

УДК 621.315.592+546.815.24  
ББК 22.379.2

Я.П. Салій, Л.Й. Межиловська, В.М. Чобанюк, І.М. Фрейк  
ВЛАСНІ РАДІАЦІЙНІ ДЕФЕКТИ  
ТА ЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ПЛІВОК  $A^{IV}B^{VI}$

Узагальнюються й аналізуються роботи, в яких досліджено дефекти, зумовлені опроміненням матеріалів кубічної модифікації на основі халькогенідів свинцю й олова. Виконано розрахунки впливу власних атомних дефектів – вакансій, міжвузловинних атомів, пар Френкеля – на зміну концентрації заряду. На основі порівняння експериментальних результатів із даними розрахунків зроблено висновок про переважаючий вид дефектів у плівках  $A^{IV}B^{VI}$  при опроміненні високоенергетичними альфа-частинками.

**Ключові слова:** дефекти, альфа-частинки, халькогеніди свинцю й олова.

**Вступ.** Радіаційне опромінення є одним з ефективних методів керування характеристиками напівпровідникових матеріалів [1]. Останнім часом одержано дані з опромінення швидкими електронами [2, 3], протонами [4], альфа-частинками [5, 6], іонами різних атомів [7, 8], гамма-квантами [9] і лазером [10] кристалів і плівок  $A^{IV}B^{VI}$ .

У разі опромінення при кімнатних температурах монокристалів концентрація вільних електронів у них при  $0 < x < 0,06$  унаслідок опромінення збільшується [2], а при  $x = 0,125$  зменшується [3]. В останньому випадку при потоці опромінення  $8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$  концентрація електронів у зоні провідності анулюється й відбувається фазовий перехід типу метал–діелектрик. Одержані результати пояснюють появою під впливом опромінення енергетичного рівня, локалізованого в зоні провідності, і гіпотетично пов'язують із вакансіями селену.

Опромінення твердих розчинів p-PbSnTe електронами та протонами приводить до зменшення концентрації дірок із ростом дози опромінення, але не викликає інверсії типу провідності [3, 4]. Одержані результати пояснюються генерацією донорних дефектів при опроміненні й появою зони резонансних станів поблизу вершини валентної зони.

Опромінення альфа-частинками PbSe показало, що при такій обробці має місце звичайна для первинних дефектів залежність концентрації носіїв від потоку опромінення [4–5]. Одержані результати пояснюються утворенням у плівках френкелівських пар.

Імплантація PbTe цинком приводить до появи в забороненій зоні локального рівня, який пов'язує із комплексами, що включають у себе як вакансії свинцю, так і вакансії телуру [7].

У роботах [3, 11] результати радіаційного опромінення  $A^{IV}B^{VI}$  пояснюються утворенням пар Френкеля в підгратках металу й халькогену.

Мета пропонованого дослідження – уточнення виду дефектів у плівках SnTe, PbTe і PbSe при альфа-опроміненні.

**Моделювання дефектів**

Виходячи з аналізу даних літератури, слід стверджувати, що спектр радіаційних дефектів у сполуках на основі халькогенідів олова й свинцю досить широкий: від вакансій у підгратках металу  $V_M^{2-}$  чи халькогену  $V_X^{2+}$  міжвузловинних атомів до пар Френкеля в обох підгратках  $M_i^+ - V_M^{2-}$ ,  $X_i^0 - V_X^{2+}$ . Тут  $M_i^+$  і  $V_X^{2+}$  – одно- й двозарядні донори,  $V_M^{2-}$  – двозарядний акцептор,  $X_i^0$  – нейтральні дефекти.

При утворенні однакової кількості пар Френкеля в обох підгратках зміна концентрації носіїв заряду визначатиметься співвідношенням

$$\Delta n = 2[V_X^{2+}] - 2[V_M^{2-}] + 0[X_i^0] + 1[M_i^+].$$

З графіків залежності концентрації носіїв заряду ( $n = n_0 + \Delta n$ , де  $n_0$  – початкова концентрація носіїв до опромінення) від концентрації радіаційних дефектів ( $N_D = [V_X^{2+}] + [V_M^{2-}] + [X_i^0] + [M_i^+]$ ) (рис.1) видно, що в матеріалі p-типу маємо збільшення концентрації електронів, а r-типу – зменшення концентрації дірок та інверсію знака провідності. Розрахункові залежності зміни концентрації носіїв заряду в матеріалі p- і r-типу при утворенні одиночних атомних дефектів – міжвузловинних атомів  $M_i^+$  і вакансій – показані на рис.2. Видно, що концентрації дефектів донорного типу  $[M_i^+]$  чи  $[V_X^{2+}]$  ведуть до

збільшення концентрації носіїв у матеріалі n-типу (рис.2, а – криві 1,2), а в р-типу – до зменшення концентрації дірок та інверсії типу провідності (рис.2, б – криві 1,2). Акцепторні ж дефекти  $V_M^{2-}$  у матеріалі n-типу зумовлюють зменшення концентрації електронів та інверсію типу провідності (рис.2, а – криві 3), а в р-типу – збільшення концентрації дірок (рис.2, б – крива 3).

### Експеримент

З метою перевірки результатів розрахунків досліджувались епітаксійні шари PbSe, PbTe і SnTe, вирощені методом гарячої стінки на монокристалічних підкладках (111)  $BaF_2$  [5]. Швидкість росту зразків складала  $\sim 3$  нм/с, а їх товщина – 6 мкм. При вирощуванні витримували такі температурні режими: температура підкладок  $T_n = 420 - 620$  К, стінок –  $T_c = 850 - 870$  К, випарника –  $T_v = 820 - 840$  К. Зразки опромінювались у вакуумі потоком альфа-частинок з енергією  $\sim 5$  МеВ від радіонуклідних джерел  $Pu^{238}$  на карусельній установці при кімнатній температурі. Густина потоку частинок складала  $5 \cdot 10^7$   $cm^{-2}c^{-1}$ , а дози опромінення доводилися до значень  $4,3 \cdot 10^{12} cm^{-2}$ . Електричні параметри вимірювались у постійних електричних і магнітних полях компенсаційним методом як до, так і після відповідної дози опромінення.

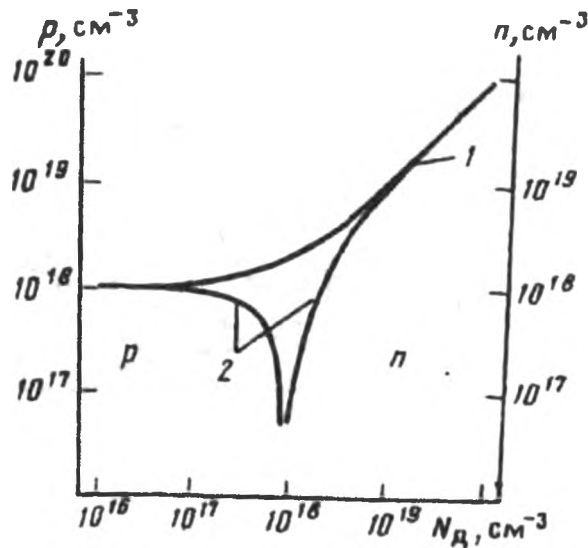


Рис.1. Залежність розрахункової концентрації носіїв заряду в сполуках  $A^{IV}B^{VI}$  n- (1) і p-типу (2) провідності від концентрації френкелівських дефектів у катіонній та аніонній підгратках (початкова концентрація носіїв  $n_0 = 10^{18} cm^{-3}$ )

На рис.3 подані експериментальні результати зміни концентрації носіїв заряду епітаксійних шарів PbSe з різною початковою провідністю, а на рис.4 – n-PbTe і p-SnTe від дози опромінення альфа-частинками. Видно, що із збільшенням дози опромінення до  $6 \cdot 10^{12} cm^{-2}$  концентрація електронів у n-PbSe збільшується на  $0,8 \cdot 10^{17} cm^{-3}$  (рис.3 – крива 2). У деяких випадках при цьому спостерігається інверсія типу провідності з р- на n-тип (рис.3 – крива 3).

Концентрація основних носіїв у плівках n-PbTe зі збільшенням дози опромінення зростає (рис.4 – крива 1), а в плівках p-SnTe така залежність має складний характер.

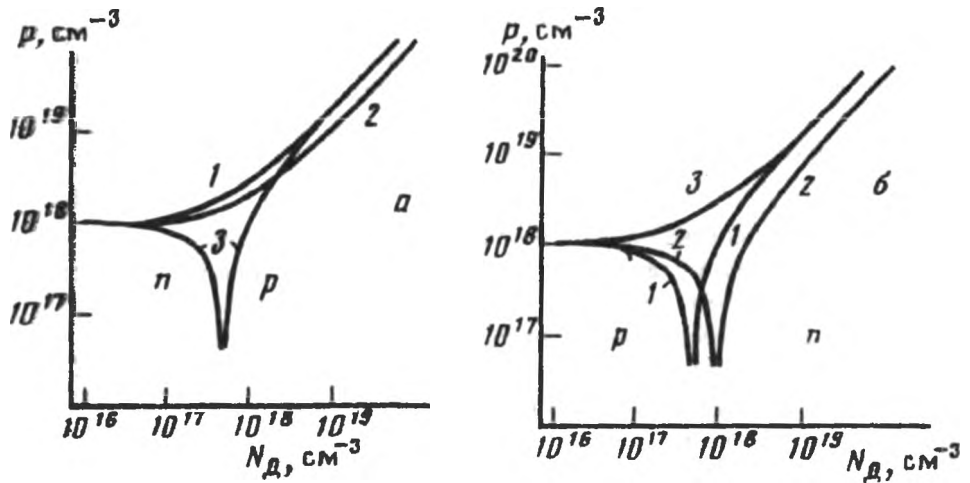


Рис. 2. Залежність розрахункової концентрації носіїв заряду в сполуках  $A^{IV}B^{VI}$  n- (а) і p-типу (б) від концентрації атомних дефектів: 1 –  $[V_X^{2+}]$ ; 2 –  $[M_i^-]$ ; 3 –  $[V_M^{2+}]$  (початкова концентрація носіїв  $n_0 = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ )

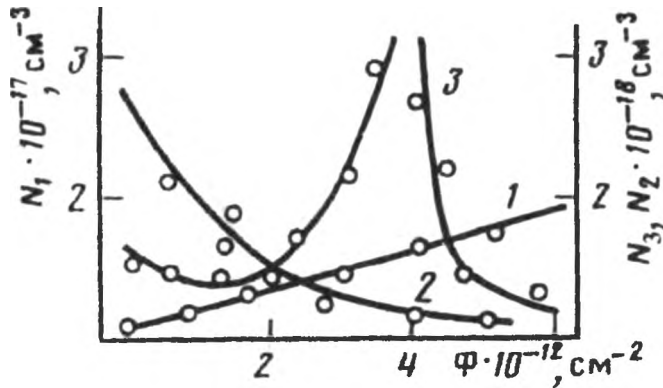


Рис. 3. Залежність концентрації холлівських носіїв у плівках n- (1) і p-PbSe (2, 3) від дози опромінення альфа-частинками. Початкова концентрація носіїв n-в  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ : 1 – 0,11; 2 – 2,7; 3 – 1,3

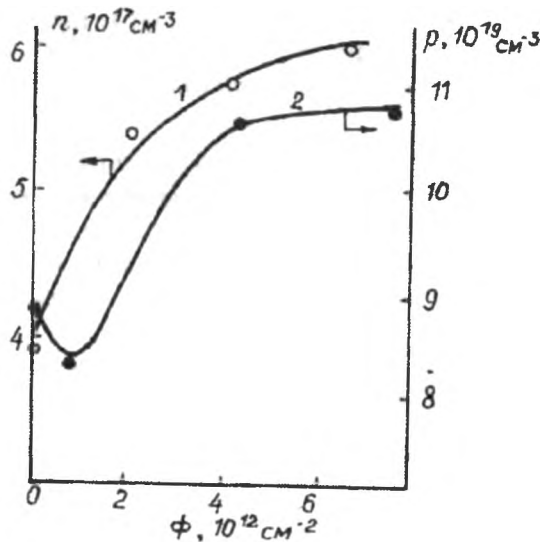


Рис. 4. Залежність концентрації холлівських носіїв у плівках n-PbSe (1) і p-SnTe (2) від дози опромінення альфа-частинками

### Обговорення результатів

Порівнюючи експериментальні результати дозових залежностей концентрації носіїв (рис.3, 4) із даними розрахунків (рис.1, 2), можна стверджувати, що переважаючими дефектами при радіаційному опроміненні альфа-частинками плівок можуть бути: міжвузловинні атоми металу  $Pb_i^+$ ; вакансії халькогену  $V_{X^{2+}}$ ; пари Френкеля в обох підгратках. Виділені види дефектів і зумовлюють спостережувані на експерименті результати – донорну дію (рис.3, 4). При цьому найбільш ефективним донорним дефектом є вакансії в підгратці халькогену  $V_{X^{2+}}$ . Це видно з розрахункових кривих (рис.1 – крива 2 і рис.2, б – криві 1,2) з інтервалу інверсії знака провідності для матеріалу р-типу. При переважанні дефектів  $M_i^+$  або пар Френкеля інверсія має місце при концентраціях дефектів  $10^{19} \text{ см}^{-3}$  (рис.1 – крива 2, рис.2, б – крива 2). Якщо ж переважають вакансії в підгратці халькогену  $V_{X^{2+}}$ , то зміна провідності з р-типу на n-тип настає вже при  $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$  (рис.2 – крива 1). Слід зауважити, що проведені розрахунки й експериментальні дослідження не дають конкретної відповіді про переважаючий вид дефектів у плівках  $A^{IV}B^{VI}$  при альфа-опроміненні. Але зменшення постійної гратки плівок при збільшенні дози опромінення пояснюються лише моделлю пар Френкеля або ж вакансійним механізмом утворення радіаційних дефектів.

Якщо ж усе-таки припустити, що при радіаційному опроміненні утворюються тільки пари Френкеля, як стверджують автори [3, 6, 9], тоді концентрація міжвузловинного металу  $M_i^+$  і після опромінення повинна зменшуватися. Одним із можливих механізмів зменшення концентрації радіаційно утворених атомів металу в міжвузловинах є його дифузія до границь зерен, а також до поверхні плівок із подальшою взаємодією: атмосферним киснем і утворенням оксидів.

Робота частково фінансується фондом фундаментальних досліджень МОН України, проект №10.02/030, державний реєстраційний номер 01050007494.

1. Заячук Д.М., Шендеровський В.А. // УФЖ. – 1991. – Т.36. – №11. – С.1692–1713.
2. Зломанов В.П., Ладыгин Е.А. // ФТП. – 1985. – Т.19. – №1. – С.53–57.
3. Брандт Н.Б., Доропей В.Н., Дубков В.П. // ФТП. – 1988. – Т.22. – №8. – С.1469–1473.
4. Скипетров Е.П., Дубков В.П., Зломанов В.П. // Изд. АН СССР. Неорган. материалы. – 1989. – Т.25. – №25. – С.737–740.
5. Фреик Д.М., Салий Я.П., Межиловская Л.И. // ФТП. – 1989. – Т.23. – №6. – С.1015–1018.
6. Фреик Д.М., Школьный А.К., Салий Я.П. // УФЖ. – 1989. – Т.34. – №9. – С.1391–1394.
7. Вейс А.Н., Дашевский З.М., Руленко М.П. // ФТП. – 1990. – Т.24. – №9. – С.126–130.
8. Лидоронко Н.С., Дашевский З.М., Казьмин С.А. // ДАН СССР. – 1989. – Т.30. – №4. – С.844–847.
9. Атакулов Ш.Б., Коканбаев И.М. // ФТП. – 1986. – Т.2. – №4. – С.180–152.
10. Дарчук С.Д., Пляцко С.В., Сизов Ф.Ф. // УФЖ. – 1988. – Т.33. – №1. – С.744–748.
11. Parada N.I. // Phys. Rev. – 1971. – №6. – P.2042–2055.

*The works in which the created under irradiation of cube modification materials based on chalcogenides of Pb and Sn were investigated are being generalized and analyzed in this paper.*

*The calculations for clearing up the influence of own atomic defects – vacancies, interstitial atoms and Frenkel upon the change of concentration of charge carriers have been made. On the grounds of comparing experimental results and calculations data the conclusion on the prevalent type of defects in  $A^{IV}B^{VI}$  films after high-energy alpha-particles treatment has been made also.*

*Key words: defects, alpha-particles, chalcogenides of Pb and Sn.*

УДК 621,315,592:535

ББК 22.379.2

В.В. Прокопів, І.В. Горічок, У.М. Писклинець

### ДОМІНУЮЧІ ТОЧКОВІ ДЕФЕКТИ В НЕЛЕГОВАНОМУ CdTe

*Використовуючи метод, що базується на мінімізації термодинамічного потенціалу кристала як функції концентрації дефектів, розраховано залежність рівноважної концентрації точкових дефектів та вільних носіїв заряду в CdTe від температури відпалу T та тиску пари кадмію  $P_{Cd}$ . Теоретично розраховані концентрації носіїв струму задовільно узгоджуються з експериментальними даними в широкому інтервалі тисків пари кадмію  $P_{Cd}$  та температури відпалу T.*

*Ключові слова: термодинамічний потенціал, точкові дефекти, кадмію телурид.*