

С.А. Федосов¹, Д.А. Захарчук², О.В. Замуруєва¹, В.Є. Сахнюк¹, Л.І. Панасюк²

Волинський національний університет імені Лесі Українки¹
Луцький національний технічний університет²

РІВЕНЬ ФЕРМІ В КРИСТАЛАХ АНТИМОНІДУ КАДМІЮ ПРИ НАЯВНОСТІ РАДІАЦІЙНИХ ДЕФЕКТІВ

За експериментальними результатами температурних залежностей концентрації носіїв струму розраховано зміни положення рівня Фермі у спеціально нелегованих кристалах антимоніду кадмію до і після опромінення гамма-квантами ⁶⁰Со. Розглянуто особливості положення рівня Фермі від температури та дози гамма-опромінення в області домішкової провідності. Дослідження базується на результатах експериментальних даних холлівських вимірювань і електропровідності. Для коректної оцінки та розрахунку температурної залежності рівня Фермі проведено аналіз розв'язків рівняння електронейтральності.

Ключові слова: рівень Фермі, антимонід кадмію, гамма-опромінення, радіаційні дефекти.

С.А. Федосов, Д.А. Захарчук, О.В. Замуруєва, В.Е. Сахнюк, Л.И. Панасюк

УРОВЕНЬ ФЕРМИ В КРИСТАЛАХ АНТИМОНИДА КАДМИЯ ПРИ НАЛИЧИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

По экспериментальным результатам температурных зависимостей концентрации носителей тока рассчитаны изменения положения уровня Ферми в специально нелегированных кристаллах антимонида кадмия до и после облучения гамма-квантами ⁶⁰Со. Рассмотрены особенности положения уровня Ферми от температуры и дозы гамма-облучения в области примесной проводимости. Исследование базируется на результатах экспериментальных данных холловских измерений и электропроводимости. Для корректной оценки и расчета температурной зависимости уровня Ферми проведен анализ решений уравнения электронейтральности.

Ключевые слова: уровень Ферми, антимонид кадмия, гамма-облучения, радиационные дефекты.

S. Fedosov, D. Zakharchuk, O. Zamurujeva, V. Sakhnyuk, L. Panasjuk

THE FERMI LEVEL IN CADMIUM ANTIMONIDE CRYSTALS IN THE PRESENCE OF RADIATION DEFECTS

According to the experimental results of the temperature dependences of the current carrier concentration, changes in the position of the Fermi level in specially undoped cadmium antimonide crystals before and after irradiation with ⁶⁰Co gamma quanta were calculated. Peculiarities of Fermi level position from temperature and gamma radiation dose in the region of impurity conductivity are considered. The study is based on the results of experimental data of Hall measurements and electrical conductivity. An analysis of the solutions of the electroneutrality equation was performed to correctly estimate and calculate the temperature dependence of the Fermi level.

Keywords: Fermi level, cadmium antimonide, gamma radiation, radiation defects.

Постановка проблеми. На сучасному етапі розвитку фізики напівпровідників не втрачає актуальність дослідження впливу дефектів кристалічної ґратки, – починаючи від плавних просторових розподілів питомого опору в кристалах до шаруватих періодичних неоднорідностей, дефектів радіаційного походження і завершуючи неоднорідностями структури і хімічного складу таких нанооб'єктів, якими є надґратки, квантові дроти і квантові точки, – на кінетичні, оптичні, люмінесцентні та інші явища, що розвиваються в названих об'єктах. Введення вище згадуваних дефектів у кристалічну ґратку, а також різні фізико-активні впливи безумовно, в тій чи іншій мірі, змінюють такі важливі характеристики зонної структури напівпровідників, як ширина забороненої зони та положення рівня Фермі. Вивчення проблем штучного створення матеріалів з бажаними прогнозованими характеристиками зонного спектра є важливим при конструюванні різного роду напівпровідникових датчиків та пристроїв у зв'язку з жорсткими вимогами електронної техніки і новими можливостями мікро- та нанотехнологій [1].

При дослідженні зонної структури напівпровідників з глибокими рівнями цікавим є визначення положення рівня Фермі залежно від температури, що дає корисну інформацію про розподіл носіїв заряду в енергетичних зонах. Рівень Фермі залежить від температури і концентрації носіїв заряду. Його положення може сильно змінюватися при введенні домішок, що створюють локалізовані стани, оскільки рівень Фермі визначає розподіл електронів по станах. Вводячи домішку, утворюються в забороненій зоні локалізовані стани, в яких можуть знаходитися

як електрони, так і дірки. Перерозподіл електронів по станах при утворенні дискретних рівнів в забороненій зоні регулюється безпосередньо зміною положення рівня Фермі. Вивченню зонної структури CdSb присвячені роботи [2-5]. Зокрема, авторами [2] проведено дослідження положення рівня Фермі для кристалів антимоніду кадмію, легованих міддю, при низьких температурах ($T = 4,2 \div 50$ К).

Постановка завдань. В роботі поставлено мету – за експериментальними результатами температурних залежностей концентрації носіїв струму розрахувати зміни положення рівня Фермі E_F в області домішкової провідності ($T = 77 \div 300$ К) кристалів антимоніду кадмію до і після опромінення γ -квантами ^{60}Co . Для коректного визначення $E_F(T)$ провести аналіз розв'язку рівняння електронейтральності.

Викладення основного матеріалу. У напівпровідниках енергія Фермі визначається умовою розподілу електронів по рівнях енергії валентної зони, зони провідності і дискретних рівнях локалізованих станів. Розподіл електронів по станах описується рівнянням електронейтральності:

$$n + n_d - p - p_a = N_d - N_a = N_d'. \quad (1)$$

Якщо виразити n , n_d , p , p_a через E_F , то отримаємо рівняння, за допомогою якого можна визначити положення рівня Фермі в загальному випадку. Коли концентрації донорної N_d і акцепторної N_a домішки значно відрізняються, то напівпровідник поводить себе як напівпровідник з одним типом домішки.

Для спеціально нелегованого p -CdSb рівняння електронейтральності (1) приймає вид ($N_a \gg N_d$):

$$p + p_a - n = N_a, \quad \text{або} \quad p = n - p_a = n + N_a^-. \quad (2)$$

Розв'язуючи (2), положення рівня Фермі у невідродженому напівпровіднику p -типу описується двома виразами в усе можливу інтервалі температур. Вираз, коли основну роль відіграє іонізація домішки ($n \ll N_a^-$ і $p = N_a^-$)

$$E_F = E_a - kT \ln \left[\frac{1}{4} \left(\sqrt{1 + \frac{8N_a}{N_v} \exp\left(\frac{\Delta E_a}{kT}\right)} - 1 \right) \right] \quad (3)$$

справедливий в області від $T = 0$ К до температури насичення T_n . Область від T_n і вище ($N_a^- = N_a$ і $n \geq N_a$) описується:

$$E_F = E_v - kT \ln \left[\frac{N_a}{2N_v} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_a^2}} \right) \right]. \quad (4)$$

При достатньо низьких температурах, коли у (3) виконується нерівність:

$$\frac{8N_a}{N_v} \exp\left(\frac{\Delta E_a}{kT}\right) \gg 1, \quad (5)$$

$$E_F = \frac{E_v + E_a}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_a}{2N_v}\right). \quad (6)$$

У випадку

$$\frac{8N_a}{N_v} \exp\left(\frac{\Delta E_a}{kT}\right) \ll 1 \quad (7)$$

положення рівня Фермі визначається:

$$E_F = E_v - kT \ln\left(\frac{N_a}{N_v}\right). \quad (8)$$

Із підвищенням температури ($T \geq T_n$) концентрація електронів зростає та стає порівняна з концентрацією дірок $p = n + N_a$ і $E_F(T)$ описується (4). При виконанні у (4) граничних умов:

$$\frac{4n_i^2}{N_a^2} \ll 1 \quad \text{і} \quad \frac{4n_i^2}{N_a^2} \gg 1$$

положення рівня Фермі визначається, відповідно, ($p = N_a$, $n = \frac{n_i^2}{N_a}$) (8) та як у випадку власного напівпровідника ($p = n = n_i$):

$$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right) = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3kT}{4} \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right). \quad (9)$$

Оскільки вимірювання проводилися в області підвищених температур ($T \approx 300$ К), необхідно було оцінити можливий вклад власної провідності. Для цього розраховано температурну залежність концентрації власних носіїв струму $n_i = f(10^3/T)$ (рис. 1а) з урахуванням залежності ширини забороненої зони від температури:

$$n_i = n = p = (N_C N_V)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right),$$

де $E_g(T) = 0,535 - 3,56 \times 10^{-4} T$ еВ [6].

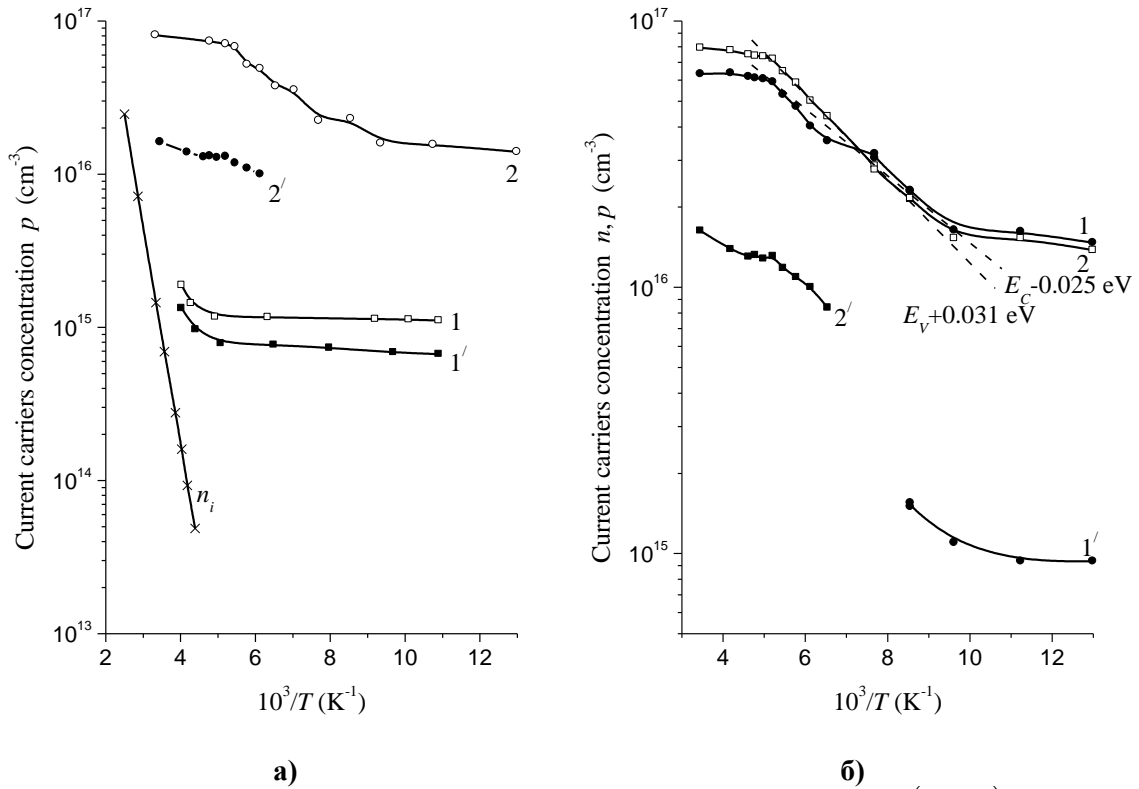


Рис. 1. Температурні залежності концентрації носіїв струму p , $n = f(10^3/T)$ у спеціально нелегованому CdSb:

- а) 1, 2 – неопроміненому; 1' – γ -опроміненому ($\Phi = 2 \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$); 2' – γ -опроміненому ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$);
- б) 1 – неопроміненому; 1', 2' – γ -опроміненому ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$); 2 – теоретично розрахована концентрація електронів у γ -опроміненому ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$).

Ефективні густини станів в зоні провідності і у валентній зоні відповідно дорівнюють:

$$N_C = 2,510 \times 10^{19} M \left(\frac{m_n^*}{m_0}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} = 4,472 \times 10^{18} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2} \text{ см}^{-3},$$

$$N_V = 2,510 \times 10^{19} M \left(\frac{m_p^*}{m_0} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} = 8,216 \times 10^{18} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \text{ см}^{-3},$$

де $M = 2$ – число екстремумів зон; $m_n^* \approx 0,2 m_0$ і $m_p^* \approx 0,3 m_0$ – ефективні маси густини станів відповідно електронів та дірок [7].

Вважаючи, що концентрація акцепторів у p -CdSb (криві 1, 1' рис. 1а) до та після опромінення γ -квантами ^{60}Co ($\Phi = 2 \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$), відповідно, мають значення N_a $1,11 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ і $6,7 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$, розраховано для граничних умов (криві 1-3, 1'-3' рис. 2а) положення $E_F(T)$ за формулами: 1, 1' – (6); 2, 2' – (8); 3, 3' – (9). Аналіз теоретичних розрахунків показує, що для досліджуваних кристалів температура насичення (виснаження) T_n є меншою 50 К (перетин кривих 1, 2 і 1', 2' рис. 2а), а температура переходу від виснаження домішки до власної провідності (перетин кривих 2, 3 і 2', 3' рис. 2а) $\approx 292 \text{ К}$ і $\approx 278 \text{ К}$.

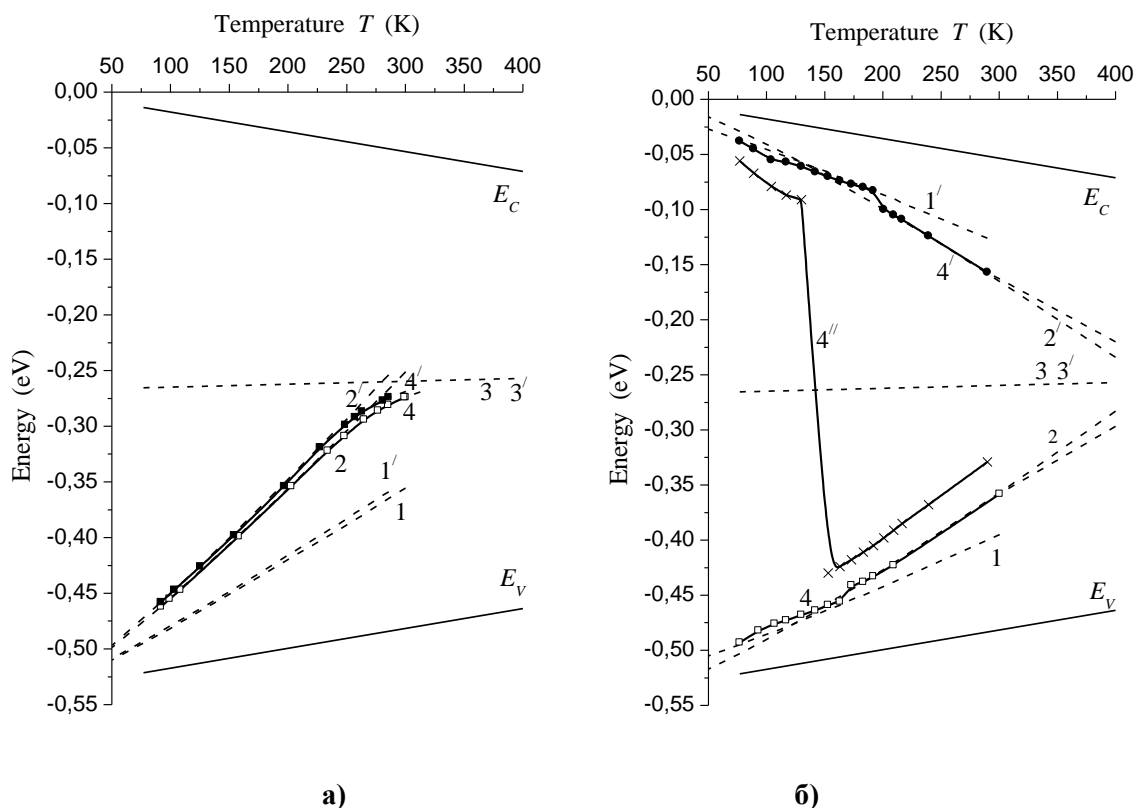


Рис. 2. Температурні залежності положення рівня Фермі $E_F = f(T)$ у нелегованому p -CdSb до (1-4) і після (1'-4') опромінення (1-3, 1'-3' – граничні умови):

- а) 4 – неопромінену ($N_a \approx 10^{15} \text{ см}^{-3}$); 4' – γ -опромінену ($\Phi = 2 \times 10^{18} \text{ см}^{-2}$);
 б) 4 – неопромінену ($N_a \approx 7 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$) з $E_V + 0,031 \text{ eV}$; 4' – γ -опромінену ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$) з $E_C - 0,025 \text{ eV}$; 4'' – γ -опромінену з $E_V + 0,031 \text{ eV}$ і $E_C - 0,025 \text{ eV}$.

Згідно умови (7) досліджуваний діапазон температур в основному відповідає області виснаження: домішка уся іонізована, концентрація дірок $p = N_a$ залишається сталою ($p = f(10^3/T)$ рис. 1а), концентрація електронів $n = n_i$ (неосновних носіїв струму) зростає, рівень Фермі визначається згідно (8)

$$E_F = E_V - kT \ln \left(\frac{p}{N_V} \right) \quad (10)$$

і наближається до середини забороненої зони (криві 4, 4' рис. 2а). При $T \approx 230$ К і ≈ 215 К для неопромінених та опромінених p -CdSb з подальшим ростом n відбувається і зростання p (уся домішка іонізована і необхідно враховувати іонізацію основної речовини $p = n_i + N_a$):

$$E_F = E_V - kT \ln\left(\frac{n_i + N_a}{N_V}\right).$$

Для спеціально нелегованого більш дефектного p -CdSb з $N_a \approx 6,8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (крива 2 рис. 1а, рис. 1б) в досліджуваному діапазоні температур ($T = 77 \div 300$ К) спостерігається прояв рівня $E_V + 0,031$ еВ, що ускладнює розрахунок $E_F(T)$. На основі аналогічного p -CdSb з $N_a \approx 1,11 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ аналізу та експериментальних результатів зроблено відповідні побудови для p -CdSb з $N_a \approx 6,8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ (криві 1-4 рис. 2б). Залежність 4 рис. 2б в області низьких температур $T \leq 160$ К, коли виконується гранична умова (5), описується згідно (6):

$$E_F = \frac{E_V + E_a}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{p}{2N_V}\right),$$

а з подальшим ростом температури умовою (10). Для цих напівпровідників іонізація основної речовини стає відчутною при $T > 300$ К.

В опромінену γ -квантами ^{60}Co ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$) p -CdSb з $N_a \approx 6,8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ відбувається зміна знаку R_H , а на температурній залежності концентрації носіїв струму спостерігається дві області n і p -типу провідності (криві 1' і 2' рис. 1б), що пояснюється значною скомпенсованістю $N_a \approx N_d$. Вважаючи, що до опромінення концентрація основних носіїв визначається $p = f(10^3/T)$ (крива 1 рис. 1б), а після опромінення на рис. 1б крива 1' – $n - p = f(10^3/T)$ та крива 2' – $p - n = f(10^3/T)$, теоретично розраховано концентрацію електронів $n = f(10^3/T)$ в опромінену p -CdSb (крива 1 рис. 1б). За цією залежністю визначено глибину залягання донорного рівня $\Delta E_d = 0,025$ еВ. Отже, γ -опромінення ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$) p -CdSb з акцепторним рівнем $E_V + 0,031$ еВ призводить до утворення донорного рівня $E_C - 0,025$ еВ, який компенсує переходи носіїв струму.

Проводячи аналогічний p -типу аналіз розв'язку (1), положення рівня Фермі у невиродженому напівпровіднику n -типу в інтервалі температур домішкової провідності описується:

$$E_F = \frac{E_C + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{n}{2N_C}\right), \quad E_F = E_C + kT \ln\left(\frac{n}{N_C}\right).$$

На рис. 2б залежностями 1'-4' представлено аналіз граничних умов та теоретичних розрахунків значень $E_F(T)$ CdSb з $E_C - 0,025$ еВ, а 4'' – результуюча залежність положення рівня Фермі у γ -опромінену ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$) p -CdSb з акцепторним $E_V + 0,031$ еВ та донорним $E_C - 0,025$ еВ рівнями в забороненій зоні. За даними розрахунків зміна типу провідності відбувається при $T \approx 142$ К. Запропонована модель узгоджується з результатами досліджень фотопровідності для цих же матеріалів, де автори [8] спостерігали розмиття максимуму фотопровідності, що пояснюється виникненням фотоструму в ширшій спектральній області за рахунок іонізації домішкових рівнів.

Висновки. Аналіз теоретичної оцінки показує, що для p -CdSb температура насичення (виснаження) T_n є меншою 50 К, а температура переходу від виснаження домішки до власної провідності ≈ 292 К і ≈ 278 К. Досліджуваний діапазон температур в основному відповідає області виснаження: домішка уся іонізована, концентрація дірок $p = N_a$ залишається сталою, концентрація електронів $n = n_i$ (неосновних носіїв струму) зростає, рівень Фермі наближається до середини забороненої зони. При $T \approx 230$ К і ≈ 215 К для неопромінених та опромінених p -CdSb з подальшим ростом n відбувається і зростання p (уся домішка іонізована і необхідно враховувати іонізацію основної речовини $p = n_i + N_a$).

У γ -опромінену ($\Phi = 10^{19} \text{ см}^{-2}$) p -CdSb з $N_a \approx 6,8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ відбувається зміна знаку коефіцієнта Холла R_H , а на температурній залежності концентрації носіїв струму спостерігається дві області n і p -типу провідності, що пояснюється значною скомпенсованістю $N_a \approx N_d$. γ -опромінення p -CdSb з акцепторним рівнем $E_V + 0,031 \text{ eV}$ призводить до утворення донорного рівня $E_C - 0,025 \text{ eV}$, який компенсує переходи носіїв струму. За даними розрахунків зміна типу провідності відбувається при $T \approx 142 \text{ K}$.

Одержані результати мають практичне значення, зокрема для різноманітних розрахунків, в яких використовуються значення рівня Фермі в залежності від температури.

Список використаних джерел:

1. Баранський П. І., Федосов А. В., Гайдар Г. П. *Неоднорідності напівпровідників і актуальні задачі міждефектної взаємодії в радіаційній фізиці і нанотехнології*. Київ-Луцьк : РВВ Луцьк. нац. техн. ун-ту, 2006. 316 с.
2. Андроник И. К., Арушанов Э. К., Емельяненко О. В., Наследов Д. Н. Электрические свойства легированных кристаллов CdSb при низких температурах. *Физика и техника полупроводников*. 1968. Т. 2, № 9. С. 1248–1252.
3. Берча Д. М., Митин О. Б., Раренко И. М., Грицюк Б. Н. Зонная структура CdSb и ZnSb. *Укр. физ. журн.* 1983. Т. 28. С. 1523–1527.
4. Маник О. Н., Раренко И. М. Исследование зонной структуры CdSb. *Физика и техника полупроводников*. 1986. Т. 20, № 9. С. 1706–1709.
5. Bercha D. M., Slipukhina I. V., Sznajder M., Rashchanskii K. Z. Elementary Energy Bands in the Band Structure of the Narrow-band-gap Semiconductor CdSb. *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70, № 23. P. 235206-1–235206-8.
6. Abraham A. Photoelectric Effect in CdSb. *Czech. J. Phys.* 1965. Vol. 15, № 2. P. 138–140.
7. Семизоров А. Ф. Об анизотропии термо ЭДС CdSb. *Термоэлектричество*. 2004. № 2. С. 25–29.
8. Федосов С. А., Давидюк Г. Е., Божко В. В. [и др.]. Влияние радиационных дефектов на некоторые электрические и оптические свойства монокристаллов антимонида кадмия. *Неорган. материалы*. 1996. Т. 32, № 11. С. 1333–1337.