

## Примесные уровни в кристаллах $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$

© С.М. Чупыра, О.Г. Грушка<sup>¶</sup>, С.В. Биличук

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,  
58000 Черновцы, Украина

<sup>¶</sup> E-mail: o.grushka@chnu.edu.ua

(Получена 6 декабря 2016 г. Принята к печати 1 февраля 2017 г.)

Исследованы параметры примесных уровней в образцах  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ , при использовании температурных зависимостей концентрации электронов  $n(T)$  и энергии Ферми  $E_F(T)$ , полученных по данным коэффициента Холла  $R(T)$  и термоэдс  $\alpha(T)$ . Приведенный дифференциальный анализ зависимостей  $n(T)$  показал, что изменяя степень компенсации с помощью термообработки образцов, можно зафиксировать более широкий спектр примесных уровней в запрещенной зоне  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ .

DOI: 10.21883/FTP.2017.08.44794.8476

Интерес к исследованию соединения  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$  обусловлен его выгодными для практического применения свойствами. К некоторым примечательным свойствам относятся высокие радиационная стойкость [1] и фоточувствительность с максимумом в ближнем ИК диапазоне от 1.3 до 1.6 мкм, в котором работают фотоприемники в системах волоконно-оптических линий связи [2]. Также заслуживает внимания способность полупроводника  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$  в зависимости от температурной области проявлять стабильные и воспроизводимые характеристики [3] и в то же время иметь свойства, чувствительные к собственным дефектам [4].

Кристаллы  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ , выращенные методом Бриджмена, имеют дефектную структуру типа сфалерита с вакантными узлами, наличие которых обусловлено стехиометрическим составом соединения. При температуре  $T > 250$  К материал характеризуется неизменным составом и свойствами собственного полупроводника, а при  $T < 250$  К в области примесной проводимости наблюдаются особенности электронного переноса и аномальная термоэдс [4]. Последнее связано с сильной компенсацией и неоднородным распределением электронов примесной проводимости по кристаллу.

Уменьшить как степень компенсации, так и неравномерное распределение объемной электронной плотности удастся с помощью термообработки при  $460^\circ\text{C}$  в парах ртути в течение  $\geq 336$  ч. После гомогенизации аномалии исчезают, и материал приобретает нормальные свойства однородного полупроводника без каких-либо особенностей. Это облегчает анализ области примесной проводимости. В этой связи в данной работе проведены исследования параметров примесных уровней в образцах  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ , термообработанных указанным способом.

Обычно для определения энергии активации доноров  $E_D$  используют графический метод анализа температурной зависимости концентрации носителей заряда  $n$ , определяя наклон прямолинейного участка экспериментальной зависимости  $\lg n = f(10^3/T)$ . Однако при этом возможны погрешности даже при наличии одного уровня в результате неправильного выбора прямолинейного участка или спрямления кривой зависимости

$\lg n = f(10^3/T)$ . А так как у большинства полупроводников, в том числе  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ , в запрещенной зоне имеется несколько уровней, обусловленных трудноконтролируемыми собственными дефектами, графический метод является недостаточным и неполным.

Более информативным является метод дифференциального анализа кривых  $n(T)$ , предложенный Гофманом [5]. Этот метод позволяет не только выявить спектр уровней, но и определить энергии активации и концентрации уровней дефектов. В методе используется явление, при котором с ростом температуры уровень Ферми, передвигаясь от положения вблизи зоны проводимости к середине запрещенной зоны, пересекает примесные уровни и освобождает находящиеся на них электроны. При увеличении температуры от  $T$  до  $T + \Delta T$  уровень Ферми  $E_F$  смещается на  $\Delta E_F$ , и концентрация электронов увеличивается на  $\Delta n$ . При малом интервале температур  $\Delta T$  отношение  $\Delta n/\Delta E_F \approx dn/dE_F$  как функция энергии Ферми  $E_F(T)$  дает информацию о плотности локализованных состояний  $dn$  внутри энергетического интервала  $dE_F$ .

В настоящей работе представлены результаты исследования трех образцов  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ , отличающихся эффективной концентрацией доноров  $N'_D = N_D - N_A$  ( $N_D$ ,  $N_A$  — концентрации доноров и акцепторов соответственно) и степенью компенсации  $K = N_A/N_D$ . Номера кривых на рисунках соответствуют номерам образцов 1, 2, 3. Имеется связь между эффективной концентрацией доноров  $N'_D$  и степенью компенсации  $K$ . Чем больше  $N'_D$ , тем меньше  $K$ .

Используя измерения коэффициента Холла, мы построили температурные зависимости концентрации электронов  $\lg n = f(10^3/T)$  (рис. 1). Из экспериментальных зависимостей термоэдс  $\alpha(T)$  получили температурные зависимости энергии Ферми  $E_F(T)$  (рис. 2) с помощью формулы для электронного полупроводника [6]:

$$\alpha = -(k/e)(2 - E_F/kT). \quad (1)$$

Зависимости на рис. 1 и 2 взаимосвязаны: чем меньше концентрация электронов в образце, тем ближе к середине запрещенной зоны ( $E_g/2 = 0.37$  эВ) находится его

уровень Ферми. Энергетический сдвиг полученных зависимостей  $E_F(T)$  (рис. 2) относительно друг друга коррелирует с соответствующим концентрационным смещением зависимостей  $\lg n = f(10^3/T)$  (рис. 1) и согласуется с теорией [7,8], согласно которой при увеличении степени компенсации уменьшается концентрация электронов в примесной области, а уровень Ферми глубже опускается в запрещенной зоне.

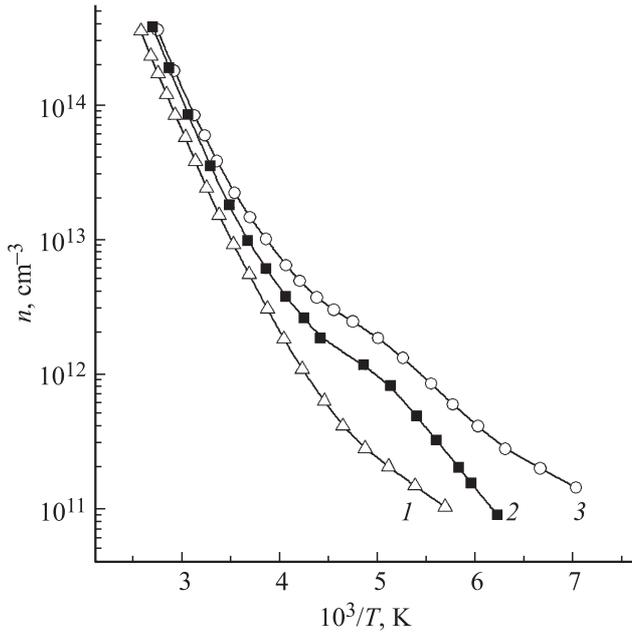


Рис. 1. Температурные зависимости концентрации электронов для образцов  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ .

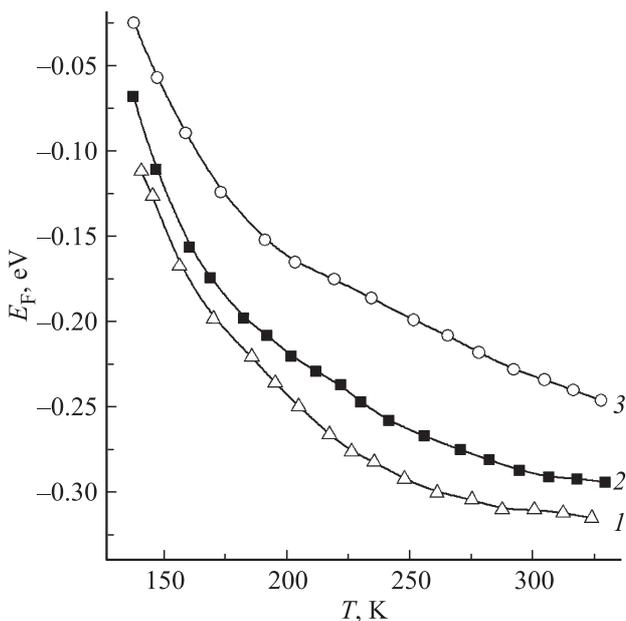


Рис. 2. Температурные зависимости энергии Ферми для образцов  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ .

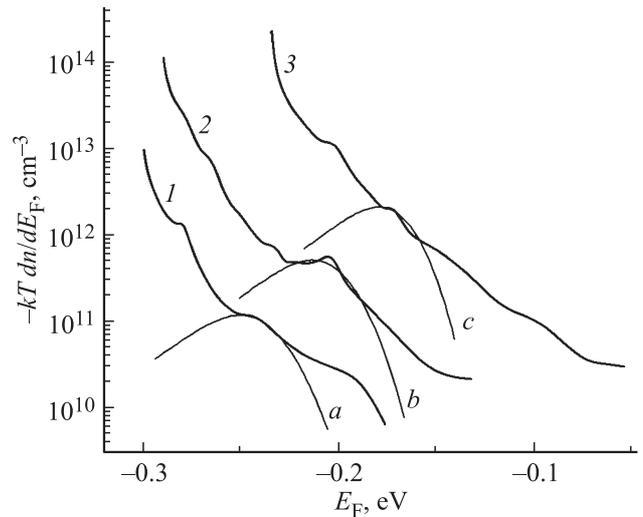


Рис. 3. Зависимости функции  $(-kT)dn/dE_F = f(E_F)$  от положения уровня Ферми в запрещенной зоне для образцов  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ : экспериментальные (1, 2, 3) и рассчитанные при  $E_D, \text{eV}$ ,  $N'_D, \text{cm}^{-3}$  соответственно: 0.254,  $4.6 \cdot 10^{10}$  (a), 0.217,  $2 \cdot 10^{12}$  (b), 0.185,  $7.9 \cdot 10^{12}$  (c).

Используя данные рис. 1 и 2, в соответствии с методом [5] мы построили зависимости  $(-kT)dn/dE_F = f(E_F)$  (рис. 3). В отличие от зависимостей  $\lg n = f(10^3/T)$  (рис. 1), не имеющих заметной структуры, на рис. 3 наблюдаются более или менее выраженные максимумы, каждому из которых соответствует свой уровень. Абсцисса максимума определяет энергетическое положение уровня, а ордината максимума — концентрацию локализованных нескомпенсированных состояний на этом уровне. Как видно из рис. 3, при меньшей степени компенсации  $K$  (кривая 3) уровень Ферми пересекает более мелкие уровни, а при увеличении  $K$  — более глубокие уровни. При этом в пределах энергетического интервала, в котором смещается уровень Ферми, имеется не менее трех уровней дефектов.

Для сравнения теории с экспериментом были рассчитаны кривые a, b, c (рис. 3) при учете энергетических положений  $E_F$  и концентраций  $N'_D$  трех уровней дефектов (параметры даны в подписи под рисунком) по формуле [5]

$$(-kT)dn/dE_F = N'_D \frac{\partial f(E_D - E_F)}{\partial (E_F/kT)} \left( 1 + \frac{E_D - E_F}{kT} \frac{dkT}{dE_F} \right), \quad (2)$$

где

$$\frac{\partial f(E_D - E_F)}{\partial (E_F/kT)} = \frac{g \exp[(E_D - E_F)/kT]}{[1 + g \exp[(E_D - E_F)/kT]]^2}.$$

При этом предполагали, что фактор вырождения  $g = 1$ .

Необходимые для расчетов зависимости  $E_F(T)$  определены с использованием выражения, справедливого для частично компенсированных полупроводников при

низких температурах вдали от абсолютного нуля [9]:

$$E_F = E_D/2 + (kT/2) \ln [N'_D / (2N_C)]. \quad (3)$$

Для определения эффективной плотности состояний в зоне проводимости  $N_C$  эффективную массу электронов принимали равной  $m_n = 0.47m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона). Как видно из рис. 3, расчетные кривые ( $a, b, c$ ) удовлетворительно соответствуют экспериментальным результатам.

Чтобы методом [5] проанализировать уровни дефектов в значительной части ширины запрещенной зоны полупроводника, температура должна изменяться в возможно большем интервале. Если большой интервал температуры обеспечить затруднительно, то исследованную энергетическую область можно увеличить, изменяя эффективную концентрацию доноров  $N'_D$  в полупроводнике. При этом  $N'_D$  не должна превышать  $10^{14} \text{ см}^{-3}$  [5]. Однако уровни, имеющиеся за пределами области, в которой наблюдается термическое смещение уровня Ферми, могут изменять его температурный сдвиг и соответственно положение и высоту максимума на кривых  $(-kT)dn/dE_F = f(E_F)$ . В случае частично компенсированных полупроводников такое же действие оказывает компенсация. Если степень компенсации  $K > 0.5$ , максимум кривой  $(-kT)dn/dE_F = f(E_F)$  наблюдается при более низких энергиях.

Таким образом, результаты данной работы подтверждают выводы, сделанные на основе теоретических расчетов [5].

## Список литературы

- [1] О.Г. Грушка, В.Т. Маслоук, С.М. Чупыра, О.М. Мыслюк, С.В. Биличук, И.И. Заболоцкий. ФТП, **46** (3), 327 (2012).
- [2] Л.Н. Курбатов. *Оптоэлектроника видимого и инфракрасного диапазонов спектра* (М., изд-во МФТИ, 1999).
- [3] О.Г. Грушка, А.И. Савчук, С.М. Чупыра, О.М. Мыслюк, С.В. Биличук. ФТП, **48** (10), 1307 (2014).
- [4] О.Г. Грушка. ФТП, **50** (6), 735 (2016).
- [5] Н.-J. Hoffman. Appl. Phys., **19** (3), 307 (1979).
- [6] К.В. Шалимова. *Физика полупроводников* (М., Энергия, 1976).
- [7] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ЖЭТФ, **60** (2), 867 (1971).
- [8] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. ФТП, **14** (5), 825 (1980).
- [9] П.Т. Орешкин. *Физика полупроводников и диэлектриков* (М., Высш. шк., 1977).

Редактор Г.А. Оганесян

## The impurity levels in $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ crystals

S.M. Chupyra, O.G. Grushka, S.V. Bilichuk

Fed'kovich National University,  
58000 Chernovtsy, Ukraine

**Abstract** Using temperature dependences both of electron concentration  $n(T)$  and Fermi energy which obtained from Hall coefficient  $R(T)$  and thermoelectric power  $\alpha(T)$  data the parameters of impurity levels in  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$  samples have been investigated. Deferential analysis of dependences  $n(T)$  shown that changing the degree of compensation with heat treatment of samples can be observed more wide spectrum of impurity levels in energy gap of  $\text{Hg}_3\text{In}_2\text{Te}_6$ .