

СУБСТРУКТУРА ТОНКИХ ПЛІВОК ZnTe

М.М. Колесник, С.М. Данильченко, А.С. Опанасюк, Н.М. Опанасюк
Сумський державний університет, вул. Римського - Корсакова, 2, 40007,
Суми, Україна,*

**Інститут прикладної фізики НАН України, Суми, вул. Петропавлівська, 58,
40030, Суми
e-mail: maxxkol@yahoo.com*

У роботі проведено комплексне дослідження субструктурних характеристик плівок ZnTe, одержаних методом термічного випаровування у замкненому об'ємі при різних умовах конденсації. Розміри областей когерентного розсіювання, рівень мікродеформацій, концентрація дефектів пакування в конденсатах, середня густина дислокацій на границях субзерен та їх об'ємі визначені за фізичним розширенням дифракційних ліній з використанням методу Хола та потрібної згортки. Показано, що механізми зростання розмірів ОКР, зменшення рівня мікродеформацій мають активаційний характер.

ВСТУП

Останніми роками значно підвищився інтерес до вивчення плівок ZnTe. Це пов'язано з тим, що цей матеріал може бути використаний як базові шари тандемних та електрохімічних сонячних елементів [1], тильних омичних контактів до шару p-CdTe в фотоелектричних перетворювачах сонячного випромінювання на основі гетеропереходів CdS/CdTe [2]. Крім цього, телурид цинку є перспективним матеріалом для виготовлення емісійних діодів і лазерів, що працюють у зеленій області спектра, фотодетекторів, терагерцових приладів [3]. Важливим з екологічної точки зору є те, що цей напівпровідник не містить у своєму складі важкого металу - кадмію.

У більшості випадків до структури тонких плівок з'єднань A_2B_6 придатних для використання у різноманітних приладах, ставлять жорсткі вимоги. Вони повинні мати однофазну стовпчасту структуру зерен з низьким рівнем мікро- і макронапружень, дефектів пакування (ДП), двійників та дислокацій, контрольованою стехіометрією. Однак велика кількість досліджень, присвячених вивченню структурних та електрофізичних властивостей таких плівок свідчить, що конденсатам халькогенідів властиві специфічні особливості, запобігання або усунення яких є складною технологічною проблемою. До них відносять: співіснування двох поліморфних модифікацій з'єднання (сфалерит та вюрцит), шарувату морфологію кристалічних зерен, коли відбувається чергування пластин кубічної та гексагональної фаз, висока концентрація двійників та ДП, високий рівень макро- та мікродеформацій, схильність до утворення аномальних аксіальних текстур та ін. [4]. Ці структурні та субструктурні особливості плівок халькогенідів у кінцевому підсумку визначають їх оптичні та електрофізичні характеристики.

Для отримання тонких шарів телуриду цинку в наш час використовують велику кількість різних методів: електроосадження [5-6], височастотне катодне розпилення [2,7], імпульсне лазерне [8] та термічне випаровування [1,9], випаровування у замкненому об'ємі (КЗО) [10] та ін. Останній метод підтвердив свою перспективність при нанесенні різноманітних багатоконпонентних напівпровідників [11]. Саме тому він знайшов широке використання і при конденсації плівок з'єднань A_2B_6 , зокрема ZnTe [12-14]. Разом з тим субструктурні особливості шарів ZnTe, отриманих методом КЗО, і їх залежність від фізико-технологічних умов нанесення плівок вивчені недостатньо. Це і обумовило мету дослідження.

МЕТОДИКИ ОТРИМАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ПЛІВОК

Тонкі плівки ZnTe конденсували на очищених скляних підкладках у вакуумній установці ВУП-5М. При конденсації плівок використовувався стехіометричний порошок халькогеніду. Вихідна шихта ZnTe мала кубічну структуру (сфалерит), її період ґратки дорівнював $a = 0,60990$ нм. Температура випарника при нанесенні плівок становила $T_v = 973$ К. Температура підкладки змінювалась в діапазоні $T_n = 323-773$ К. Час нанесення плівок звичайно становив $t = 7-10$ хв.

Структурні дослідження плівок були виконані на рентгенодифрактометрі ДРОН 4-07 у Ni-фільтрованому K_α випромінюванні мідного анода. Знімання проводилось в діапазоні кутів 2θ від 20° до 80° , де 2θ – брегівський кут. При дослідженнях використовувалося фокусування рентгенівського випромінювання за Бреггом-Брентано.

Результати дифрактометричних досліджень були використані для визначення середнього розміру (L) областей когерентного розсіювання (ОКР) та рівня мікродеформацій (ε) у тонких плівках ZnTe за розширення м дифракційних ліній. Для розділення дифракційного розширення, обумовленого фізичними (β) та інструментальними (b) ефектами, використані апроксимації профілю рентгенівської лінії функціями Коші та Гаусом. Подальше розділення вкладів від дисперсності ОКР та мікродеформацій проводилося графічним методом Хола [15-16], оскільки вони по різному залежать від кута дифракції. Відповідно до способу апроксимації будувалися графіки у координатах $\beta \cos\theta/\lambda - 4\sin\theta/\lambda$ та

$(\beta \cos\theta/\lambda)^2 - (4\sin\theta/\lambda)^2$, де λ - довжина рентгенівського випромінювання. Перетин прямих з віссю y дозволяє знайти значення $1/L$ у випадку апроксимації за Коші та $1/L^2$ - апроксимації Гауса. Тангенс кута нахилу відповідних прямих визначається рівнем мікродеформацій ε в плівках. Апроксимація проводилася без урахування пружної анізотропії матеріалу.

Крім цього, мікродеформації та розміри ОКР знаходилися безпосередньо із потрібної згортки, яка описує розширення рентгенівської лінії за методом [17]. Для врахування внеску в розмиття рентгенівської лінії інструментального ефекту вимірювалася ширина b відповідних відбивань еталона. Як еталон використана відпалена шихта телуриду цинку. Всі процедури обробки профілю дифракційних ліній: вилучення фону, згладжування, розділення K_α дублету проводилося з використанням штатного програмного забезпечення дифрактометра (DIFWIN-1).

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Особливості процесу росту плівок ZnTe в КЗО та деякі їх структурні характеристики досліджені нами раніше в [18]. Було встановлено, що при низьких температурах підкладки плівки були дрібнокристалічними, при цьому зростання розмірів кристалітів при збільшенні товщини плівок майже не відбувалося. При підвищенні T_n механізм росту змінювався і шари починали рости за стовпчастим механізмом. Діаметр стовпчастих зерен визначався фізико-технологічними режимами конденсації у КЗО та товщиною плівки L . При зростанні T_n їх середній розмір у площині плівок зростав. В умовах, близьких до термодинамічно рівноважних, плівки були практично моноблочними за товщиною шару.

Як показав рентгеноструктурний аналіз (рис.1), конденсати ZnTe у всьому дослідженому інтервалі температур осадження мали кубічну структуру. При цьому домінуючими за інтенсивністю у більшості

випадків були рентгенівські піки (111) та (222), що свідчить про наявність аксіальної текстури [111].

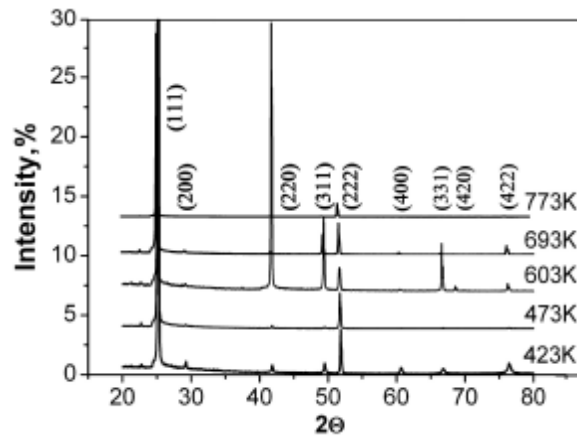


Рисунок 1 – Дифрактограми від плівок ZnTe, отриманих при різних фізико-технологічних режимах конденсації

У цій роботі рентгендифрактометричні дані були використані для дослідження субструктури плівок ZnTe за розширенням дифракційних піків.

Відомо, що у розширення рентгенівських ліній, крім інструментальних ефектів, свій вклад вносять малі розміри ОКР (L), мікродеформації ($\epsilon = \Delta d/d$) та такі структурні недосконалості кристалічної ґратки, як ДП. Методи аналізу розширення ліній з визначенням L і ϵ у наш час добре розвинені і широко використовуються при дослідженні пластичної деформації полікристалічних металевих плівок, процесів розпаду пересичених твердих розчинів, локальних структурних та хімічних перетворень металів [15-16]. Для дослідження напівпровідникових плівок халькогенідів такі методи застосовувалися рідко. Як правило, вважається, що розширення дифракційного піка обумовлене тільки дисперсністю ОКР, тоді для визначення розмірів блоків можна застосувати формулу Шеррера $L = k\lambda/\beta \cos\theta$, де $k \sim 0,9$ – коефіцієнт, який слабо залежить від форми зерна [7, 14].

Для розділення ефектів розширення дифракційних піків плівок ZnTe від різних причин нами використовувався метод апроксимації. У цьому методі виділення із загальної інтегральної ширини рентгенівської лінії B ширини фізичного розширення β проводиться у припущенні, що дійсний і інструментальний профілі описуються функціями Гауса або Коші. У першому випадку справедливе співвідношення $\beta^2 = B^2 - b^2$, у другому – $\beta = B - b$ [15].

Якщо фізичне розширення піка, після виділення інструментального ефекту обумовлене двома чинниками – дисперсністю структури матеріалу і мікродеформаціями – звичайно роблять ще одне припущення про форму профілів, що утворюють лінію. Вважається, що це знову або дві функції Коші, або дві функції Гауса. Тоді $\beta = \beta_L + \beta_\epsilon$ або $\beta^2 = \beta_L^2 + \beta_\epsilon^2$, де β_L , β_ϵ – розширення лінії за рахунок дисперсності ОКР та мікродеформацій відповідно [15]. Ці розширення можна розділити з використанням графічного метода Хола, оскільки вони по-різному залежать від кута дифракції. Для цього потрібно отримати два порядки відбивань від однієї і тієї самої системи кристалографічних площин (hkl) матеріалу та побудувати відповідні графіки [15-16].

Вивчення субструктурних характеристик вакуумних конденсатів ZnTe проводилося нами за розширенням дифракційних піків (111)-(222) та (200)-(400) кубічної фази. Нажаль, у ряді випадків відбивання від площин (200), (400) не фіксувалися внаслідок текстурованості плівок, тому відповідна інформація була втрачена. Вважалося, що механічні характеристики плівок є ізотропними. Типові графіки Хола, отримані з аналізу напівширини рентгенівських ліній, наведені на рис. 2. Як бачимо з цього рисунка, точки, побудовані за відбиваннями від площин з (hhh) та $(h00)$, лежать на двох різних прямих, які мають різний кут нахилу до осі x . Результати визначення L та ε , отримані з використанням апроксимацій за Коші та Гаусом, наведені у таблиці 1. Як бачимо з цієї таблиці, значення параметрів субструктури плівок, одержані з використанням різних апроксимацій, досить добре корелюють між собою. Однак ці апроксимації дозволяють визначити тільки найбільші та найменші значення розмірів ОКР L та мікродеформацій ε в плівках, при цьому експериментальна похибка може сягати 30-50% [17].

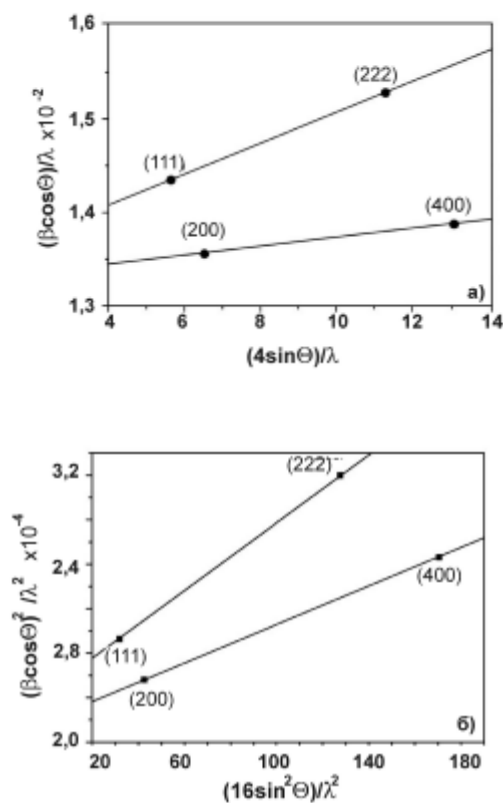


Рисунок 2 – Графіки Хола побудовані за дифрактограмою від плівки ZnTe, отриманої при $T_n = 973 \text{ K}$, апроксимації за Гаусом (а) та Коші (б)

Більш високу точність визначення розмірів ОКР та рівня мікродеформацій, ніж класичний метод апроксимації Хола, дає метод, що базується на поданні рентгенівської лінії потрібною згорткою. При цьому експериментальний пік описується виразом [17]:

$$h(x) = g(x) \oplus f_L(x) \oplus f_\varepsilon(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} g(y) f_L(\xi) f_\varepsilon[x - (y + \xi)] dy d\xi, \quad (1)$$

де $h(x)$ – функція розподілу інтенсивності розсіяних променів у межах дифракційного максимуму для зразка, що досліджується; $g(x)$ – функція розподілу інтенсивності для еталонного зразка; $f(x)$ – функція дифракційного розширення, обумовленого фізичним станом зразка; $x=2\theta$ – подвійний кут дифракції.

Таблиця 1 - Характеристики субструктури плівок ZnTe

$T_n, \text{К}$	(hkl)	$L, \text{нм}$			$\varepsilon \cdot 10^3$			$\alpha' \%$
		апроксимація за		зі згортки	апроксимація за		зі згортки	
		Гаусом	Коші		Гаусом	Коші		
шихта	(111)-(222)	28,57	36,45	37,54	2,03	2,05	1,19	1,43
	(200)-(400)	96,24	72,21	75,21	0,67	1,33	1,07	
323	(111)-(222)	46,58	57,99	59,39	0,87	1,60	1,29	0,67
	(200)-(400)	90,48	94,18	94,25	0,35	0,40	0,33	
423	(111)-(222)	64,81	63,92	63,93	0,70	1,37	1,11	0,53
	(200)-(400)	47,47	48,64	48,65	0,37	0,54	0,42	
468	(111)-(222)	69,35	65,43	65,54	0,15	0,63	0,43	0,12
	(200)-(400)	91,19	62,98	70,65	0,78	1,46	0,79	
473	(111)-(222)	54,23	60,41	60,76	0,72	0,93	0,64	-
	(200)-(400)	-	-	-	-	-	-	
603	(111)-(222)	65,36	68,78	68,87	0,45	0,62	0,46	0,15
	(200)-(400)	65,72	75,29	75,98	0,67	0,73	0,51	
693	(111)-(222)	74,54	67,13	67,50	0,17	0,88	0,64	0,04
	(200)-(400)	75,55	69,07	69,34	0,049	0,66	0,46	
773	(111)-(222)	59,05	61,99	62,07	0,46	0,66	0,49	-
	(200)-(400)	-	-	-	-	-	-	

Фізичне розширення $f(x)$, у свою чергу, може бути представлене згорткою функцій розширення від дрібнодисперсності ОКР $f_L(x)$ та мікродеформацій ґратки $f_\varepsilon(x)$. Добре відомо [15-17], що функція розширення від дрібнодисперсності з великою точністю описується функцією Коші, від мікродеформацій – функцією Гауса, а інструментальне розширення функцією, що лежить між кривою Гауса і квадратичною функцією Коші. В останньому випадку з невеликою похибкою може бути використана його апроксимація функцією Гауса. В результаті у співвідношенні (1) функції $g(x)$ та $f_\varepsilon(x)$ є кривими Гауса, а $f_L(x)$ – функцією Коші. Хоча потрібна згортка не береться простим чином, для прийнятих апроксимацій можна знайти співвідношення між β , β_L , β_ε . Тоді параметри субструктури плівок можуть бути знайдені із виразів [17]

$$L = \frac{\lambda}{\cos\theta_1} \cdot \frac{tB_1 - cB_2}{t\beta_1^2 - \beta_2^2}; \quad (2)$$

$$\varepsilon^2 = \frac{c\beta_1^2 B_2 - \beta_2^2 B_1}{16tg\theta_1 (cB_2 - tB_1)}, \quad (3)$$

де $t = tg^2\theta_2 / tg^2\theta_1$; $c = \cos\theta_1 / \cos\theta_2$; $\beta_i = \sqrt{(B_i)^2 - (b_i)^2}$; θ_1 та θ_2 – дифракційні кути пари ліній, що аналізуються.

Результати розрахунків L і ε з використанням співвідношень (2) та (3) систематизовані у табл.1. Розміри ОКР та значення мікродеформацій, отримані з цих виразів, у більшості випадків є проміжними між даними, одержаними з використанням апроксимацій Коші та Гауса, як це й

повинно бути з теоретичних міркувань. Це свідчить про достовірність результатів отриманих із аналізу розширення рентгенівських ліній. При цьому згідно з [17] точність визначення розмірів ОКР та рівня мікрореформацій у конденсатах методом потрійної згортки є не гіршою, ніж 11-16% залежно від умов знімання рентгенограм.

Залежності розмірів ОКР у напрямку, перпендикулярному до атомних площин (111), та рівня мікрореформацій у цьому ж напрямку, отриманих з використанням трьох різних варіантів апроксимацій, від температури підкладки наведені на рис. 3.

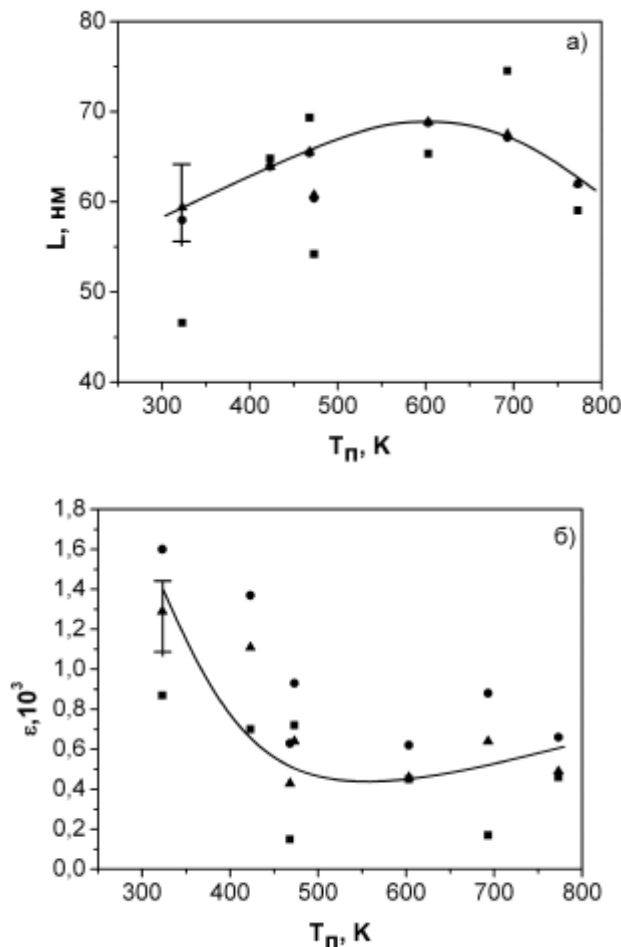


Рисунок 3 - Вплив температури підкладки T_n на розмір ОКР (а) та рівень мікрореформацій (б) плівок ZnTe. Апроксимація за Гаусом (■), Коші (●), метод потрійної згортки (▲)

Оскільки значення параметрів субструктури плівок CdTe, визначені із потрійної згортки, є найбільш точними та надійними, подальше обговорення результатів та розрахунки проводилися нами за ними.

Як бачимо з рис. 3, при збільшенні T_n розмір ОКР у напрямку, перпендикулярному до площин (111), у плівках ZnTe спочатку зростає від $L \sim 59$ нм до $L \sim 69$ нм, а потім зменшується до $L \sim 62$ нм. Існує оптимальний температурний інтервал ($T_n = 600-650$ К), в якому цей розмір є максимальним. Рівень же мікрореформацій у цьому напрямку монотонно зменшується при збільшенні T_n від $\epsilon \sim 1,29 \cdot 10^{-3}$ до $\epsilon \sim 0,64 \cdot 10^{-3}$.

Дещо по-іншому проявляє себе розмір ОКР у напрямку, перпендикулярному докристалографічним площинам (200), він зменшується зі зростанням температури підкладки від $L \sim 94$ нм до $L \sim 69$ нм, наближаючись до розмірів ОКР в напрямі перпендикулярному площинам (111). Одночасно рівень мікрореформацій в цьому напрямі слабо зростає від $\varepsilon \sim 0,33 \cdot 10^{-3}$ до $\varepsilon \sim 0,46 \cdot 10^{-3}$, знову таки наближаючись до значень ε у іншому напрямі. Необхідно відмітити, що внаслідок малої інтенсивності піків (200) та (400), вимірювання їх напівширини проводилося зі значною похибкою, тому дані з величини L та ε у цьому напрямі є менш достовірними.

За відомими значеннями мікрореформацій (табл.1) нами був розрахований рівень мікронапружень у плівках ZnTe. При цьому використовувалося значення модуля Юнга $E=64$ ГПа. Встановлено, що мікронапруження у зразках змінюються в інтервалі $\sigma = 20-83$ МПа. Максимальні значення $\sigma = 83$ МПа виявилися суттєво (у 4-6 разів) меншими за величиною, ніж виявлені рентгенівським методом у [6] ($\sigma = 262-429$ МПа) у електроосаджених плівках ZnTe. Разом з тим розмір ОКР у досліджених плівках був близьким до знайденого у [6], однак він був у 2-3 рази більший ніж у шарах отриманих методом вакуумної конденсації у [9, 19, 20]. Таким чином, результати досліджень субструктури плівок ZnTe свідчать про їх більшу структурну досконалість порівняно з конденсатами отриманими іншими методами.

На рис.4 дані з субструктури плівок ZnTe наведені у координатах $\ln L \cdot 10^3 / T_n$ ($\ln \sigma - 10^3 / T_n$). З цього рисунку видно, що процеси, які визначають ступінь дисперсності елементів субструктури і рівень мікрореформації в плівках відносяться до термічно активуємих. Енергія активації збільшення розмірів ОКР складає $\Delta E_1 = 0,02$ еВ, зменшення $\sigma - \Delta E_2 = 0,11$ еВ. Ці енергії суттєво нижчі ніж енергія самодифузії компонентів у об'ємному матеріалі ($\Delta E = 2,7; 3,8$ еВ) [12]. Отже ці процеси визначаються міграцією атомів по поверхні плівки, що росте в умовах неупорядкованої атомної структури.

Відомо, що субграниці блоку утворюються дислокаціями, розташованими по його межах, одночасно дислокації розташовані в об'ємі блоку приводять до виникнення в матеріалі мікрореформацій. Це дозволяє зробити оцінку середньої густини дислокацій за величиною мікрореформацій ε та розміром ОКР L у плівках. Усереднена за зразком густина дислокацій, що утворюють границі згідно з [21] дорівнює

$$\rho_L = \frac{3n}{L^2}, \quad (4)$$

де n – число дислокацій на кожній з шести граней блоку.

Якщо дислокації розташовані переважно в середині субзерен густину дислокацій отримаємо з виразу [21]

$$\rho_\varepsilon = \frac{K}{F} \left(\frac{2\varepsilon}{b} \right)^2, \quad (5)$$

де 2ε – ширина розподілу мікрореформацій; F – число, що враховує, у скільки разів зростає енергія дислокації при взаємодії з іншими дислокаціями; b – модуль вектора Бюргерса; K – константа, що залежить від виду розподілу мікрореформацій. Вона для випадку якщо цей розподіл описується кривою Коші дорівнює $25,7$ Гауса - 4.

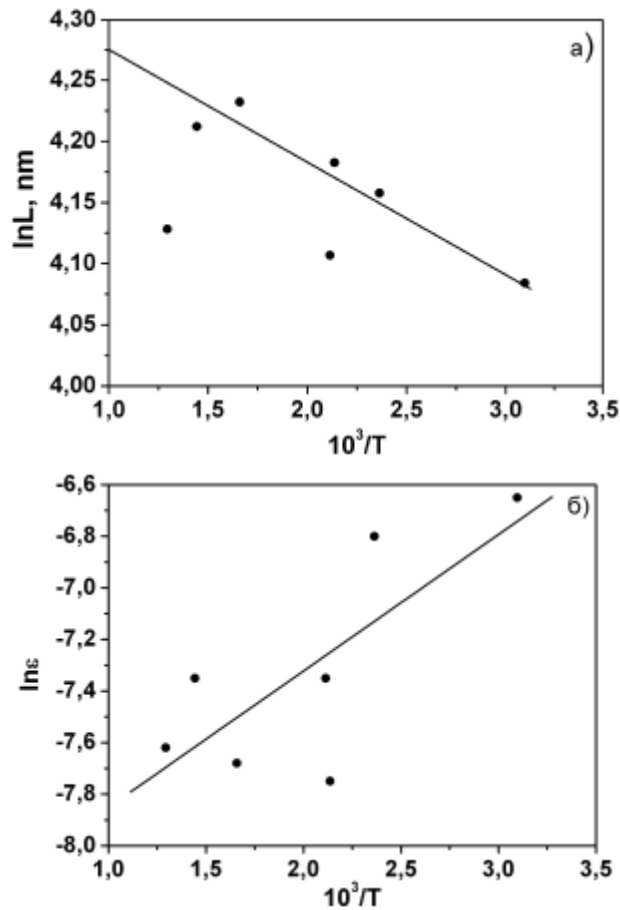


Рисунок 4 – Активаційна залежність розмірів ОКР (а) та рівня мікрдеформацій (б) плівок ZnTe від температури підкладки T_n

Прийнявши $n=F=1$ за співвідношеннями (4),(5) можна оцінити нижню межу ρ_L та верхню межу ρ_ϵ .

Деяко інший вираз для оцінки загальної концентрації дислокацій у матеріалі наведено у [6]

$$\rho = \left(\frac{3nK}{F} \right)^{1/2} \frac{\epsilon}{bL}. \quad (6)$$

У відсутності помітної полігонізації та однакої відстані між дислокаціями можна прийняти $n \sim F$, $b = d$, $K = 4$, де d - період ґратки матеріалу у відповідному напрямі. Тоді отримуємо вираз придатний для розрахунків усередненої густини дислокацій в плівках.

$$\rho = \frac{\sqrt{12}\epsilon}{dL}. \quad (7)$$

Результати розрахунків середньої густини дислокацій в плівках з використанням виразів (4), (5) та (7) наведені у таблиці 2. Ці дані в межах порядку корелюють між собою. Як видно плівки характеризуються низькою (див. наприклад [6]) концентрацією дислокацій, які в основному зосереджені на границях ОКР. Об'єм ОКР

практично вільний від дислокацій, одна дислокація припадає приблизно на 10 блоків.

Характерним при визначенні розмірів ОКР трьома різними способами є те, що розраховані значення $L_{(h00)} > L_{(hhh)}$. Можливі два пояснення цього факту: або ОКР дійсно є нерівноосними, їх розміри у напрямку перпендикулярному кристалографічним площинам (111) є меншими ніж у напрямку перпендикулярному (200), або ОКР є рівноосними, але свій вклад у розширення ліній, що відповідають відбивання від площин з (hhh) вносять ДП.

Розглянемо більш докладно перше припущення. Як встановлено в результаті досліджень, розміри ОКР є суттєво меншими розмірів зерен, що спостерігаються металографічно. На нашу думку, ці розміри в напрямку перпендикулярному площинам (111) обмежуються двійниками, ДП, а самі ОКР мають форму близьку до циліндричної. При цьому висота циліндра $L_{(hhh)}$, як свідчать прості геометричні побудови, менша його діаметру.

Таблиця 2 - Мікронапруження та густина дислокацій в плівках ZnTe

T_n , К	(hkl)	L , нм	$\varepsilon \cdot 10^3$	σ , МПа	$\rho_L \cdot 10^{-13}$, лін/м ²	$\rho_{\varepsilon} \cdot 10^{-13}$, лін/м ²	$\rho \cdot 10^{-13}$, лін/м ²
шихта	(111)-(222)	37,54	1,19	76,16	212,9	18,3	31,2
	(200)-(400)	75,21	1,07	68,48	53,0	19,7	16,2
323	(111)-(222)	59,39	1,29	82,56	85,1	21,5	21,4
	(200)-(400)	94,25	0,33	21,12	33,8	1,9	3,98
423	(111)-(222)	63,93	1,11	71,04	73,4	15,9	17,1
	(200)-(400)	48,65	0,42	26,88	126,8	3,0	9,8
468	(111)-(222)	65,54	0,43	27,52	69,8	2,4	6,5
	(200)-(400)	70,65	0,79	50,56	60,1	10,7	12,7
473	(111)-(222)	60,76	0,64	40,96	81,3	5,3	10,4
	(200)-(400)	-	-	-	-	-	-
603	(111)-(222)	68,87	0,46	29,44	63,3	2,7	6,6
	(200)-(400)	75,98	0,51	32,64	51,9	4,5	7,6
693	(111)-(222)	67,50	0,64	40,96	65,8	5,3	9,3
	(200)-(400)	69,34	0,46	29,44	62,4	3,6	7,5
773	(111)-(222)	62,07	0,49	31,36	77,9	3,1	7,8

Якщо вважати, що ОКР є рівноосними, а додаткове розширення ліній (111) та (222) пов'язане з присутністю ДП, можна розрахувати концентрацію сумарної кількості деформаційних та ростових дефектів [21]

$$\alpha' = 1,5\alpha + \beta = 3,04 \left(\frac{1}{L_{(h00)}} - \frac{1}{L_{(hhh)}} \right) d_{(111)}, \quad (8)$$

де α - концентрація деформаційних; β - ростових ДП; $d_{(111)}$ - міжплощинна відстань.

Відповідні результати розрахунку α' наведені у таблиці 1. Видно, що концентрація ДП у плівках ZnTe зменшується при зростанні температури підкладки від 0,67% ($T_n=323$ К) до 0,04% ($T_n=693$ К). Найбільша кількість ДП (1,43%) спостерігається у шихті. Ці величини суттєво менші ніж знайдені у плівках ZnTe отриманих електрохімічним осадженням при температурах розчину $T=303-363$ К ($\alpha'=1,5-8,5\%$) [6]. Одночасно як у досліджених плівках так і електрохімічно осаджених [6] спостерігається тенденція до зменшення концентрації ДП при збільшенні температури синтезу. Отримані результати свідчать про більш рівноважні умови конденсації плівок у випадку випаровування халькогеніду у КЗО. Вони добре корелюють з даними про термодинамічні параметри

сфалеритної та вюрцитної фаз з'єднання. При збільшенні T_n стійкість кубічного телуриду цинку зростає, ймовірність порушення порядку чередування площин (111) зменшується, відповідно зменшується концентрація ДП.

ВИСНОВКИ

Проведене дослідження субструктурних характеристик тонких плівок ZnTe, отриманих методом термічного випаровування у замкненому об'ємі при різних умовах конденсації. Розміри ОКР, рівень мікрореформацій, концентрація ДП в конденсатах, середня густина дислокацій на границях субзерен та в їх об'ємі визначені за фізичним розширенням дифракційних ліній з використанням метода Хола та потрійної згортки. Показано, що залежність розміру ОКР від температури підкладки має вигляд кривої з максимумом при $T_n=600-650$ К. При цьому найбільші значення L сягають 70 нм. Рівень же мікрореформацій в плівках монотонно зменшується при збільшенні T_n від $\varepsilon \sim 1,29 \cdot 10^{-3}$ до $\varepsilon \sim 0,64 \cdot 10^{-3}$. Встановлено, що механізми зростання розмірів ОКР та зменшення рівня мікрореформацій носять активаційний характер. Показано, що для плівок ZnTe, отриманих методом КЗО, є характерною низька концентрація дислокацій та ДП ($\alpha' = 0,04\% - 0,67\%$) порівняно з шарами нанесеними іншими методами. Ці результати свідчать про більш рівноважні умови конденсації плівок при випаровуванні халькогеніду у КЗО та перспективність використання цього методу для отримання конденсатів з високою структурною досконалістю, придатних для застосування у різноманітних приладах електроніки.

SUMMARY

THE SUBSTRUCTURAL CHARACTERISTICS OF ZnTe THIN FILMS

M.M. Kolesnyk, S.N. Danilchenko*, A.S. Opanasyuk, N.N. Opanasyuk

Sumy State University, Rymsky-Korsakov St., 2, 40007, Sumy, Ukraine,

**Applied Physics Institute, Petropavlovskaya 58, 40030, Sumy, Ukraine*

e-mail: maxxkol@yahoo.com

The substructural characteristics of ZnTe thin films obtained by close-spaced vacuum sublimation technique under different condensation conditions were investigated. The size of coherent scattering regions (CSR), the level of microstrain, fault defect concentration in condensate, the average dislocations density on the subgrain boundaries and their volume were estimated with X-ray diffraction line broadening using Holl method and the method of threefold convolution. It is shown that the mechanism of CSR size increase and the microdeformation level reduction are of the activation nature.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Khawaja E.E., Al-Daous M.A., Durrani S.M.A. et al. Chemical inhomogeneity in zinc telluride thin films prepared by thermal evaporation// Thin Sol.Films.-2005.-V.485.-P.16-21.
2. Gessert T.A., Mason A.R., Reedy R.C. et al. Development of rf sputtered, Cu-doped ZnTe for use as a contact interface layer to p-CdTe//J.Electr.Mat.-1995.-V.24, №10.-P.1443-1449.
3. Bhargava R. Properties of wide band gap II-VI semiconductors. – London, United Kingdom: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, 1997. - 238.p.
4. Panchekha P.A. Structure and technology problems of A_2B_6 semiconductor films//Functional materials.-2000.-V.7, №2.-P.1-5.
5. Rakhshani A.E., Pradeep B. Thin films of ZnTe electrodeposited on stainless steel // Appl.Phys. - 2004. - A79. -P.2021-2025.
6. Mahalingam T., John V.S., Ravi G., Sebastian P. J. Microstructural characterization of electrosynthesized ZnTe thin films// Cryst Res.Technol.-2002.-V.37, №4.-P.329-339.
7. Bellakhdar H, Outzourhit A, Ameziane E.L. Study of ZnTe thin films deposited by r.f. sputtering// Thin Solid Films.- 2001.- V.382 - P.30-33.
8. Structural and surface analysis of thin-film ZnTe formed with pulsed-laser deposition / Erlacher A.,Lukaszew A.R.,Jaeger et al // Surf. Sci.- 2006.- V.600 - P.3762-3765.

9. Structural and electrical properties of evaporated ZnTe thin films / Ibrahim A.A., El-Sayed N.Z., Kaid M.A et al // Vacuum.- 2004.- V.75 - P.189-194.
10. Growth of $Cd_{1-x}Zn_xTe$ film by hot-wall method and its evaluation / Takahashi J., Mochizuki K., Hitomi K. Et al // J. Cryst. Growth.- 2004.- V.269. - P.419-424.
11. Lopez-Otero A. Hot wall epitaxy. Invited Review// Thin Solid Films.-1978.-V.49.-P.3-57.
12. Калинин И.П., Алесковский В.Б. Эпитаксиальные пленки соединений A_2B_6 . - Ленинград:Изд-во ЛГУ,1978.-311 с.
13. Venkata Subbaiah Y.P., Prathap P., Ramakrishna Reddy K.T. Structural, electrical and optical properties of ZnS films deposited by close-spaced evaporation //Appl.Surf. Sci. - 2006. - V.253.- P.2409-2415.
14. Prathap P., Venkata Subbaiah Y.P., Ramakrishna Reddy K.T., Miles R.W. Influence of growth rate on microstructure and optoelectronic behaviour of ZnS film// J.Phys.D:Appl Phys. - 2007.-V.40.-P.5275-5282.
15. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. - Москва: Металлургия,1982. -632 с.
16. Warren B.E. X-ray Diffraction. - Dover, New York, 1990. -253 p.
17. Каган А.С., Шишлянникова Л.М., Уникель А.П. Применение тройной свертки в методе аппроксимации формы профилей рентгеновских дифракционных линий //Заводская лаборатория.-1980.-Т.46, №10.-С.903-906.
18. Данильченко С.М., Калініченко Т.Г., Колесник М.М. та ін. Структурні характеристики плівок ZnTe, отриманих методом квазізамкненого об'єму // Вісник СумДУ, Серія Фізика, математика, механіка.- 2007.- №1. - С.117-123.
19. Amutha R., Subbarayan A. Sathyamoorthy R. Influence of substrate temperature on microcrystalline structure and optical properties of ZnTe thin films// Cryst Res.Technol.- 2006.-V.41, №12.-P.1174-1179.
20. Feng L., Mao D., Tang J., Collins R.T., Thefny J.U. The structural, optical and electrical properties of vacuum evaporated Cu-doped ZnTe polycrystalline thin films// J.Electr.Mat.- 1996.-V.25, №9.-P.1422-1427.
21. Палатник Л.С., Фукс М.Я., Косевич В.М. Механизм образования и субструктура конденсированных пленок.- Москва:Наука,1972.- 318 с.

Колесник М.М. – аспірант кафедри загальної та експериментальної фізики;
Данильченко С.М. – кандидат фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник;
Опанасюк А.С. – кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри загальної та експериментальної фізики;
Опанасюк Н.М. – кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри прикладної фізики

Надійшла до редакції 12 жовтня 2008 р.