

РОЗРАХУНОК АНСАМБЛЮ ВЛАСНИХ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ $CdTe$ МЕТОДОМ КВАЗІХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ ДЛЯ ВИПАДКУ ЧАСТКОВОЇ РІВНОВАГИ

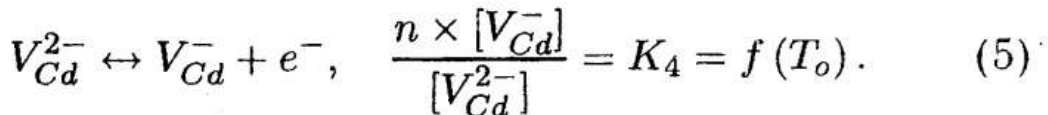
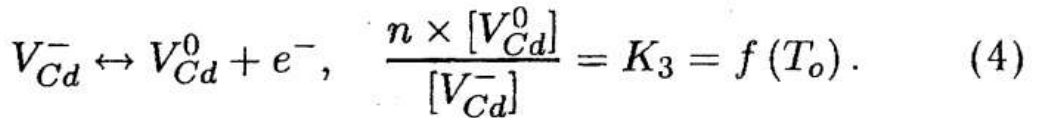
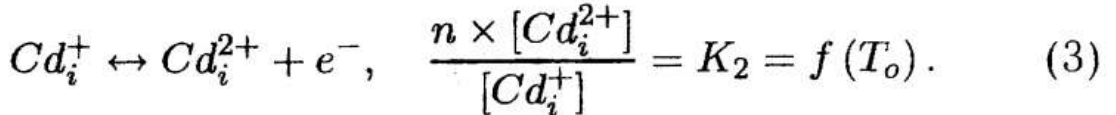
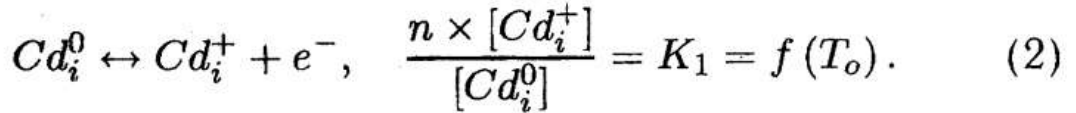
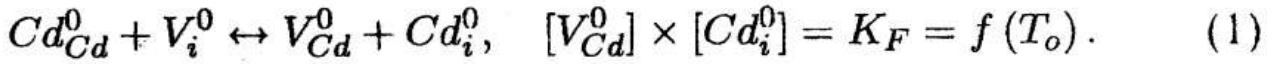
Косяк В.В., Опанасюк А.С.

Метод квазіхімічних реакцій широко використовується при вивченні рівноваги структурних дефектів у напівпровідниках. Незважаючи на велику кількість робіт [1], де проведено розрахунок дефектної структури телуриду кадмію для різних моделей дефектів, у більшості з них розглянуто випадок так званої повної рівноваги. При цьому співставлення розрахункових та експериментальних результатів можливе лише у процесі проведення високотемпературних вимірювань провідності та ефекту Холла в інтервалі температур $T = 800\text{--}1200\text{ К}$. На практиці більшість вимірювань проводять при температурах близьких до кімнатної. В цьому випадку стан дефектів у матеріалі більш адекватно може бути описаний моделлю часткової рівноваги або закалювання [2].

У роботі наведені результати використання даної моделі для опису стану дефектів у нелегованих монокристалах $CdTe$, відпалених при різних тисках кадмію. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у напівпровіднику проводився у два етапи. На першому етапі моделювався стан точкових дефектів у $CdTe$ для випадку повної рівноваги, потім ці результати використовувались як вхідні для остаточних розрахунків.

Для моделювання стану власних дефектів телуриду кадмію в умовах повної рівноваги використовувалась система квазіхімічних рівнянь, наведена у [3]. При достатньо швидкому охолодженні зразків відбувається заморожування ансамблю точкових дефектів, що виникли в матеріалі при високій температурі. Однак охолодження не впливає на рівноважний баланс електронів і дірок. В результаті при достатньо низькій температурі всі електрони і дірки рекомбінують, а надлишок вільних носіїв захоплюється власними дефектами, які переходять у нейтральний стан. Відповідні процеси можна врахувати шляхом введення у систему, яка описує стан повної рівноваги, двох додаткових рівнянь, що характеризують сталість загальної концентрації заряджених і нейтральних вакансій та міжвузольних атомів. Система квазіхімічних рівнянь, що описує

закалювання має вигляд



$$n + [V_{Cd}^-] + 2[V_{Cd}^{2-}] = p + [Cd_i^+] + 2[Cd_i^{2+}]. \quad (6)$$

$$[V_{Cd}^-] + [V_{Cd}^{2-}] + [V_{Cd}^0] = [V_{Cd}]_{tot} = f(T_p). \quad (7)$$

$$[Cd_i^+] + [Cd_i^0] = [Cd_i]_{tot} = f(T_p). \quad (8)$$

де n , p , $[Cd_i^0]$, $[Cd_i^+]$, $[Cd_i^{2+}]$, $[V_i^0]$, $[V_{Cd}^0]$, $[V_{Cd}^-]$, $[V_{Cd}^{2-}]$ концентрації відповідних дефектів; K_G , K_F , K_1 , K_2 , K_3 , K_4 , K_i константи квазіхімічних реакцій; T_o , T_p температури дослідження та отримання зразків.

В даній системі реакція (1) описує впровадження Cd у ґратку напівпровідника, реакції (2) (5) рівновагу власних дефектів у конденсаті при температурі дослідження T_o . Співвідношення (6) задає умову електронейтральності напівпровідника, а (7) і (8) враховують сталість загальної концентрації дефектів у процесі закалювання матеріалу. Результати розрахунків ансамблю точкових дефектів у $CdTe$ з використанням квазіхімічних рівнянь (1)-(8) наведені на рис. 1.

Розраховані залежності концентрації власних дефектів від температури вирощування кристалів та тиску пари Cd при відпалі зразків дозволили визначити холлівську концентрацію носіїв у матеріалі при різних режимах впливу на напівпровідник. Це дозволяє прогнозувати електрофізичні властивості кристалів $CdTe$ одержаних при різних фізико-технологічних умовах вирощування та відпалу.

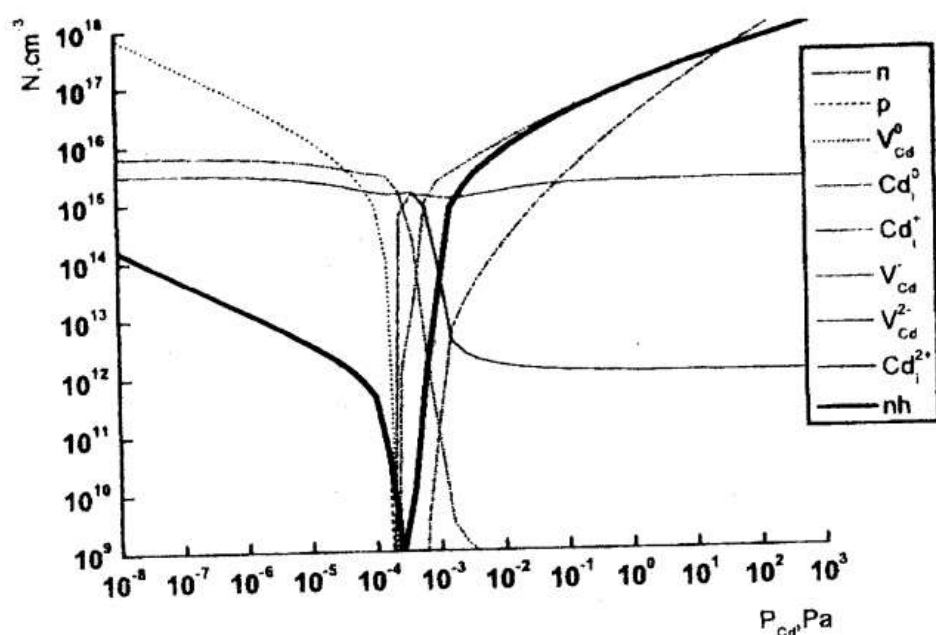


Рис. 1 Залежність концентрації власних дефектів у $CdTe$ від парціального тиску пари при закалюванні зразків.

№3.- С. 475-480.

2. Крөггер Ф. Химия несовершенных кристаллов.-М.:Мир, 1969.-620 с.
3. Зякун Д.Г., Кунченко А.Л., Тыркусова Н.В. Расчёт концентрации собственных дефектов в пленках теллурида кадмия методом квазихимических реакций // Тези науково-технічної конференції викладачів співробітників, аспірантів і студентів фізико-технічного факультету.- 15-30 квітня 2002.- Суми СумДУ.-2002.-С. 148-150.

ВРАХУВАННЯ ПРОСТОРОВОЇ НЕОДНОРІДНОСТІ НАПІВПРОВІДНИКА ПРИ ВИЗНАЧЕННІ ПАРАМЕТРІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ

Колесник М.М., Опанасюк А.С.

Електричні властивості ізолюючих та напівізолюючих матеріалів в значній мірі визначаються присутністю в них локалізованих станів (ЛС). Для знаходження параметрів ЛС в напівпровідниках у теперішній час широкого використання набув метод, заснований на аналізі вольт-амперних характеристик (ВАХ) в режимі струмів, обмежених просторовим за-