

Systematik charakteristischer Temperaturen von Halbleitern mit Zinkblende-Gitter

H. WAGINI

Forschungslaboratorium der Siemens AG, Erlangen

(Z. Naturforsch. 22 a, 1135—1136 [1967]; eingegangen am 24. Mai 1967)

DEBYE-Temperatur und charakteristische Temperatur der longitudinal optischen Phononen sind wichtige Größen zur Beschreibung von physikalischen Effekten in Festkörpern, bei denen Phononen im Spiele sind; z. B. gehören dazu die Transportphänomene. So ist bei der häufig vorkommenden Streuung der Ladungsträger an polaren optischen Phononen die Energieabhängigkeit der freien Weglänge ober- und unterhalb der charakteristischen optischen Temperatur wesentlich verschieden. Für die Gitterwärmeleitfähigkeit hat andererseits die DEBYE-Temperatur große Bedeutung.

Die experimentelle Bestimmung der charakteristischen Temperaturen ist meist sehr aufwendig (z. B. spe-

zifische Wärme bei tiefsten Temperaturen, optische Messungen) und daher noch lückenhaft. Es erscheint wünschenswert, auch für die restlichen Substanzen die charakteristischen Temperaturen zu kennen.

Somit wird hier der Versuch unternommen, aus den bekannten Daten eine gewisse Systematik abzulesen, die es gestattet, innerhalb einer Gruppe die noch unbekannten charakteristischen Temperaturen aus einfachen Parametern zu ermitteln. Dabei wird halb empirisch mit dem einfachen Modell der linearen Kette gearbeitet.

Wir beschränken unsere Betrachtungen auf das Diamant- und Zinkblende-Gitter. Die gut untersuchten III—V-Verbindungen dienen dabei vor allem als Testsubstanzen. Die an dieser Gruppe erkannten Gesetzmäßigkeiten werden dann auf die II—VI-Verbindungen ausgedehnt.

Für Realkristalle ist die DEBYE-Temperatur eine temperaturabhängige Größe¹, da das zugrunde liegende einfache Modell einheitlicher Phonongeschwindigkeiten nicht zutrifft. Aus den elastischen Konstanten läßt

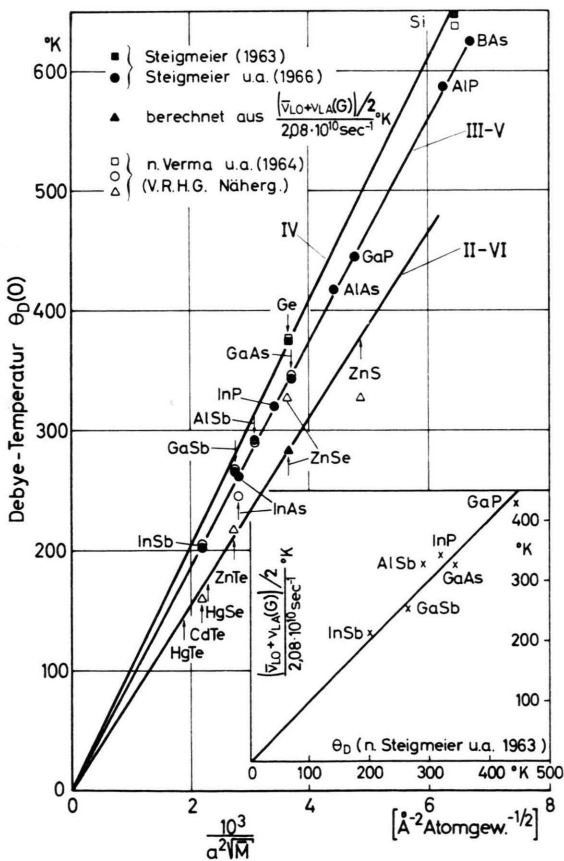


Abb. 1. DEBYE-Temperatur $\Theta_D(0)$ bei 0 °K als Funktion einer typischen Größe aus Gitterkonstante a und mittlerem Atomgewicht \bar{M} . Rechts unten: Korrelation zwischen DEBYE-Temperatur und arithmetischem Mittel von mittlerer longitudinal optischer und von longitudinal akustischer Temperatur für III—V-Verbindungen.

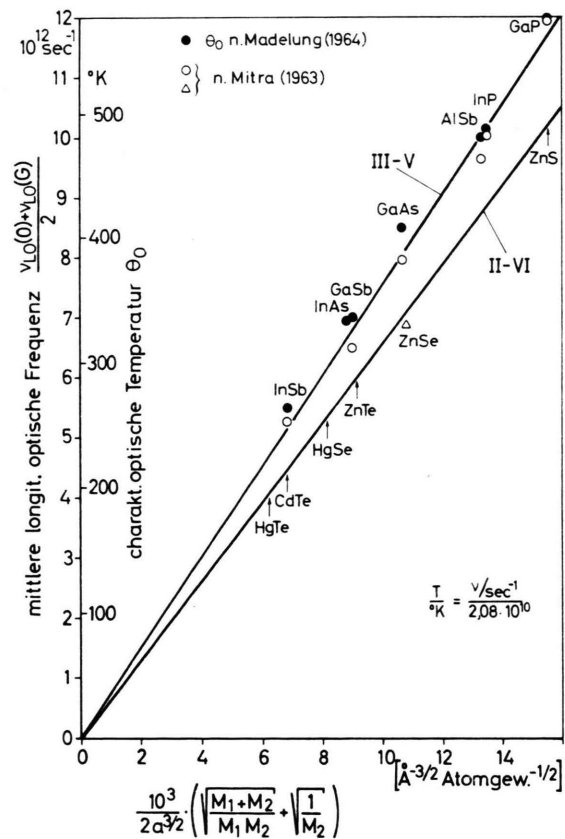


Abb. 2. Mittlere longitudinal opt. Frequenz $\frac{1}{2}(\nu_{LO}(0) + \nu_{LO}(G))$ bzw. charakteristische Temperatur Θ_0 für longitudinal optische Phononen als Funktion einer typischen Größe aus Gitterkonstante a und den Massen M_1 und M_2 der an der Verbindung beteiligten Elemente.

¹ U. PIESBERGEN, Z. Naturforsch. 18 a, 141 [1963].



sich die DEBYE-Temperatur am absoluten Nullpunkt $\Theta_D(0)$ berechnen. STEIGMEIER² hat dies für die III–V-Halbleiter durchgeführt und VERMA u. a.³ auch noch für einige weitere kubische Kristalle. STEIGMEIER² erhielt die einfache Beziehung:

$$\Theta_D(0) \sim G(a) \cdot (\bar{M} a^3)^{-1/2}$$

(a = Gitterkonstante, \bar{M} = mittleres Atomgewicht). In Abb. 1 ist gezeigt, daß $G(a)$ annähernd mit $\sqrt{1/a}$ wiederzugeben ist, da die von STEIGMEIER² errechneten DEBYE-Temperaturen sehr genau auf einer Geraden durch den Nullpunkt mit $1/(a^2 \sqrt{\bar{M}})$ als Abszisse liegen. Die entsprechenden Werte von VERMA u. a.³ in der VRHG*-Näherung sind damit in bester Übereinstimmung. Für Ge und Si⁴ ergibt sich in der gleichen Darstellung (Abb. 1) eine andere Gerade. Es erscheint berechtigt, auch für die II–VI-Verbindungen eine Gerade zu erwarten. Die vier Werte von VERMA u. a.³ streuen allerdings diesmal stärker; das mag zum Teil seine Ursache in der Ungenauigkeit der elastischen Konstanten haben.

MITRA⁵ hat von einigen Halbleitern mit Zinkblendegitter optische und akustische Grenzfrequenzen zusammengestellt. Die longitudinal optischen Frequenzen bei $k=0$, $\nu_{LO}(0)$, von sowohl III–V- (vgl. ⁶) als auch II–VI-Halbleitern sind jeweils annähernd proportional zu $a^{-3/2} \cdot \sqrt{(M_1 + M_2)/M_1 M_2}$. Ebenso besteht für die gleiche Phononenart, jedoch an der Grenze der BRILLOUIN-Zone ($\nu_{LO}(G)$), eine Proportionalität zu $a^{-3/2} \cdot \sqrt{1/M_2}$ mit $M_2 < M_1$. Da innerhalb einer Verbindungsgruppe für obige beide Grenzfrequenzen der Proportionalitätsfaktor fast gleich ist, läßt sich die mittlere longitudinal optische Frequenz

$$\bar{\nu}_{LO} = \frac{1}{2}(\nu_{LO}(0) + \nu_{LO}(G)),$$

welche die charakteristische Temperatur der longitudinal optischen Phononen Θ_0 definiert, sehr gut als Gerade durch den Nullpunkt wiedergeben, wenn

$$a^{-3/2} \cdot \left\{ \sqrt{(M_1 + M_2)/M_1 M_2} + \sqrt{1/M_2} \right\}$$

als Abszisse verwendet wird (s. Abb. 2). Die Gerade für die II–VI-Verbindungen mit Zinkblendegitter ist knapp über den einzigen zuverlässigen Wert ZnSe gelegt worden, da die entsprechenden Phononen bei $k=0$, die von mehreren II–VI-Verbindungen bekannt sind, diesen Verlauf erwarten lassen. Die charakteristischen optischen Temperaturen der III–V-Verbindungen nach

MADELUNG⁷ streuen etwas in Richtung zu größeren Temperaturen.

Die charakteristischen Temperaturen, die sich auf Grund dieser Systematik aus den beiden Abb. 1 und 2 ergeben, sind in Tab. 1 zusammengestellt. Weiterhin

		\bar{M}	a (Å)	ϱ (g/cm ³)	$\Theta_D(0)$ (°K)	Θ_0 (°K)
IV	Si	28	5,42	2,3	655	—
	Ge	73	5,65	5,3	374	—
III–V	BP	21	4,54	3,0	990	1210
	AlP	29	5,45	2,4	585	645
	BAs	43	4,78	5,2	624	1075
	GaP	50	5,45	4,1	445	558
	AlAs	51	5,62	3,8	415	577
	GaAs	72	5,65	5,2	345	384
	InP	73	5,87	4,7	317	484
	AlSb	74	6,14	4,2	286	480
	InAs	95	6,06	5,6	262	318
	GaSb	96	6,10	5,6	255	324
II–VI	InSb	118	6,48	5,7	203	244
	ZnS	49	5,42	4,1	375	490
	ZnSe	72	5,67	5,2	284	340
	ZnTe	97	6,10	5,7	210	288
	CdTe	120	6,48	5,8	166	214
	HgSe	140	6,08	8,2	175	257
	HgTe	165	6,43	8,2	144	195

Tab. 1.

\bar{M} = mittleres Atomgewicht, a = Gitterkonstante, ϱ = Dichte, $\Theta_D(0)$ = DEBYE-Temperatur für 0 °K (nach Abb. 1), Θ_0 = charakteristische Temperatur der longitudinal optischen Phononen (nach Abb. 2).

läßt sich an den III–V-Verbindungen aus Abb. 1 rechts unten erkennen, daß die DEBYE-Temperatur annähernd der Temperatur für das arithmetische Mittel von mittlerer longitudinaler optischer Frequenz $\bar{\nu}_{LO}$ und von longitudinal akustischer Grenzfrequenz $\nu_{LA}(G)$ gleichzusetzen ist:

$$\frac{\Theta_D(0)}{^\circ\text{K}} \approx \frac{\frac{1}{2}(\bar{\nu}_{LO} + \nu_{LA}(G))}{2,08 \cdot 10^{10} \text{ sec}^{-1}}.$$

Die auf diese Weise berechnete DEBYE-Temperatur von ZnSe, dessen longitudinal akustische Grenzfrequenz $\nu_{LA}(G)$ aus ⁵ und $\bar{\nu}_{LO}$ aus Abb. 2 bekannt sind, liegt genau auf der Geraden in Abb. 1 (▲).

² E. F. STEIGMEIER, Appl. Phys. Lett. **3**, 6 [1963].

³ J. K. D. VERMA, B. D. NAG u. P. S. NAIR, Z. Naturforschg. **19 a**, 1561 [1964].

* VOIGT–REUSS–HILL–GILVARRY.

⁴ E. F. STEIGMEIER u. I. KUDMAN, Phys. Rev. **141**, 767 [1966].

⁵ S. S. MITRA, Phys. Rev. **132**, 986 [1963].

⁶ H. WAGINI, Z. Naturforschg. **21 a**, 2096 [1966].

⁷ O. MADELUNG, Physics of III–V-Compounds, J. Wiley & Sons, New York 1964, S. 108.