

**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**Курбатов Денис Ігорович**

УДК 538.975:[537.311.322+535.243] (043.3)

**СТРУКТУРНІ, ОПТИЧНІ ТА ЕЛЕКТРОФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ  
ПЛІВОК ZnS ТА ГЕТЕРОПЕРЕХОДІВ  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe**

01.04.07 – фізика твердого тіла

**АВТОРЕФЕРАТ**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2010

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Сумському державному університеті Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник – кандидат фізико-математичних наук, доцент  
**Опанасюк Анатолій Сергійович**,  
Сумський державний університет,  
докторант кафедри прикладної фізики.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор  
**Гнатенко Юрій Павлович**,  
Інститут фізики НАН України (м. Київ),  
завідувач відділу оптики та спектроскопії кристалів;

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Погребняк Олександр Дмитрович**,  
Сумський державний університет,  
професор кафедри електроніки і комп'ютерної  
техніки.

Захист відбудеться "15" жовтня 2010 р. о 13<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 55.051.02 при Сумському державному університеті за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус ЕТ, ауд. 236.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотечі Сумського державного університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2.

Автореферат розісланий "07" вересня 2010 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради \_\_\_\_\_ В.О. Журба

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Останніми роками у зв'язку з необхідністю пошуку нових матеріалів для сонячної енергетики, оптико- та акустoeлектроніки суттєво виріс інтерес фахівців до традиційного люмінесцентного матеріалу – сульфїду цинку. На основі цієї сполуки вже давно створені й успішно працюють світлоемісійні діоди (LED), фотодетектори, сенсори, електрооптичні модулятори, оптичні покриття тощо. Сульфїд цинку, легований міддю, з успіхом використовується як порошковий люмінофор з квантовим виходом близько 100%.

Підвищену увагу дослідників привертають і плівки сульфїду цинку. Це обумовлено широким спектром їх застосування, а саме: як антивідбивні покриття сонячних елементів (СЕ) на основі кремнію; базові шари тонкоплівкових електролюмінесцентних пристроїв (світлових панелей, табло, мнемонічних схем, твердотільних екранів тощо); нетоксичні шари оптичного вікна для плівкових фотоелементів на базі сполук  $\text{CuInSe}_2$  (CIS),  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) та  $\text{CdTe}$ .

Для вдосконалення існуючих і створення нових напівпровідникових приладів на основі  $\text{ZnS}$  необхідні монокристали і плівки з керованими структурними, оптичними та електричними властивостями, контрольованим ансамблем точкових дефектів. Однак виготовлення таких зразків суттєво ускладнюється через тенденцію сполук  $\text{A}_2\text{B}_6$  до однобічного відхилення від стехіометрії, співіснування двох поліморфних модифікацій матеріалу (сфалерит та вюрцит), відносно високий рівень макро- та мікродоформаций, утворення різного роду структурних дефектів, а також відносно високу температуру плавлення матеріалу порівняно з температурою сублімації. Саме тому, дослідження, спрямовані на подолання вищезазначених труднощів при вирощуванні плівок  $\text{ZnS}$ , мають велике наукове та прикладне значення.

Для отримання шарів сполук  $\text{A}_2\text{B}_6$  у наш час широко використовуються методи вакуумного осадження, особливу увагу серед яких привертає метод конденсації у квазізамкненому об'ємі (КЗО). Завдяки конструктивним особливостям цього методу у результаті можуть бути отримані плівки, що мають оптимальну для приладового використання кристалічну і енергетичну структуру. Незважаючи на очевидні переваги, для отримання шарів сульфїду цинку метод КЗО використовувався лише епізодично.

Таким чином, проблеми, пов'язані з розробленням фізико-технологічних основ керування фізичними властивостями вакуумних конденсатів  $\text{ZnS}$ , оптимізацією їх структурних, оптичних та електрофізичних характеристик, вивченням ансамблю ТД матеріалу, є актуальними для сучасної фізики твердого тіла.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Робота виконана у рамках держбюджетних тем: № 0107U001292 «Дослідження електрофізичних, оптичних, структурних характеристик тонких плівок і багат шарових структур на основі сполук  $\text{A}_2\text{B}_6$  та їх твердих розчинів» Міністерства освіти і науки України (2007-2009 рр.); № 0110U001151 «Отримання та дослідження плівок телуриду кадмію і твердих розчинів на його

основі для сонячних елементів та детекторів випромінювання» Міністерства освіти і науки України (2010-2012 рр.).

**Мета і задачі дослідження.** Мета дисертаційної роботи полягає у встановленні загальних закономірностей впливу на оптичні, електрофізичні властивості та ансамбль ТД плівок ZnS, отриманих методом КЗО, їх елементного складу і структурно-фазового стану; виготовленні та дослідженні гетеропереходів (ГП)  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  на основі структурно-досконалих шарів сульфїду цинку.

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити такі наукові задачі:

- провести комплексне дослідження морфології поверхні, механізмів росту, фазового та елементного складу, структурних і субструктурних характеристик полікристалічних плівок ZnS залежно від фізико-технологічних умов їх нанесення у КЗО;
- виявити вплив структурно-фазового стану плівок сполуки на її структурночутливі характеристики, у процесі вивчення електрофізичних та оптичних властивостей плівок;
- визначити вміст кисню у свіжеотриманих та відпалених плівках ZnS як одного із основних чинників, що суттєво змінює зонну структуру сполуки і тим самим здійснює суттєвий вплив на електрофізичні, люмінесцентні та оптичні властивості матеріалу;
- провести дослідження еволюції ансамблю ТД у плівках ZnS при зміні умов їх отримання та визначити параметри (глибину залягання та концентрацію) локалізованих станів (ЛС) цих дефектів різними методами, далі з використанням квазіхімічного формалізму та отриманих даних про енергетичні характеристики ТД провести розрахунок процесів дефектоутворення у монокристалах, а в подальшому і у плівках ZnS залежно від зовнішніх впливів (тиску компонентів сполуки, температури відпалу) на них;
- визначити фізико-технологічні умови (температуру випарника  $T_e$  та підкладки  $T_s$ ) нанесення структурно-досконалих плівок ZnS з контрольованими властивостями, придатних для приладового використання;
- отримати ГП  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ , які є альтернативними переходам  $p\text{-CdTe}/n\text{-CdS}$ , для створення тонкоплівкових СЕ;
- провести комплексне дослідження морфології поверхні, структурних та субструктурних характеристик плівок ZnS та CdTe у цих гетеросистемах;
- вивчити механізми струмопроходження у ГП  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ , отриманих при різних фізико-технологічних режимах нанесення плівок сульфїду цинку, та виявити умови утворення твердих розчинів на межі поділу матеріалів, які компенсують неузгодженість параметрів ґраток компонентів гетеросистеми.

**Об'єкт дослідження** – процеси структуро- та фазоутворення у плівках ZnS, одержаних методом КЗО на неорієнтованих підкладках та підшарах CdTe, та їх вплив на оптичні, електрофізичні властивості та елементний склад вакуумних конденсатів, ансамбль ТД матеріалу.

**Предмет досліджень** – структурні, оптичні, люмінесцентні, електрофізичні властивості, елементний склад та ансамбль точкових дефектів вакуумних конденсатів ZnS і гетеропереходів  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe.

Відповідно до поставлених задач використовувалися такі **методи отримання та дослідження** зразків: конденсація плівок у КЗО, оптична (МІМ-7, KEYENCE VK-9700) та скануюча електронна (РЕММА-102) мікроскопія, у т.ч. фрактографія, рентгеноструктурний аналіз (ДРОН-4-07), резерфордівське зворотне розсіювання (RBS), спектрофотометрія (ЛОМО «СФ-46»), низькотемпературні (4,7 К; 77 К) фотолюмінесцентні дослідження, вимірювання темнових вольт-амперних характеристик (ВАХ) та температурних залежностей провідності, розрахунок ансамблю точкових дефектів з використанням квазіхімічного формалізму.

### **Наукова новизна одержаних результатів**

1. Уперше проведено комплексне дослідження морфології поверхні, елементного складу, структурних (розмір зерна, текстура, фазовий склад) та субструктурних (рівень мікронапружень, розмір областей когерентного розсіювання (ОКР), концентрація дефектів пакування (ДП) та густина дислокацій в об'ємі зерен) особливостей плівок ZnS залежно від фізико-технологічних умов їх осадження. Встановлено фізико-технологічні умови отримання високотекстурованих, однофазних конденсатів сполуки з низьким рівнем мікрODEФОРМАЦІЙ, малою концентрацією ДП та дислокацій в об'ємі стовпчастих зерен, придатних для приладового використання.

2. Досліджені оптичні, електрофізичні характеристики плівок ZnS, нанесених методом КЗО, їх ансамбль ТД залежно від умов їх осадження. З використанням методів аналізу ВАХ струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ),  $\sigma(T)$ -залежностей та люмінесцентних досліджень, визначені енергії залягання ЛС у забороненій зоні (ЗЗ) полікристалічного матеріалу. З використанням літературних даних проведена ідентифікація цих рівнів як таких, що належать власним ТД, неконтрольованим домішкам, а також їх комплексам. Запропонована модель залягання рівнів власних ТД у нелегованому ZnS.

3. Уперше методом RBS встановлено практичну відсутність кисню як у свіженанесених ( $T_S = 490 - 800$  К), так і у відпалених ( $T_{ann} = 475$  К,  $t = 10$  хв.) в атмосферному повітрі плівках ZnS при нормальному тиску і вологості – 25 %.

4. Уперше з використанням квазіхімічного формалізму проведено дослідження процесів дефектоутворення у плівках ZnS для випадків повної рівноваги та гартування дефектів залежно від фізико-технологічних умов їх вирощування. Визначені технологічні режими осадження свіжесконденсованих та загартованих плівок ZnS ( $T_e$ ,  $T_S$ ) із прогнозованою концентрацією носіїв заряду та провідністю.

5. При різних фізико-технологічних умовах осадження напівпровідникових шарів отримані гетеросистеми  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe. Вивчено вплив підшару CdTe на структурні та субструктурні характеристики плівок сульфідів цинку. Показано, що при зростанні температури конденсації ZnS на підшар CdTe до  $T_S \geq 773$  К на міжфазній межі утворюється прошарок твердих

розчинів  $Cd_xZn_{1-x}Te$  зі структурою сфалериту, склад яких визначається температурою конденсації. Визначені структурні та субструктурні характеристики цього прошарку.

6. Уперше досліджені механізми струмоперенесення в ГП  $n-ZnS/p-CdTe$  за наявності прошарку твердих розчинів та без нього; визначені основні параметри, що характеризують ці механізми, та побудована енергетична зонна діаграма гетеросистем для двох випадків: з межею поділу близькою до ідеальної, та з урахуванням приповерхневих станів.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Отримані у роботі результати мають як фундаментальне, так і прикладне значення. Фундаментальне значення полягає у наступному: одержана інформація про кристалічну будову, елементний склад, морфологію поверхні плівки  $ZnS$ , їх оптичні, електрофізичні характеристики, спектр ЛС та точкових дефектів залежно від фізико-технологічних умов осадження сприяє подальшому розвитку основ матеріалознавства бінарних сполук  $A_2B_6$  і може бути використана для пояснення і прогнозування властивостей плівки халькогенідів та ГП на їх основі. Прикладне значення полягає у визначенні умов отримання шарів  $ZnS$  та ГП  $n-ZnS/p-CdTe$  з оптимальними з точки зору приладового використання властивостями.

**Особистий внесок дисертанта.** Автор особисто здійснював пошук та аналіз літературних джерел, що стосуються теми дисертаційного дослідження, одержував полікристалічні плівки сульфід цинку для проведення структурних, оптичних, електрофізичних досліджень та для визначення їх елементного складу, створював ГП  $n-ZnS/p-CdTe$ , проводив вимірювання ВАХ СОПЗ та температурних залежностей провідності, вивчав оптичні властивості одношарових структур, а також здійснював обробку отриманих у дисертаційній роботі результатів. Постановка мети і задачі дослідження, вибір експериментальних і теоретичних методик, обговорення та узагальнення отриманих результатів проводилися разом із науковим керівником, докторантом кафедри прикладної фізики СумДУ, доцентом Опанасюком А.С. Дослідження структурних характеристик плівки методом рентгенівського аналізу проводилися за допомогою та консультаціями с.н.с. ІФ НАН України (м. Суми) Данильченка С.М. Отримання спектрів резерфордівського зворотного розсіювання та їх первинна обробка проводилися за допомогою н.с. ІФ НАН України Дуванова С.М. та м.н.с. цієї ж установи Крамченкова А.Б. Люмінесцентні дослідження виконувалися разом із співробітником ІФ НАН України (м. Київ) професором Мельником В.І. Розрахунок ансамблю точкових дефектів з використанням квазіхімічного формалізму проводився спільно з к.ф.-м.н. Косяком В.В. Особисто автором підготовлені статті [1, 4, 5, 6] та тези доповіді [13]. Статті [2, 3, 7-9] і тези [10-12, 14-16] написано у співавторстві.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи представлялися і доповідалися на таких конференціях та семінарах: XI Міжнародній конференції з фізики і технології тонких плівки та наносистем, МКФТТПН-ХІ (Івано-Франківськ, 2007 р.); Міжнародній конференції студентів

і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРИКА-2007 (Львів, 2007 р.); Науково-технічних конференціях викладачів, співробітників, аспірантів і студентів СумДУ (Суми, 2006-2010 рр.); Конференції молодих вчених і аспірантів "ІЕФ-2007" (Ужгород, 2007 р.); Українських наукових конференціях з фізики напівпровідників УНКФН-4,5 (Одеса, 2007 р.; Запоріжжя, 2009 р.); International Baltic Sea Region conference "Functional materials and nanotechnologies" (Рига, Латвія, 2008); Конференції молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання - 2008" (Київ, 2008 р.); Міжнародній науково-технічній конференції «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології» СЕМСТ-3 (Одеса, 2008 р.); 4-rd National Conference on Applied Physics (Галаті, Румунія, 2008); 6-th International Conference on Inorganic Materials (Дрезден, Німеччина, 2008); 39-й Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами ФВЗЧК-2009 (Москва, Російська Федерація, 2009); 25-th International Conference on Defects in Semiconductors (Санкт-Петербург, Російська Федерація, 2009).

**Публікації.** Результати дисертаційної роботи опубліковані у 31 публікації, основні 16 з яких наведені в авторефераті. Серед них 9 статей у виданнях, що входять до переліку ВАК України.

**Структура і зміст роботи.** Робота складається зі вступу, п'яти розділів, загальних висновків та переліку літературних посилань. Дисертація викладена на 156 сторінках, містить 43 рисунки і 24 таблиці. Список використаних джерел складається з 213 найменувань.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтована актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовані мета і основні задачі дослідження, визначені їх об'єкт та предмет, розкриті наукова новизна та практичне значення отриманих результатів, визначено особистий внесок здобувача, наведені відомості про апробацію результатів та структуру дисертації.

**Перший розділ** «Структурні, оптичні та електрофізичні властивості плівок сульфїду цинку та гетеропереходів на їх основі» є оглядом літературних джерел і складається з чотирьох підрозділів. У *першому підрозділі* розглянуті основні фізичні властивості плівок і монокристалів сульфїду цинку та наведені приклади їх застосування в мікро- та оптоелектроніці, сонячній енергетиці. *Другий підрозділ* складається з відомостей про структурні, субструктурні, оптичні та електрофізичні характеристики плівок ZnS, отриманих різними методами. Тут систематизовані основні результати досліджень різних авторів щодо фазового та елементного складу, розмірів ОКР, рівня мікронапружень конденсатів. Крім цього, розглянуто вплив ізовалентної домішки кисню на властивості монокристалів та плівок ZnS. Констатується, що її вміст у матеріалі суттєво змінює енергетичну структуру халькогенїду. Також проведено аналіз літератури з визначення ширини ЗЗ та оптичних констант матеріалу, його питомого опору, темнових ВАХ і енергій активації провідності зразків.

Відмічено, що хоча метод КЗО широко використовується для отримання високоякісних шарів сполук групи  $A_2B_6$ , плівки ZnS, нанесені цим методом, вивчені недостатньо. Це пояснюється високими температурами плавлення та сублімації матеріалу. У *третьому підрозділі* проведено огляд літератури з вивчення ансамблю власних ТД у ZnS. Розглянуті основні типи можливих дефектів, вказані їх енергії залягання у ЗЗ матеріалу. Проведено класифікацію основних моделей дефектоутворення у монокристалах ZnS (моделі Морозової та Лотта). Констатується, що до цього часу чіткої думки, про те, які типи ТД переважають у сульфіді цинку залежно від умов отримання зразків, не сформовано. Не виявлені і кількісні співвідношення між різними типами власних дефектів. Відмічається, що розрахунок ансамблю ТД у плівках ZnS, залежно від технологічних умов їх отримання до сьогодні не проводився. Наприкінці літературного огляду у *четвертому підрозділі* розглянуті властивості плівкових ГП із шаром ZnS. Показано, що механізми струмоперенесення в таких гетеросистемах визначаються невідповідністю параметрів кристалічної ґратки матеріалів, методом і режимами отримання гетеросистем. Констатується, що через велику неузгодженість періодів ґраток матеріалів ГП  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe досліджені слабо, а ефективність відповідних СЕ є низькою. Проте ККД цих фотоперетворювачів може бути значно покращений шляхом створення на їх інтерфейсі твердих розчинів, які б нівелювали неспівпадиння сталих ґраток матеріалів, як це зроблено для структур CdS/CdTe. У наш час відповідні роботи практично відсутні.

У *другому розділі* «Методика і техніка експерименту» наводиться інформація про методику отримання зразків, методи проведення досліджень їх фазового та елементного складу, кристалічної структури і субструктури, оптичних та електричних властивостей, визначення параметрів ЛС у матеріалі та розрахунку ансамблю ТД у конденсатах.

Плівки ZnS були одержані у робочому об'ємі вакуумної установки ВУП-5М методом КЗО. Конденсація здійснювалася як на неорієнтованій підкладці (ситал, скло, скло з підшаром ІТО, вуглецеві пластини), так і на підшар CdTe. Крім цього, під час дослідження електричних властивостей конденсатів застосовувалися підкладки, металізовані Мо. Верхній струмознімальний контакт до плівок ZnS наносився методом термічного випаровування у вакуумі з In або Ag.

Для дослідження морфології поверхні конденсатів використовувалися скануючий, оптичний та лазерний мікроскопи. Механізм росту і товщина ( $l$ ) шарів визначалися методом фрактографії шляхом фотографування поверхні сколювання плівок. Середній розмір кристалітів ( $D_g$ ) розраховувався за методом Джефріса. Стехіометрія та елементний склад матеріалу визначалися методами RBS та рентгеноспектрального аналізу з використанням енергодисперсійного аналізатора рентгенівського випромінювання (EDAX).

Структурні, субструктурні особливості та фазовий склад шарів ZnS вивчався методом рентгенівської дифракції. Дослідження зразків проводилося на автоматизованому рентгенівському апараті. Якість текстури плівок



оцінювалася за методом Харіса. Прецизійне визначення сталих кристалічної ґратки матеріалу ( $a$ ,  $c$ ) проводилося за допомогою екстраполяційних методів Бредлі-Джея та Нельсона-Рілі.

За уширенням дифракційних ліній на рентгенограмах у плівках ZnS визначалися середній розмір ОКР ( $L$ ), рівень мікрдеформацій ( $\varepsilon$ ) та концентрація ДП ( $\alpha$ ). Для розділення уширення, обумовленого фізичними ( $\beta$ ) та інструментальними ( $b$ ) ефектами, використані апроксимації профілю рентгенівської лінії функціями Коші та Гауса. Подальше розділення вкладів від дисперсності ОКР та мікрдеформацій проводилося графічним методом Холла. Рівень мікрдеформацій та розміри ОКР у плівках знаходилися також методом апроксимації з поданням профілю рентгенівської лінії потрібною згорткою функцій. За величинами  $L$  і  $\varepsilon$  в подальшому проводилася оцінка середньої густини дислокацій в об'ємі та на межах субзерен шарів ZnS.

Оптичні властивості плівок ZnS вимірювалися за допомогою спектрофотометра в діапазоні довжин хвиль  $\lambda = 340\text{-}850$  нм при кімнатній температурі. Знімалися спектри оптичного пропускання  $T(\lambda)$  та оптичної густини  $D(\lambda)$  плівок сульфиду цинку. Дослідження коефіцієнта відбивання  $R(\lambda)$  проводилися на спектрометрі «Ocean Optics USB 2000» в діапазоні  $\lambda = 350\text{-}1000$  нм із використанням спектроскопічної платформи «Spectra Suite». У подальшому за  $T(\lambda)$ -спектрами в області сильного поглинання світла з використанням співвідношення Ламберта  $\alpha = -1/l \cdot \ln(T/(1-R)^2)$  розраховувалися спектральні розподіли коефіцієнта поглинання плівок  $\alpha(\lambda)$ . Останні залежності використані для визначення оптичної ширини ЗЗ матеріалу, коефіцієнтів його заломлення  $n(\lambda)$  та екстинкції  $k(\lambda)$ .

Вимірювання ВАХ і  $\sigma(T)$ -залежностей конденсатів на омичній та квадратичній ділянках залежностей струм-напруга проводилися у сандвіч-структурах Mo(ITO)/ZnS/Ag(In). При реалізації у досліджуваних плівках режиму ВАХ СОПЗ з використанням традиційних модельних підходів, визначалися параметри ЛС матеріалу (глибина залягання  $E_i$  та концентрація  $N_i$ ).

Дослідження фотолюмінесценції (ФЛ) плівок ZnS проводилися при температурах 4,7 та 77 К. Спектри люмінесценції реєструвалися на електрофлуориметрі MPF-4 Hitachi у спектральній області  $\lambda = (360\text{-}710)$  нм. Збудження матеріалу здійснювалося довжиною хвилі  $\lambda = 325$  нм, яка створювалася за допомогою монохроматора. Низькотемпературні дослідження проводилися за допомогою гелієвого кріостату.

Значення енергії залягання ЛС у ЗЗ матеріалу знаходилися шляхом аналізу спектрів низькотемпературної ФЛ плівок. Уточнення цих даних проводилося з аналізу ВАХ у режимі СОПЗ та дослідження температурних залежностей провідності зразків.

Розрахунок ансамблю ТД у монокристалах та плівках ZnS проводився з використанням квазіхімічного формалізму в програмному середовищі Maple.

Механізми струмоперенесення через ГП  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  та параметри, що їх характеризують, визначалися за стандартною методикою шляхом аналізу прямих гілок темнових ВАХ, знятих у діапазоні температур 293-333 К.

**Третій розділ** «Структурні та оптичні властивості плівок ZnS, отриманих конденсацією у квазізамкненому об'ємі» складається з чотирьох підрозділів. У *першому підрозділі* наведені результати дослідження морфології та шорсткості поверхні плівок сульфиду цинку. В результаті комплексних досліджень було встановлено, що механізм росту шарів ZnS слабо відрізнявся від аналогічного механізму для інших плівок сполук  $A_2B_6$ , таких, як CdTe і ZnTe, що мають меншу температуру плавлення. При низьких температурах підкладки  $T_S < 720$  К спостерігався пошаровий ріст плівок сульфиду цинку. Це відбувалося внаслідок вторинного зародкоутворення у процесі їх осадження. Як результат зерна набували форми близької до рівновісної, зростання розміру зерен при збільшенні товщини плівок не спостерігалось. У результаті плівки являли собою конгломерат зерен розміщених одне над одним. Підвищення  $T_S$  призводило до зміни механізму росту плівок від пошарового до стовпчастого, але цей процес відбувався при температурах підкладки, значно більших, ніж при нанесенні шарів інших халькогенідів. Зміна механізму росту плівок звичайно спостерігалася при температурах осадження, які були більшими за 1/3 температури плавлення ZnS ( $T_{0S} \approx 2093$  К).

Розмір зерен у шарах визначався фізико-технологічними режимами їх конденсації та товщиною плівки (рис.1). При збільшенні  $T_S$  їх середній розмір у площині плівок зростає від  $D_g = 0,1$  мкм до 1-3 мкм при  $l \sim 10$  мкм. Особливо помітне збільшення розміру зерна мало місце при  $T_S > 700$  К. Це обумовлено зміною режиму перенесення пари матеріалу від випарника до підкладки від молекулярного до газодинамічного та швидким зменшенням пересичення пари при осадженні плівок халькогеніду в КЗО у високотемпературній області.

Дослідження морфології поверхні плівок ZnS показало, що збільшення температури конденсації супроводжується зростанням висоти рельєфу шарів та відповідно їх поверхневої шорсткості. Для кількісної оцінки шорсткості плівок за профілограмами проводиться розрахунок середнього арифметичного відхилення їх профілю. Визначення параметра  $R_a$  показало, що при збільшенні температури підкладки від  $T_S = 423$  К до 863 К шорсткість поверхні плівок зростає від  $R_a \approx 62$  нм до 147 нм при  $l = 3$  мкм.

У *другому підрозділі* наведені результати дослідження структурних та субструктурних властивостей

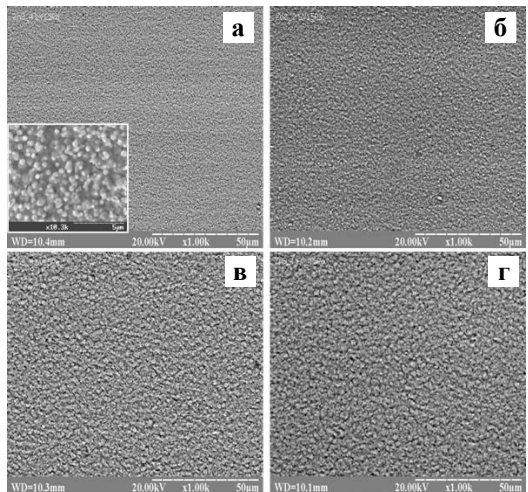


Рис. 1. Мікроструктура поверхні плівок ZnS ( $l \sim 10$  мкм;  $T_e = 1173$  К;  $M=10^3$ ), отриманих при різних температурах підкладки  $T_S$ : 473 К (а); 573 К (б); 773 К (в); 973 К (г); на вставці «а» –  $M=10^4$

плівки ZnS. Аналіз рентгенограм (рис. 2) показав, що конденсати, одержані в інтервалі температур  $373\text{ K} < T_S < 573\text{ K}$ , мають кубічну структуру. При  $T_S > 573\text{ K}$  у шарах ZnS з'являються сліди гексагональної фази, кількість якої дещо збільшується при зростанні  $T_S$ . Період ґратки сфалеритної фази плівки змінюється в інтервалі  $a = 0,54060\text{--}0,54195\text{ нм}$ . Для гексагональної фази конденсатів ZnS отримані такі значення параметрів ґратки:  $a = 0,38015\text{--}0,38610\text{ нм}$  та  $c = 0,62195\text{--}0,63160\text{ нм}$

( $c/a = 1,64\text{--}1,66$ ). Ці значення добре узгоджуються з даними для монокристалів сульфиду цинку. Розрахунки за методом обернених полюсних фігур дозволили виявити у кубічній фазі шарів ZnS аксіальну текстуру росту [111], досконалість якої визначається режимами одержання плівки та зростає при збільшенні їх товщини.

У третьому підрозділі наведені результати вивчення субструктурних характеристик плівки ZnS. Визначення параметрів субструктури проводилося за уширенням дифракційних піків (111)-(222) та (200)-(400) кубічної фази матеріалу. Відповідні графічні залежності розмірів ОКР та рівня мікродеформацій від температури конденсації плівки наведені на рис. 3. Виявилось, що значення розмірів ОКР у шарах змінюються в інтервалі  $L_{hhh} = 33\text{--}59\text{ нм}$ . При цьому існують (рис. 3, а) оптимальні температури осадження ( $T_S = 600\text{--}650\text{ K}$ ) при яких цей параметр є максимальним. Як видно з рис. 3, б, рівень мікродеформації в отриманих конденсатах змінюється в інтервалі  $\varepsilon = 0,83 \cdot 10^{-3}\text{--}2,72 \cdot 10^{-3}$ , зменшуючись при збільшенні температури осадження. За відомими значеннями мікродеформацій нами був розрахований рівень мікронапружень у плівках ZnS. При цьому використовувалося довідникове значення модуля Юнга  $E = 75\text{ ГПа}$ . Встановлено, що рівень мікронапружень у зразках знаходиться в інтервалі  $\sigma = 34\text{--}200\text{ МПа}$ . Максимальні значення  $\sigma$  виявилися вдвічі меншими за величиною, ніж отримані іншими авторами ( $\sigma = 541\text{ МПа}$ ), за зміною періоду ґратки матеріалу в плівковому та масивному станах. Таким чином, результати досліджень субструктури плівки ZnS свідчать про їх більшу структурну досконалість порівняно із шарами, отриманими тим самим методом, і навіть порівняно товстих полікристалічних зразків.

Характерним при визначенні розмірів ОКР трьома різними способами є те, що розраховані значення  $L_{h00}$  більші за  $L_{hhh}$ .

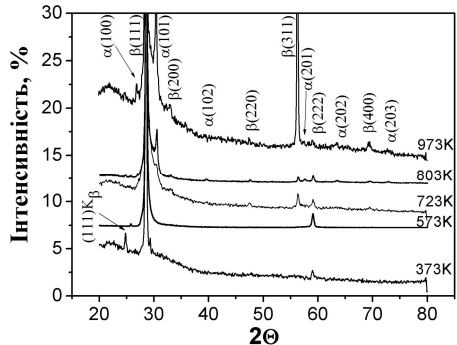


Рис. 2. Дифрактограми від плівки ZnS, отриманих при різних температурах конденсації  $T_S$

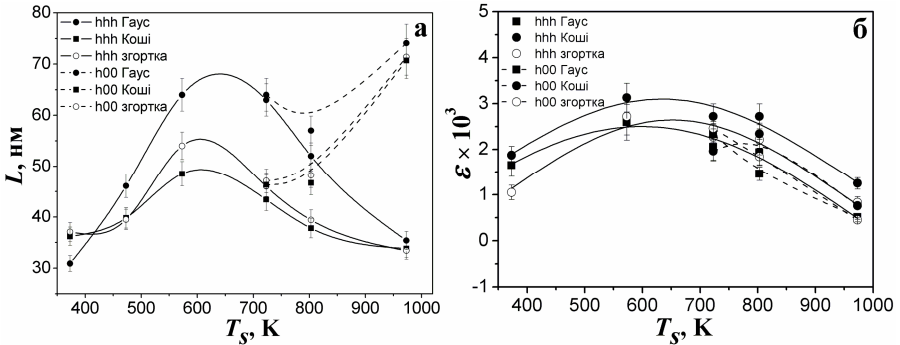


Рис. 3. Вплив температури підкладки  $T_S$  на розмір ОКР (а) та рівень мікроефекцій (б) плівок ZnS, розрахованих за різними методиками

Можливі два пояснення цього факту: або ОКР дійсно нерівновісні, їх розміри у напрямку [111] менші, ніж у напрямку [200]; або ОКР рівновісні, але свій внесок в уширення ліній, що відповідають відбиванню від площин з (hhh) роблять ДП. Як показав додатковий аналіз, обидва припущення приводять до висновку про наявність ДП та особливим чином орієнтованих прошарків гексагональної фази у сфалеритних плівках. Установлено, що концентрація ДП у двофазних шарах зростає від  $\alpha' = 0,02$  до  $\alpha' = 1,51$  % при підвищенні температури осадження від 723 до 973 К. Отримані результати добре корелюють з даними рентгеноструктурного аналізу, який свідчить про збільшення концентрації вюрцитної фази у плівках при зростанні  $T_S$ .

Результати розрахунку  $L$  і  $\epsilon$  були використані в подальшому для оцінки густини дислокацій в об'ємі та на межах субзерен плівок ZnS. Встановлено, що отримані в роботі конденсати мають достатньо низьку концентрацію дислокацій  $\rho = 10,3-26,9 \cdot 10^{15}$  лін/м<sup>2</sup>, яка майже на 2 порядки менша, ніж у плівках, отриманих аналогічними методами.

Третій підрозділ містить результати досліджень стехіометрії та елементного складу плівок ZnS. Вивчення елементного складу шарів халькогеніду методом RBS (рис. 4) показало, що при підвищенні  $T_S$  з 393 К до 993 К, тобто при наближенні умов конденсації до термодинамічно рівноважних, та збільшенні товщини плівок ZnS спостерігається суттєве покращення їх стехіометрії ( $\gamma = C_{Zn}/C_S$ ) з  $\gamma = 0,79$  до  $\gamma = 1,07$ .

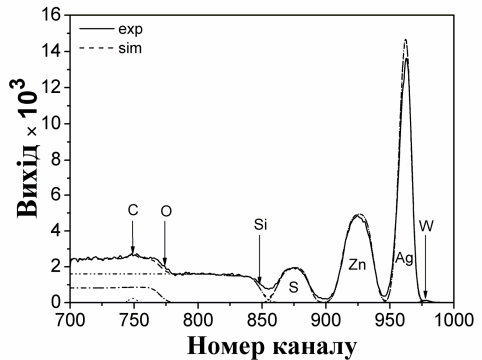


Рис. 4. Типовий енергетичний спектр RBS протонів від структури Ag/ZnS/cystal з моделюванням за складовими елементами ( $T_S = 573$  К)

Уточнення отриманих даних проведено за допомогою енергодисперсійного рентгенівського мікроаналізу, підтвердило позитивний вплив збільшення  $T_S$  на стехіометрію плівок. Цим методом у конденсатах виявлено деякий надлишок цинку над сіркою ( $\gamma = 1,01-1,14$ ). Основними сторонніми домішками, які зафіксовані в досліджених плівках, є: Si, Ca, Na, K, O. Це складові елементи підкладки, оскільки вони спостерігаються в основному на інтерфейсі плівка-підкладка. Інші домішки: W, Ag, C є технологічними і належать матеріалу випарника, струмознімального контакту, або залишковій атмосфері прискорювачів на яких проводилися дослідження. Концентрація вищезазначених домішок не перевищувала 1-2 ат. %. Аналіз свідчить про практично повну відсутність (до точності методу) у плівках ZnS домішок кисню як до, так і після відпалу їх на повітрі.

У *четвертому підрозділі* наведені результати вивчення оптичних властивостей вакуумних конденсатів ZnS. Проведені дослідження показали, що при довжинах хвилі, більших за 360-370 нм, тобто поблизу краю смуги поглинання матеріалу, всі зразки мали високий коефіцієнт пропускання, який становив 75-95%. Коефіцієнт відбиття  $R$  від отриманих нами плівок при цьому не перевищував 1-2 %. Для визначення оптичної ширини 33 сульфїду цинку будувалися залежності  $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$ . Установлено, що оптична ширина 33 шарів, одержаних при різних температурах підкладки, збільшується від  $E_g = 3,68$  eВ до  $E_g = 3,82$  eВ при зростанні температури підкладки від 473 до 973 К відповідно. Деяке зростання  $E_g$  пояснюється збільшенням ступеня гексагональності плівок ZnS при підвищенні  $T_S$ , що підтверджується рентгенографічно. Отримані значення  $E_g$  добре узгоджуються з даними інших авторів - ( $E_g = 3,62-3,78$  eВ).

За спектрами пропускання та відбивання світла в області слабого поглинання випромінювання нами були розраховані коефіцієнти заломлення  $n = (1,99-2,69)$ , екстинкції  $k = (0,006-0,014)$ , реальна  $\epsilon_1 = (4,0-7,3)$  та уявна  $\epsilon_2 = (0,019-0,051)$  частини оптичної діелектричної сталої плівок ZnS. Як показали проведені дослідження оптичних сталей, завдяки високим значенням коефіцієнтів пропускання і заломлення в широкому діапазоні довжин хвиль та низькому рівню відбивання світла, шари нанесені методом КЗО можуть бути перспективними для використання як вікна плівкових СЕ з поглинаючим шаром з CdTe, CuInSe<sub>2</sub> та CuGaSe<sub>2</sub>.

**Четвертий розділ** присвячений визначенню спектра ЛС та розрахунку ансамблю ТД у плівках сульфїду цинку. У *першому підрозділі* подано загальну характеристику ВАХ та  $\sigma(T)$ -залежностей багат шарових систем на основі ZnS. Крім цього, проведена ідентифікація ЛС за цими залежностями. Типові експериментальні криві наведені на рис. 5.

На ВАХ високотемпературних конденсатів у подвійному логарифмічному масштабі спостерігалось декілька лінійних ділянок із різним нахилом до вісі напруги. Як правило, виділялися ділянки із залежністю сили струму від напруги зміщення вигляду:  $I-U$ ,  $I-U^2$ ,  $I-U^{3-7}$  та  $I-U^{9-11}$ . Така зміна кутів нахилу ВАХ при підвищенні  $U$  є характерною особливістю СОПЗ. Відповідно стрибки струму на ВАХ обумовлені заповненням глибоких пасток і можуть бути використані для визначення параметрів цих ЛС.

З аналізу ВАХ СОПЗ у плівках ZnS нами виявлені пасткові рівні з глибиною залягання  $E_i = (0,22 - 0,25)$  еВ та концентрацією  $N_i = 5,0 \cdot 10^{14} - 1,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Знайдені ЛС можуть бути обумовлені наявністю міжвузлового атома цинку  $Zn_i^{2+}$ . Стани з енергіями залягання  $E_i = (0,24 - 0,25)$  еВ спостерігалися також іншими авторами методом термостимульованих струмів.

Як видно з рис. 5,  $\sigma(T)$ -залежності від досліджених структур в основному являють собою декілька лінійних ділянок, кут нахилу яких до осі  $T$

зменшується при зниженні температури вимірювання. У відповідності до рівняння Арреніуса з  $\sigma(T)$ -залежностей нами визначені енергії активації провідності на лінійних ділянках. Вони становили:  $E_{a1} = 0,03$  еВ;  $E_{a2} = (0,07 - 0,08)$  еВ,  $E_{a3} = 0,15$  еВ;  $E_{a4} = (0,23 - 0,24)$  еВ;  $E_{a5} = 0,33$  еВ;  $E_{a6} = 0,46$  еВ;  $E_{a7} = 0,87$  еВ. Нажаль, ідентифікувати більшість знайдених ЛС не вдалося, оскільки із літературних даних відсутні вказівки про їх природу. Лише рівні з енергією активації  $E_a = 0,15$  еВ та  $E_a = (0,22 - 0,25)$  еВ можна пов'язати з одно- ( $Zn_i^+$ ) та двозарядженим ( $Zn_i^{2+}$ ) міжвузловим атомом цинку.

У другому підрозділі наведені результати вивчення низькотемпературної ФЛ плівок ZnS. Важливим є те, що досліджені плівки мають низьку концентрацію кисню, оскільки наявність цієї ізоелектронної домішки веде до розщеплення зони провідності матеріалу та суттєвого ускладнення спектрів люмінесценції. Необхідно зазначити, що спектри, отримані при різних температурах вимірювання, мало відрізнялися один від одного, за винятком дещо більшої інтенсивності ліній при 77 К порівняно зі знятими при 4,7 К. Аналіз спектрів ФЛ свідчить, що для плівок ZnS, отриманих при температурах осадження 393-613 К, характерним є наявність домінуючих піків з  $\lambda = 396$  (3,13 еВ) та  $\lambda = 478$  нм (2,59 еВ). Пік з  $\lambda = 396$  нм був асиметричним, що може бути пояснено накладанням декількох близько розташованих ліній. Спостерігаються також піки малої інтенсивності на довжинах хвилі 603 нм (2,06 еВ) та 640 нм (1,94 еВ). Враховуючи те що плівки халькогеніду не були попередньо леговані, можна припустити, що лінії на спектрах обумовлені власними ТД, їх комплексами та неконтрольованими домішками.

За результатами досліджень домінуючим типом дефектів у плівках сульфїду цинку, отриманих при низьких температурах підкладки ( $T_s = 393 - 613$  К), є  $V_{Zn}$  (дефект за Шотткі). При цьому при підвищенні  $T_s$  у конденсатах зменшується кількість однозаряджених та зростає концентрація двозаряджених вакансій цинку.

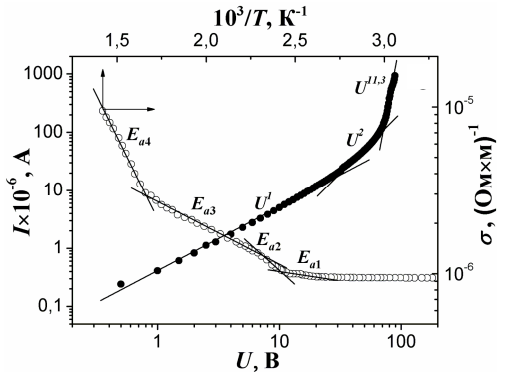


Рис. 5. Типові ВАХ структур In/ZnS/Mo, одержані при кімнатній температурі, та  $\lg \sigma - T$  залежності, зняті на омичній ділянці ВАХ ( $T_e = 1173$  К;  $T_s = 523$ )

У плівках, отриманих при більших температурах нанесення ( $T_S = 653-893$  К), домінуючими стають вакансії сірки та міжвузлові атоми цинку. Тобто основним механізмом дефектоутворення стає механізм Френкеля. За результатами низькотемпературних досліджень ФЛ, нами запропонована модель залягання рівнів власних ТД у плівках сульфідів цинку, отриманих методом КЗО (рис. 6).

Третій підрозділ присвячений розрахунку ансамблю ТД у монокристалах та плівках сульфідів цинку у рамках квазіхімічного формалізму. При розрахунках застосовувалася модель дефектоутворення, запропонована Н.К. Морозовою. У цій моделі передбачається утворення нейтральних та заряджених дефектів, як за механізмом Шотткі, так і Френкеля:  $V_{Zn}^0$ ,  $V_{Zn}^-$ ,  $V_{Zn}^{2-}$ ,  $Zn_i^0$ ,  $Zn_i^+$ ,  $Zn_i^{2+}$ ,  $V_S^0$ ,  $V_S^+$ ,  $V_S^{2+}$ . У випадку повної рівноваги концентрація нейтральних дефектів може бути визначена з використанням співвідношень:

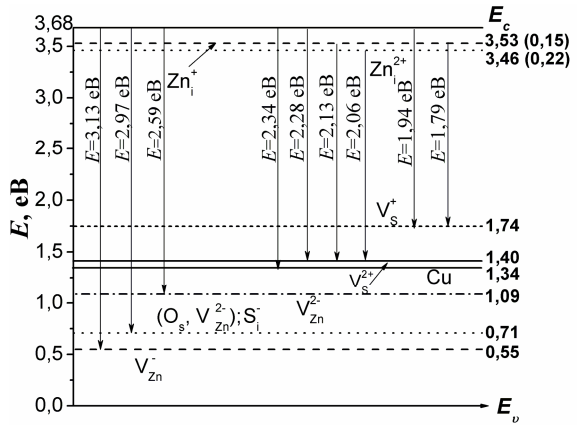


Рис. 6. Діаграма залягання рівнів власних ТД у нелегованих плівках ZnS

$$n \cdot p = K_i = f(T),$$

$$[V_{Zn}^0] = P_{Zn}^{-1} K_{V_{Zn}} = P_{Zn}^{-1} K_{01} \exp\left(-\frac{H_1}{kT_S}\right),$$

$$[Zn_i^0] = [V_{Zn}^0]^{-1} K_F \quad [V_{Zn}^0]^{-1} K_{02} \exp\left(-\frac{H_2}{kT_S}\right),$$

$$[V_S^0] = P_{Zn} K_{V_S} = P_{Zn} K_{03} \exp\left(-\frac{H_3}{kT_S}\right),$$

де  $n$ ,  $p$  - концентрації вільних електронів і дірок;  $P_{Zn}$  - парціальний тиск цинку при відпалі монокристалів;  $k$  - стала Больцмана;  $H_1$ ,  $H_2$ ,  $H_3$  - ентальпії утворення відповідних дефектів;  $K_{01}$ ,  $K_{02}$ ,  $K_{03}$  - константи квазіхімічних рівнянь.

Концентрація заряджених дефектів та вільних носіїв струму визначається такими співвідношеннями:

$$n = \frac{N_c}{\exp\left[\frac{(E_g - \mu_F)}{kT}\right] + 1},$$

$$p = \frac{N_v}{\exp(\mu_F/kT) + 1},$$

$$[X_{di}^{z+}] = \frac{[X_{di}^0]}{g_d \exp[-(E_g - E_{di} - \mu_F)/kT] + 1},$$

$$[X_{ai}^{z-}] = \frac{[X_{ai}^0]}{g_d \exp[-(E_g - E_{ai} - \mu_F)/kT] + 1},$$

$$n + [V_{Zn}^-] + 2[V_{Zn}^{2-}] = p + [V_S^+] + 2[V_S^{2+}] + [Zn_i^+] + 2[Zn_i^{2+}],$$

де  $N_{c(v)} = 2(2\pi m_{e(p)} kT/h^2)^{3/2}$  – ефективна густина вільних станів у зоні провідності (валентній зоні) матеріалу;  $m_{e(p)}$  – ефективна маса носіїв заряду електронів або дірок у напівпровіднику;  $\mu_F$  – енергія Фермі у напівпровіднику;  $z$  – ступінь іонізації дефектів;  $g$  – фактор їх виродження;  $E_a, E_d$  – енергії іонізації відповідно акцепторних та донорних центрів;  $[X^0]$  – концентрація нейтральних дефектів;  $[X_d^{z+}], [X_a^{z-}]$  – концентрація донорів та акцепторів відповідно.

При розрахунках концентрації власних дефектів у випадку гартування напівпровідника до системи рівнянь, що описують рівноважний стан дефектів, додавалися додаткові рівняння, які мають вигляд:

$$[Zn_i^0] + [Zn_i^+] + [Zn_i^{2+}] = [Zn_i]_{tot} = f(T),$$

$$[V_S^0] + [V_S^+] + [V_S^{2+}] = [V_S]_{tot} = f(T),$$

$$[V_{Zn}^0] + [V_{Zn}^-] + [V_{Zn}^{2-}] = [V_{Zn}]_{tot} = f(T),$$

де  $[Zn_i]_{tot}, [V_S]_{tot}, [V_{Zn}]_{tot}$  – сумарні концентрації дефектів у зразках у випадку повної рівноваги.

При розрахунках концентрації ТД у плівках враховувалася дисоціація матеріалу при випаровуванні:

$$ZnS^S \leftrightarrow Zn^G + 1/2 S^G, K_{ZnS} = P_{Zn} \cdot P_S^{1/2} = f(T_e).$$

Результати розрахунку ансамблю ТД у плівках ZnS залежно від температури випарника  $T_e$  при сталих температурах підкладки та від температури підкладки  $T_S$  при сталих температурах випарника наведені на рис. 7.

Як свідчать результати розрахунків, практично в усьому інтервалі температур осадження плівки ZnS мають електронний тип провідності. При цьому домінуючими ТД у шарах є  $V_{Zn}^-$  та  $Zn_i^{2+}$ . Крім цього, у помітній концентрації у повільно охолоджених плівках наявні двозаряджені вакансії цинку  $V_{Zn}^{2-}$ , у той час як у загартованих спостерігаються міжвузлові однозаряджені атоми цинку  $Zn_i^+$ .



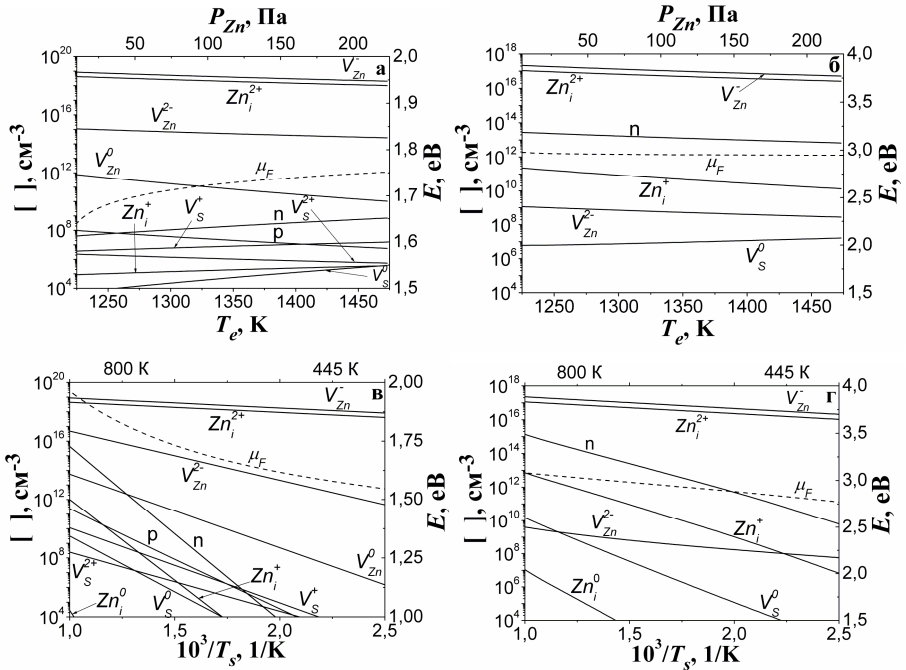


Рис. 7. Залежність концентрації власних ТД, носіїв струму та енергії Фермі у плівках ZnS від температури випарника  $T_e$  (а, б ( $T_S = 623$  K)), та від зворотної температури підкладки  $10^3/T_S$  (в, г ( $T_e = 1373$  K)); повна рівновага (а, в); гартування (б, г)

Усі нейтральні ТД мають концентрацію, суттєво нижчу, ніж заряджені і їх присутність у сполучі можна знехтувати. Як видно з рис.7, при збільшенні температури випарника та підкладки збільшується провідність плівок, однак концентрація власних носіїв заряду при цьому не перевищує  $10^{15}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ , а у багатьох випадках становить  $10^8$ - $10^{10}$   $\text{cm}^{-3}$ . Гартування шарів приводить до деякого збільшення їх провідності порівняно зі зразками, охолодженими повільно.

**П'ятий розділ** «Структурні та електрофізичні властивості гетеропереходів  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe». У цьому розділі досліджені гетеросистеми ZnS/CdTe, складові шари яких нанесені при оптимальних фізико-технологічних умовах конденсації, визначених вище ( $T_e = 1273$  K,  $T_S = 483$ -823 K для ZnS та  $T_e = 893$  K,  $T_S = 823$  K для CdTe). У першому підрозділі наведені результати дослідження морфології поверхні ГП ZnS/CdTe (рис. 8). Аналіз мікроструктури показав, що плівки CdTe на підшарі ZnS складаються з зерен різних фракцій, як дрібних (2-3 мкм), так і значно більших (до 20 мкм). Середній розмір зерен цих плівок становить  $\sim 7$  мкм. Останні значення є суттєво більшими за розмір кристалітів у структурах CdTe/скло, отриманих при тих самих технологічних умовах. Це може свідчити про певну орієнтуючу роль підшару халькогеніду. Плівки ZnS на склі мають більш однорідну кристалічну структуру (рис. 8, а), а середній розмір їх кристалітів є значно меншим, ніж у плівках CdTe, і становить  $\sim 1$  мкм.

Із фрактограми ГП (рис. 8, г) видно, що плівки телуриду кадмію мають чітку стовпчасту структуру росту, в той час як у шарах ZnS ця структура є менш вираженою.

Другий підрозділ присвячений вивченню структурних та субструктурних властивостей шарів у гетеросистемі ZnS/CdTe. Встановлено, що на дифрактограмах від ГП фіксуються піки кристалографічних площин кубічних фаз ZnS та CdTe, а при підвищених температурах осадження і гексагональної фази сульфіду цинку. Слід звернути особливу увагу на те, що при зростанні температури конденсації сульфіду цинку до  $T_S = 773$  К на рентгенограмах з'являються додаткові піки на кутах  $2\theta = 24,60^\circ$  та  $29,12^\circ$ . При подальшому підвищенні температури осадження ( $T_S = 823$  К) інтенсивність наявних піків дещо зростає, у той самий час фіксується виникнення нового піка на кутах  $2\theta \sim 50,50^\circ$ . Аналіз дифрактограм свідчить, що лінії на зазначених кутах не пов'язані з відбиваннями від кристалографічних площин халькогенідів ZnS і CdTe, а також інших сполук, що могли утворитися внаслідок окислення зразків на повітрі (ZnO, CdO, TeO<sub>2</sub> тощо). У зв'язку з цим, можна зробити припущення про утворення на межі поділу двох халькогенідів твердих розчинів невідомого хімічного складу. В подальшому, нами буде показано, що додаткові піки належать твердому розчину Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>Te ( $x = 0,359 - 0,441$ ) зі структурою сфалериту, склад якого визначається температурою осадження.

Експериментальні значення сталої ґратки сфалеритної фази у плівках ZnS ( $a = 0,54085 - 0,54175$  нм) та CdTe ( $a = 0,64805 - 6,64845$  нм) непогано співпадають з даними JCPDS ( $a = 0,54060$  нм – ZnS,  $a = 0,64820$  нм – CdTe).

За фізичним уширенням дифракційних ліній з використанням апроксимацій, описаних вище, визначені субструктурні характеристики плівок ZnS на склі та підшарі CdTe. Значення розмірів ОКР кубічної фази плівок ZnS, нанесених на скло ( $L = 33,4 - 39,4$  нм), є суттєво меншими за аналогічні параметри на підшарі CdTe ( $L = 79,1$  нм). Одночасно рівень мікрореформацій у таких плівках ( $\varepsilon = 5,46 \cdot 10^{-3}$ ) є значно вищим, ніж у конденсатах, нанесених на скляні підкладки ( $\varepsilon = (0,83 - 2,21) \cdot 10^{-3}$ ).

У третью підрозділі наводяться результати досліджень електрофізичних характеристик ГП *n*-ZnS/*p*-CdTe.

Типові прямі гілки темнових ВАХ гетероструктур Ag/*n*-ZnS/*p*-CdTe/ITO, побудовані у напівлогарифмічному масштабі, наведені на рис. 9, а.

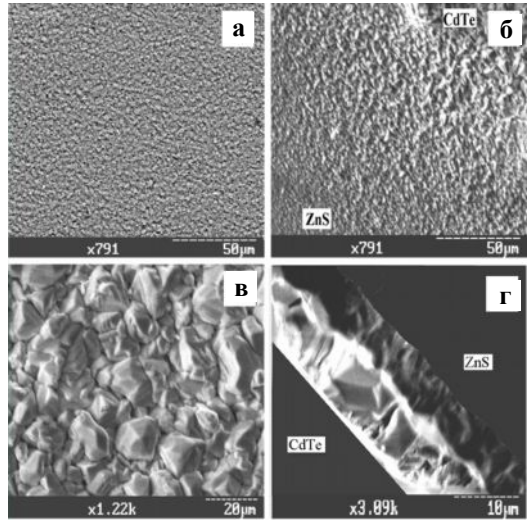


Рис. 8. Мікроструктура поверхні плівок ZnS на склі (а) і CdTe на ZnS (б); перехідна область між плівкою ZnS і CdTe (в); фрактограма ГП ZnS/CdTe (г). Режими конденсації ZnS:  $T_e = 1173$  К,  $T_S = 785$  К; CdTe:  $T_e = 893$  К,  $T_S = 823$  К

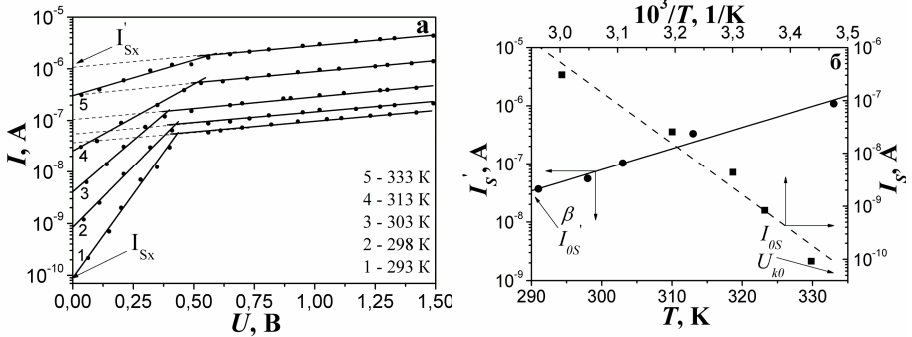


Рис. 9. Типові прямі гілки ВАХ ГП  $n$ -ZnS/p-CdTe, отримані при різних температурах вимірювання (а), та температурні залежності струмів насичення  $I_s$  (б). Режим конденсації ZnS:  $T_e = 1173$  K,  $T_s = 623$  K

На ВАХ, наведених у напівлогарифмічному масштабі, спостерігаються дві ділянки з різними кутами нахилу до осі напруги. При низьких напругах зміщення ( $U < 0,5$  В) для всіх досліджених зразків кут нахилу  $I(U)$ - залежностей зменшується при зростанні температури вимірювання. Ця особливість є характерною для термоактиваційних механізмів проходження струму через межу ГП. Навпаки, незалежність кута нахилу ВАХ до осі напруг від температури вимірювання, яка спостерігається при  $U > 0,5$  В, є ознакою нетеплових механізмів струмоперенесення через структури. У подальшому для визначення основних електрофізичних параметрів гетеросистем температурно-залежні ділянки ВАХ лінеаризувалися у координатах  $\lg I_s - 1/T$ , у той час як температурно-незалежні – у координатах  $\lg I_s' - T$  (рис. 9, б). Значення коефіцієнта ідеальності  $A$ , висоти потенціального бар'єра  $U_{k0}$ , параметрів  $\alpha$  і  $\beta$  знаходилися з отриманих прямих за їх нахилом та значеннями, що відтиснулися на осі струмів із використанням таких співвідношень:

$$I = I_s \exp(qU / AkT),$$

де  $I$  – струм, що проходить через ГП;  $I_s$  – струм насичення;  $U$  – напруга зміщення, прикладена до структури;  $A$  – коефіцієнт ідеальності ГП.

У свою чергу, струм насичення може бути знайдений з виразу

$$I_s = I_{0s} \exp(qU_{k0} / AkT),$$

де  $U_{k0}$  – висота потенціального бар'єра на переході за відсутності зовнішньої напруги.

У випадку нетеплових механізмів струмоперенесення через ГП пряма гілка ВАХ описується виразами

$$I = I_s' \exp(\alpha U), \quad I_s = I_{0s}' \exp(\beta T),$$

де  $I_{0s}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  – константи, які не залежать від  $U$  та  $T$ .

Дослідження темнових ВАХ ГП показало, що коефіцієнт ідеальності досліджених ГП змінюється в межах  $A = 2,70-7,04$ . Найнижче значення він набуває у системах, отриманих при  $T_S = 623$  К. Знайдені з ВАХ значення висоти потенціального бар'єра на ГП  $U_{k0} = (1,21-1,69)$  еВ непогано корелюють з розрахованими теоретично. При цьому спостерігається збільшення  $U_{k0}$  при підвищенні температури осадження плівок ZnS. Це може бути обумовлено зміною фазового складу шару сульфїду цинку та стану межі поділу напівпровідників. При напругах зміщення  $U < 0,5$  В реалізується емісійно-рекомбінаційний механізм перенесення носіїв струму, який при  $U > 0,5$  В змінюється на тунельно-рекомбінаційний.

Із використанням отриманих результатів у *четвертому підрозділі* побудована зонна діаграма ГП  $p\text{-ZnS}/n\text{-CdTe}$  для двох граничних випадків: за відсутності приповерхневих станів та їх високій концентрації.

У висновках подано перелік та стислу характеристику основних результатів роботи.

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі набув подальшого розвитку напрям матеріалознавства напівпровідникових сполук  $A_2B_6$ , а саме: у результаті комплексного дослідження морфології поверхні, елементного складу, структурних, субструктурних, оптичних та електричних властивостей плівок ZnS і гетеропереходів на їх основі, отриманих при різних фізико-технологічних умовах конденсації, встановлено, що:

1. При низьких температурах підкладки  $T_S < 720$  К спостерігається пошаровий ріст плівок, при цьому кристаліти розміщуються один над одним. Підвищення  $T_S$  до рівня  $1/3$  температури плавлення ( $720-730$  К) ZnS, приводить до зміни механізму росту шарів від пошарового до стовпчастого. Середній розмір зерен у площині плівок при збільшенні  $T_S$  зростає від  $D_g = 0,1$  мкм до  $1-3$  мкм ( $l \sim 10$  мкм). Визначення морфології поверхні шарів показало, що при підвищенні  $T_S$  від  $423$  К до  $863$  К її шорсткість збільшується від  $R_a = 62$  нм до  $147$  нм при  $l \sim 3$  мкм:

– рентгенодифрактометричний аналіз показав, що плівки ZnS одержані в інтервалі температур  $373 < T_S < 573$  К мають кубічну структуру. При  $T_S > 573$  К в шарах з'являються сліди гексагональної фази, кількість якої дещо збільшується при зростанні  $T_S$ . Період ґратки сфалеритної фази плівок змінюється в інтервалі  $a = 0,54060-0,54195$  нм. Для гексагональної фази отримані такі значення параметрів ґратки  $a = 0,38015-0,3860$  нм та  $c = 0,62195 - 0,63160$  нм ( $c/a = 1,64-1,66$ );

– уперше з використанням апроксимаційного методу Холла та потрійної зґортки визначені розміри ОКР, рівень мікронапружень, концентрація ДП та дислокацій у плівках ZnS. Встановлено, що при збільшенні  $T_S$  розмір ОКР у напрямку, перпендикулярному площині (111) у досліджених шарах, змінюється від  $33$  до  $59$  нм, при цьому визначений інтервал температур осадження ( $T_S = 600-650$  К), в якому цей розмір є максимальним. Рівень мікрореформацій у конденсатах змінюється в інтервалі  $\varepsilon = 0,83 \cdot 10^{-3} - 2,72 \cdot 10^{-3}$ , а концентрація ДП становить  $\alpha' = 0,02 - 1,51$  %. Отримані в роботі плівки ZnS мають низьку концентрацію

дислокацій –  $\rho = 10,3\text{-}26,9 \cdot 10^{15}$  лін/м<sup>2</sup>, що майже на два порядки менше, ніж у плівках, нанесених аналогічними методами.

2. Вивчення елементного складу та стехіометрії шарів ZnS методом RBS показало, що при підвищенні  $T_S$  від 393 К до 993 К та збільшенні  $l$  спостерігається суттєве покращення їх стехіометрії з  $\gamma = 0,79$  до  $\gamma = 1,07$ . Ці результати уточнені методом енергодисперсійного рентгенівського мікроаналізу ( $\gamma = 1,01\text{-}1,14$ ). Основні домішки, які зафіксовані в отриманих плівках, це: Si, Ca, Na, K, O – спостерігаються в основному на інтерфейсі плівка-підкладка як складові останньої, а також Ag, W, C – технологічні домішки. Концентрація домішок не перевищує 1-2 ат. %. Аналіз свідчить про практично повну відсутність (до точності методу) у плівках ZnS домішок кисню як до, так і після відпалу їх на повітрі.

3. Дослідження оптичних характеристик плівок показало, що при  $\lambda > 490\text{-}500$  нм вони мають дуже високий коефіцієнт пропускання, який наближається до 75-95%. Коефіцієнт відбиття світла  $R$  від отриманих нами шарів не перевищував 1-2 %. Крім цього, при зростанні  $T_S$  відбувається збільшення ширини ЗЗ матеріалу  $E_g$  від 3,68 до 3,82 еВ.

– у результаті проведених досліджень визначені фізико-технологічні умови конденсації високотекстурованих, структурно-досконалих полікристалічних плівок ZnS із низьким рівнем мікрореформацій, концентрацією дислокацій, ДП та малим відхиленням від стехіометрії ( $T_e = 1173\text{-}1273$  К,  $T_S = 573\text{-}973$  К). Завдяки високим значенням коефіцієнтів пропускання і заломлення та низькому рівню відбивання світла вони можуть бути перспективними для використання у СЕ.

4. З використанням методів аналізу ВАХ СОПЗ,  $\sigma(T)$ -залежностей та люмінесцентних досліджень у ЗЗ полікристалічного матеріалу, з електронною провідністю, виявлені ЛС з енергіями залягання:  $E_{a1} = 0,03$  еВ;  $E_{a2} = (0,07\text{-}0,08)$  еВ,  $E_{a3} = 0,15$  еВ;  $E_{a4} = (0,23\text{-}0,24)$  еВ;  $E_{a5} = 0,33$  еВ;  $E_{a6} = 0,46$  еВ;  $E_{a7} = 0,87$  еВ;  $E_{a8} = 1,94$  еВ;  $E_{a9} = 2,34$  еВ;  $E_{a10} = 2,59$  еВ;  $E_{a11} = 2,97$  еВ;  $E_{a12} = 3,13$  еВ. За літературними даними проведена часткова ідентифікація цих рівнів як таких, що належать власним ТД, неконтрольованим домішкам, а також їх комплексам. Запропонована модель залягання рівнів власних точкових дефектів у нелегованому ZnS.

5. Уперше проведений розрахунок ансамблю ТД у плівках ZnS отриманих у квазірівноважних умовах, при цьому використовувалися моделі, набори констант та алгоритми розрахунку, апробовані на монокристалах:

– результати моделювання у типовому для конденсації плівок методом КЗО діапазоні температур випарника ( $T_e = 1200\text{-}1500$  К) та підкладки ( $T_S = 400\text{-}1000$  К) дозволили встановити, що домінуючим типом дефектів у плівках є однозаряджені вакансії цинку  $V_{Zn}^-$  та двозаряджені міжвузлові атоми цинку  $Zn_i^+$ . Концентрація нейтральних дефектів у тонких шарах ZnS виявилася суттєво нижчою за концентрацію заряджених;

– у всьому діапазоні температур конденсації плівки мають  $n$ -тип провідності, що добре узгоджується з експериментальними результатами вивчення монокристалів та плівок сполуки. Визначені фізико-технологічні режими

осадження, що дозволяють отримувати свіжесконденсовані та загартовані плівки з концентрацією вільних носіїв заряду в інтервалі  $10^8$ - $10^{16}$  см<sup>-3</sup>.

6. Методом КЗО отримані ГП *n-ZnS/p-CdTe*. Показано, що у разі нанесення плівок ZnS на підшар CdTe при низьких температурах підкладки ( $T_S < 773$  К), вплив цього підшара на структурні та субструктурні особливості плівок ZnS є незначним:

– при підвищенні температури конденсації до 773 К у плівках ZnS на підшарі збільшуються розмір зерен та ОКР, покращується досконалість текстури. При цьому на міжфазній межі формується прошарок твердого розчину  $Cd_xZn_{1-x}Te$  ( $x = 0,36 - 0,44$ ) зі структурою сфалериту, склад якого визначається температурою конденсації. Він має дуже дефектну структуру з високим рівнем мікрореформацій  $\varepsilon = (3,03-3,86) \cdot 10^{-3}$  та малим розміром ОКР  $L = (34,4-37,7)$  нм;

– дослідження темнових ВАХ ГП показало, що коефіцієнт ідеальності досліджених ГП змінюється в діапазоні  $A = 2,70-7,04$ . Найнижчого значення він набуває у системах отриманих при  $T_S = 623$  К. При напругах зміщення  $U < 0,5$  В реалізується емісійно-рекомбінаційний механізм перенесення носіїв струму, який при  $U > 0,5$  В змінюється на тунельно-рекомбінаційний;

– побудовані зонні енергетичні діаграми ГП *n-ZnS/p-CdTe* для двох випадків - з межею поділу, близькою до ідеальної та з урахуванням приповерхневих станів.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Kurbatov D. Luminescent and optical characteristics of zinc sulfide thin films produced by close-spaced vacuum sublimation / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, S. Kshnyakina, V. Melnik, S. Nesprava] // Rom. J. Phys. – 2010. - V. 55, №1. - P. 213-219.
2. Курбатов Д.И. Исследование кислорода в пленках сульфида цинка методом резерфордского обратного рассеяния / [Д.И. Курбатов, А.Б. Крамченков, М.И. Захарец, А.С. Опанасюк] // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – №3. - С. 45-47.
3. Kurbatov D. Native point defects in ZnS films / [D. Kurbatov, V. Kosyak, A. Opanasyuk, V. Melnik] // Physica B: Condensed Matter. – 2009. – V. 404, №24. – P. 5002-5005.
4. Kurbatov D. Substrate-temperature effect on the microstructural and optical properties of ZnS thin films obtained by close-spaced vacuum sublimation / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, H. Khlyap] // Phys. Status Solidi (a). – 2009. - V. 206, №7. – P. 1549-1557.
5. Курбатов Д.И. Електрофізичні та структурні властивості гетеропереходів *n-ZnS/p-CdTe* / [Д.И. Курбатов, Н.М. Опанасюк, В.В. Косяк] // Журнал нано- та електронної фізики. – 2009. – Т.1, №3. – С. 30-42.
6. Kurbatov D. Morphological and structural characteristics of II–VI semiconductor thin films (ZnTe, CdTe, ZnS) / [D. Kurbatov, V. Kosyak, M. Kolesnyk, A. Opanasyuk, S. Danilchenko] // Integrated Ferroelectrics. – 2008. - V.103. – P. 32-40.
7. Kurbatov D. Investigations of surface morphology and chemical composition of Ag/ZnS/glassceramic thin-film structure / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, V. Denisenko, A. Kramchenkov, M. Zaharets] // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. – 2008. - V.11, № 3. - P. 252-256.

8. Kurbatov D.I. Rutherford backscattering and X-ray diffraction analysis of Ag/ZnS/glass multilayer system / [D.I. Kurbatov, A.G. Balogh, S.M. Duvanov, A.S. Opanasyuk] // Photoelectronics. – 2008. - V. 17. - P. 136-141.
9. Курбатов Д.І. Оптичні властивості плівок ZnS для широкозонних вікон перетворювачів сонячної енергії / [Д.І. Курбатов, А.С. Опанасюк] // Вісник СумДУ. Серія Фізика, математика, механіка. – 2007. - №2. – С. 60-66.
10. Kurbatov D. Native point defects in ZnS films / [D. Kurbatov, V. Kosyak, A. Opanasyuk and V. Melnik] // Матеріали міжнародної конференції [25-th International Conference Defects in Semiconductors], (Санкт-Петербург, Російська Федерація, 20-24 липня 2009 р.). – С. 282.
11. Курбатов Д.І. Исследование кислорода в пленках сульфида цинка методом резерфордовского обратного рассеяния / [Д.И. Курбатов, А.Б. Крамченков, А.А. Дрозденко, М.И. Захарец, А.С. Опанасюк] // Матеріали міжнародної конференції [39-я Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами], (Москва, Російська Федерація, 26-28 травня 2009 р.). – С. 153.
12. Курбатов Д.І. Вивчення кінетики росту та стехіометрії плівок ZnS / [Д.І. Курбатов, С.М. Дуванов, А.Г. Balogh] // Матеріали міжнародної конференції [IV Українська наукова конференція з фізики напівпровідників «УНКФН-4»], (Запоріжжя, 15-19 вересня 2009 р.). – С. 182.
13. Kurbatov D. A<sub>2</sub>B<sub>6</sub> semiconductors thin films for heterojunction solar cells / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, V. Kosyak, M. Kolesnik, H. Khlyap] // Матеріали міжнародної конференції [6-th International Conference on Inorganic Materials], (Дрезден, Німеччина, 28-30 вересня 2008 р.). – С. P1/9.
14. Kurbatov D. Morphological and structural characteristics of A<sub>2</sub>B<sub>6</sub> thin films (ZnS, CdTe, ZnTe) / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, V. Kosyak, M. Kolesnik] // Матеріали міжнародної конференції [International Conference «Functional materials and nanotechnologies-2008»], (Рига, Латвія, 1-4 квітня 2008 р.). – С. Po25.
15. Kurbatov D. Luminescent and optical characteristics of zinc sulfide thin films produced by close-spaced vacuum sublimation / [D. Kurbatov, A. Opanasyuk, S. Kshnyakina, V. Melnik, S. Nesprava] // Матеріали міжнародної конференції [4-rd National Conference on Applied Physics], (Галаті, Румунія, 25-26 вересня 2008 р.). – С. 30.
16. Курбатов Д.І. Тонкоплівкові гетеропереходи ZnS-CdTe та ZnTe-CdTe / [Д.І. Курбатов, А.С. Опанасюк, М.М. Колесник] // Тези доповіді [«Міжнародна науково-технічна конференція «Сенсорна електроніка та мікросистемні технології-3»], (Одеса, 2-6 червня 2008 р.). – С. 256.

#### АНОТАЦІЯ

**Курбатов Д.І. Структурні, оптичні та електрофізичні властивості плівок ZnS та гетеропереходів *n*-ZnS/*p*-CdTe. – Рукопис.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Сумський державний університет, Суми, 2010.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню елементного складу і структурно-фазового стану плівок ZnS, отриманих методом квазізамкненого об'єму, та встановленню загальних закономірностей їх впливу на оптичні та електрофізичні

властивості зразків. У роботі також створені та досліджені гетеропереходи (ГП)  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  на основі структурно-досконалих шарів халькогенідів.

Проведено комплексне дослідження морфології поверхні, структурних та субструктурних особливостей плівок ZnS залежно від фізико-технологічних умов їх конденсації. Встановлені режими отримання високоякісних конденсатів сполуки, з невеликою кількістю домішок та незначним відхиленням від стехіометрії, придатних для використання у приладобудуванні.

Методами аналізу вольт-амперних характеристик у режимі струмів, обмежених просторовим зарядом,  $\sigma(T)$ -залежностей та низькотемпературної ФЛ досліджено енергетичний спектр локалізованих станів у забороненій зоні матеріалу. Подальша їх ідентифікація здійснена з використанням літературних даних. З урахуванням отриманих результатів та використанням квазіхімічного формалізму розрахований ансамбль точкових дефектів у плівках сульфиду цинку у випадку повної їх рівноваги та гартування.

В оптимальних умовах отримані гетеросистеми  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  і досліджені їх структурні та електрофізичні властивості. Виявлено існування на інтерфейсі ГП твердих розчинів  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  ( $x = 0,359 - 0,441$ ) зі структурою сфалериту, склад яких визначається температурою конденсації шарів. Встановлені механізми струмоперенесення через межу поділу ГП та визначені параметри, що характеризують ці механізми.

**Ключові слова:** напівпровідникові плівки, гетеропереходи, структура, субструктура, оптичні властивості, параметри локалізованих станів, ансамбль точкових дефектів, вольт-амперні характеристики, тверді розчини.

## АННОТАЦИЯ

**Курбатов Д.И. Структурные, оптические и электрофизические свойства пленок ZnS и гетеропереходов  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$ . – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Сумский государственный университет, Сумы, 2010.

Диссертационная работа посвящена исследованию элементного состава и структурно-фазового состояния пленок ZnS, полученных методом квазизамкнутого объема, и установлению общих закономерностей их влияния на оптические и электрофизические свойства образцов. В работе также получены и исследованы гетеропереходы (ГП)  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  на основе структурно-совершенных слоев халькогенидов.

Проведено комплексное исследование морфологии поверхности, структурных и субструктурных особенностей пленок ZnS в зависимости от физико-технологических условий их конденсации. Установлены режимы ( $T_e = 1173\text{-}1273\text{ K}$ ,  $T_s = 573\text{-}973\text{ K}$ ) получения высококачественных пленок соединения. Показано, что уровень микродеформаций в конденсатах изменяется в интервале  $\varepsilon = 0,83 \cdot 10^{-3} - 2,72 \cdot 10^{-3}$ , а концентрация дефектов упаковки составляет  $\alpha' = 0,02 - 1,51\%$ . Кроме этого, полученные в работе пленки ZnS имеют низкую концентрацию дислокаций -



$\rho = 10,3\text{-}26,9 \cdot 10^{15}$  лин/м<sup>2</sup>, что почти на 2 порядка меньше, чем в пленках, нанесенных аналогичными методами.

Методами анализа вольт-амперных характеристик (ВАХ) токов, ограниченных пространственным зарядом,  $\sigma(T)$ -зависимостей и низкотемпературной фотолуминесценции исследован энергетический спектр локализованных состояний в запрещенной зоне материала. Дальнейшая их идентификация осуществлена с использованием литературных данных. Наиболее характерными были уровни с энергиями:  $E_{a1}=0,03$  эВ;  $E_{a2}=(0,07\text{-}0,08)$  эВ,  $E_{a3}=0,15$  эВ;  $E_{a4}=(0,23\text{-}0,24)$  эВ;  $E_{a5}=0,33$  эВ;  $E_{a6}=0,46$  эВ;  $E_{a7}=0,87$  эВ. Далее, с учетом полученных данных, с использованием квазихимического формализма рассчитан ансамбль точечных дефектов в пленках сульфида цинка в случае полного равновесия и закалки. Установлено, что доминирующим типом дефектов в пленках являются однозаряженные вакансии цинка  $V_{Zn}^-$  и двузаряженные межузельные атомы цинка

$Zn_i^+$ . Концентрация нейтральных дефектов в пленках ZnS оказалась существенно ниже концентрации заряженных. В результате определены физико-технологические режимы осаждения, которые позволяют получать пленки халькогенита с концентрацией электронов в интервале  $10^8\text{-}10^{16}$  см<sup>-3</sup>.

В оптимальных условиях получены ГП  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  и исследованы их структурные и электрофизические свойства. Установлено, что при росте температуры осаждения ZnS на подслое CdTe до  $T_S > 773$  К на рентгенограммах появляются дополнительные пики на углах  $2\theta = 24,60^\circ$ ,  $29,12^\circ$  и  $50,50^\circ$ . В дальнейшем показано, что эти пики принадлежат твердому раствору  $Cd_xZn_{1-x}Te$  ( $x = 0,359 - 0,441$ ) со структурой сфалерита, состав которого определяется температурой конденсации составляющих слоев.

Установлены механизмы токопрохождения через границу раздела ГП. При напряжениях смещения  $U < 0,5$  В реализуется эмиссионно-рекомбинационный механизм переноса носителей заряда, который при  $U > 0,5$  В заменяется туннельно-рекомбинационным. Исследование темновых ВАХ ГП показало, что коэффициент идеальности исследованных ГП изменяется в диапазоне  $A = 2,70\text{-}7,04$ . Наиболее низкое значение он приобретает в системах, полученных при  $T_S = 623$  К. Найденные значения высоты потенциального барьера на ГП  $U_{k0} = 1,21\text{-}1,69$  эВ неплохо коррелируют с рассчитанными теоретически. В завершении построены зонные энергетические диаграммы ГП  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  для случаев с границы раздела материалов, близкой к идеальной, и с учетом поверхностных состояний на гетерогранице.

**Ключевые слова:** полупроводниковые пленки, гетеропереходы, структура, субструктура, оптические свойства, параметры локализованных состояний, ансамбль точечных дефектов, вольтамперные характеристики, твердые растворы.

## SUMMARY

**Kurbatov D.I. Structural, optical and electrophysical properties of ZnS films and  $n\text{-ZnS}/p\text{-CdTe}$  heterojunctions. – Manuscript.**

The thesis for the candidate of physical and mathematical sciences on the speciality 01.04.07 – solid state physics. – Sumy State University, Sumy, 2010.

The thesis is devoted to research of chemical composition and structural-phase state of ZnS films, obtained by close-spaced vacuum sublimation technique, and investigation of their general influence on optical and electrophysical properties of these layers. Also in this work the *n*-ZnS/*p*-CdTe heterojunctions (HJ) based on structural perfect chalcogenide layers were produced and investigated.

The integrated study of surface morphology, structural, substructural characteristics of ZnS films under different growth conditions was carried out. That allowed to determining growth conditions of high-performance films with low deviation from stoichiometry and little number of impurities.

The parameters of localized states in band gap (LS) were researched by the analysis of current-voltage characteristics in space charge limited currents,  $\sigma(T)$ -dependencies and low-temperature photoluminescence. Further LS identification was carried out from literature data. In consideration with our LS-range the native point defects ensemble in the ZnS films was calculated using quasi-chemical formalism.

The *n*-ZnS/*p*-CdTe HJs were obtained in optimal growth conditions and their structural and electrophysical properties were researched. Existence of solid solutions  $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$  ( $x = 0,359 - 0,441$ ) with sphalerite structure on HJs interface which defined by condensation temperature of layers is revealed. The current-transportation mechanisms through the HJ interface and parameters, which defined these mechanisms, were determined.

**Keywords:** semiconductor films, heterojunctions, structure, substructure, optical properties, parameters of localized states, point defects ensemble, voltage-current characteristic, solid solutions.

Підп. до друку 01.09.10  
Обл.-вид. арк. 1,0  
Ум. друк. арк. 1,4.

Формат 60×90/16.  
Наклад 100 пр.  
Замовлення № 1040  
Папір ксероксний.  
Гарнітура Times New Roman Cyr.

Видавництво СумДУ, вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007.  
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до Державного реєстру  
ДК № 3062 від 17.12.2007 р.  
Надруковано у друкарні СумДУ. вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми,  
40007.