \frac{E_i(1)}{a_1^3} - \ln \frac{E_i(0)}{a_0^3}}{a_1 - a_0}. \quad (6)$$

Как видно из (5), определяемые значения $E_i(x)$ сложным образом зависят от постоянных решеток исходного (a_0) и определяемого (a_x) соединений. Преимущество такого подхода в том, что, во-первых, $E_i(x)$ определяется на основе значений $E_i(0)$ и $E_i(1)$, а также постоянных решеток исходных соединений, значения которых почти для всех соединений типа A^2B^6 и A^3B^5 с высокой точностью имеются в литературе (см., напр., [3]). Во-вторых, независимо от положения минимумов $E_i(0)$ и $E_i(1)$ формулой (5) (в отличие от (3)) ход изменения $E_i(x)$ описывается монотонной закономерностью, которая, как было сказано, более характерна для твердых

растворов. В-третьих, в формулу (5) не входят постоянные a , b и c , требующие дополнительного экспериментального определения, как в (1).

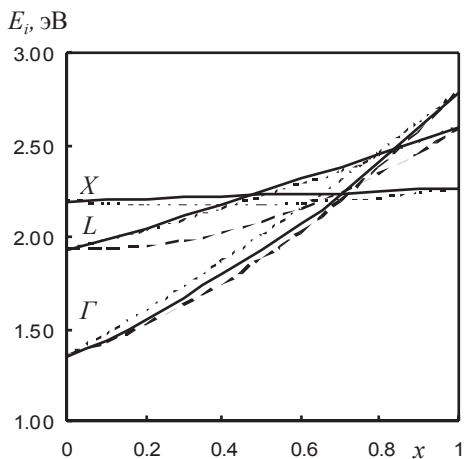


Рис. 1. Кривые зависимости Γ, X, L -минимумов от состава твердого раствора $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$.

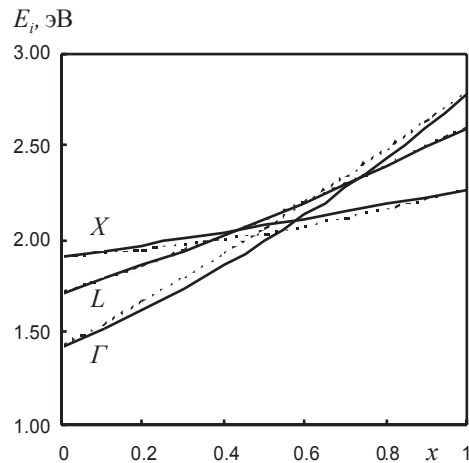


Рис. 2. Кривые зависимости Γ, X, L -минимумов от состава твердого раствора $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$.

Чтобы выяснить насколько предложенная формула правильно отображает изменения минимумов в зависимости от составов твердых растворов, были вычислены положения Γ, X, L -минимумов для некоторых твердых растворов типа A^3B^5 . На рисунках 1–4 приведены кривые зависимостей, в основном рассчитанные по формулам (5) (сплошная линия) и (3) (точки).

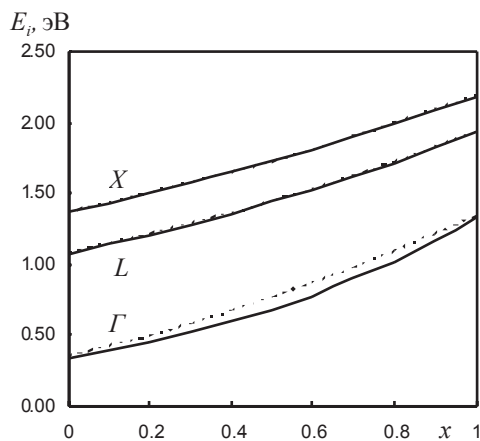


Рис. 3. Кривые зависимости Γ, X, L -минимумов от состава твердого раствора $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$.

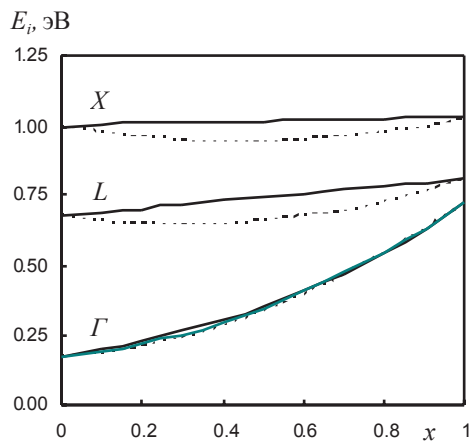


Рис. 4. Кривые зависимости Γ, X, L -минимумов от состава твердого раствора $\text{InGa}_{1-x}\text{Sb}_x$.

На рис. 1 и 2 приведены кривые зависимостей Γ, X, L -минимумов для твердых растворов $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{P}$ и $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$, у которых исходные соединения имеют качественно различные зонные строения, а на рис. 3 и 4 – растворов $\text{InAs}_{1-x}\text{P}_x$ и $\text{InGa}_{1-x}\text{Sb}_x$ с одинаковым исходным зонным строением. Для всех этих твердых растворов наблюдается достаточно хорошее согласие между результатами, рассчитанными по формулам (3) и (5). На рис. 1 приведены

также кривые зависимостей для определения положений Γ и L -минимумов, рассчитанных по формулам, приведенным в работе [4] (пунктир). Как видно из рисунка, кривая Γ -минимума из [4] проходит несколько ниже кривой, построенной по формуле (5), но значительно отклоняется от кривой, проведенной по (3). Что касается L -минимумов, то результаты, полученные на основе формул (3) и (5) почти совпадают, а кривая, проведенная по формуле из работы [4], значительно отклоняется от них.

Нами рассчитаны также положения Γ, X, L -минимумов для твердого раствора $\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Здесь наблюдается хорошее согласие для X и L -минимумов, а для Γ -минимума наблюдается некоторое расхождение, обусловленное, на наш взгляд, обстоятельством, указанным выше, которое приближает зависимость $E_i(x)$ к линейной.

Из вышеизложенного вытекает, что предлагаемая формула достаточно хорошо отражает ход изменения положений главных минимумов для твердых растворов в зависимости от их состава. В редких случаях, когда в ходе изменения минимумов наблюдаются отклонения от монотонности, можно использовать формулы типа (1) или (2).

Заключение. Предлагается новый подход определения положения главных минимумов зоны проводимости твердых растворов в зависимости от их состава. Приводится формула, которая позволяет достаточно хорошо описывать указанную зависимость. Результаты, полученные по формуле (5), в большинстве случаев находятся в хорошем согласии с литературными данными.

*Кафедра физики полупроводников
и микроэлектроники*

Поступила 08.12.2006

ЛИТЕРАТУРА

1. Смирнова Г.Ф. – ФТП, 1977, т. 11, вып. 8, с. 1550–1554.
2. Suiyokwaishi A. – Trans. Mining Metall., 1972, v. 17, № 7, p. 293–311.
3. Шалимова К.В. Физика полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1985.
4. Handbook Series on Semiconductor Parameters (edited by Levinshtein M., Rumyantsev S. and Shur M.). V. 2. Ternary and Quaternary III-V Compounds, 1999, p. 37–57.

Ա. Ը. ՎԱՀԱՆՅԱՆ

ՀԱՂՈՐԴԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԳՈՏՈՒ ՀԻՄՆԱԿԱՆ
ՄԻՆԻՍՏՐԱՆՈՒԹՅԱՆ ԴԻՐՔԻ ՓՈՓՈԽՈՒԹՅՈՒՆԸ ԿԱՆԿԱԾ ՊԻՆԴ
ԼՈՒԾՈՒՅԹՆԵՐԻ ԲԱՂԱԴՐՈՒԹՅՈՒՆԻՑ

Ա մ փ ո փ ու մ

Առաջարկվում է բանաձև, որը թույլ է տալիս որոշել պինդ լուծույթների հաղորդականության գոտու մինիմումների դիրքը կախված նրանց բաղա-

դրությունից: Այդ բանաձևով ստացված տվյալները բավական լավ համընկնում են այլ մեթոդներով ստացված արդյունքների հետ:

A. I. VAHANYAN

CHANGE OF POSITIONS OF THE CONDUCTION BAND MINIMA
DEPENDING ON COMPOSITION OF SOLID SOLUTIONS

Summary

A formula allowing to define changes of positions of the basic minima in a zone of conductivity of solid solutions depending on the composition of the latter is obtained. The data analyzed by the derived formula are compared with data verified by other methods. The comparison yielded good data agreement.