

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

**ІНЖЕКЦІЙНА СПЕКТРОСКОПІЯ  
ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ  
У ПЛІВКАХ НАПІВІЗОЛЮЮЧИХ СПОЛУК  $A_2B_6$**

**МОНОГРАФІЯ**

За загальною редакцією  
доктора фізико-математичних наук А. С. Опанасюка  
кандидата фізико-математичних наук Д. І. Курбатова

Рекомендовано вченою радою Сумського державного університету

Суми  
Сумський державний університет  
2017

Авторський колектив:

*А. С. Опанасюк*, доктор фізико-математичних наук, професор Сумського державного університету;

*Д. І. Курбатов*, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Сумського державного університету;

*Н. В. Тиркусова*, кандидат фізико-математичних наук, доцент Сумського державного університету;

*М. М. Колесник*, кандидат фізико-математичних наук, доцент Сумського державного університету;

*В. В. Косяк*, кандидат фізико-математичних наук, докторант Сумського державного університету;

*О. А. Доброжан*, асистент, молодший науковий співробітник Сумського державного університету.

Наукові редактори:

*А. С. Опанасюк*, доктор фізико-математичних наук, професор Сумського державного університету;

*Д. І. Курбатов*, кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Сумського державного університету.

Рецензенти:

*О. Д. Погребняк* – доктор фізико-математичних наук, професор Сумського державного університету;

*А. Г. Пономарев* – доктор фізико-математичних наук, професор Інституту прикладної фізики НАН України (м. Суми).

*Рекомендовано до видання вченою радою Сумського державного університету  
(протокол № 3 від 13 листопада 2017 року)*

I-57 Інжекційна спектроскопія локалізованих станів у плівках напівізолюючих сполук  $A_2B_6$ : монографія / А. С. Опанасюк, Н. В. Тиркусова, М. М. Колесник, та ін. – Суми : Сумський державний університет, 2017. – 254 с.

У монографії наведено результати вивчення характеристик точкових дефектів у напівізолюючих плівках сполук  $A_2B_6$  (CdTe, ZnTe, ZnS, CdS) методом інжекційної спектроскопії, розвиненим авторами. Викладені основи цього методу, встановлені межі його застосування, обмеження та роздільна здатність. Проаналізовано вплив експериментальних факторів, а також спрощень робочих співвідношень на похибку визначення параметрів пасток безпосередньо з вольт-амперних характеристик (ВАХ) зразків. Описано самоузгоджене та високотемпературне наближення методу інжекційної спектроскопії. Розглянуто вплив неоднородності розподілу пасток за товщиною зразків на точність визначення їх параметрів з ВАХ струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ). Подано результати дослідження ансамблю точкових дефектів у плівках сполук  $A_2B_6$  у рамках квазіхімічного формалізму та визначення їх параметрів із ВАХ СОПЗ. Монографія може бути корисною для фахівців, які займаються дослідженням ансамблю точкових дефектів у сполуках  $A_2B_6$ , використанням цих сполук в електроніці, та студентів і аспірантів.

**УДК 539.216.2(0.034)**

© Опанасюк А. С., Тиркусова Н. В.,  
Колесник М. М., Косяк В. В., Курбатов  
Д. І., Доброжан О. А. 2017 © Сумський  
державний університет, 2017

# ЗМІСТ

## СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

РОЗДІЛ 1 СТРУМИ ОБМЕЖЕНІ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У НАПІВПРОВІДНИКАХ.....	14
1.1 Класифікація ЛС у напівпровідниках .....	14
1.2 Основні поняття пов'язані з електропровідністю обмеженою просторовим зарядом .....	18
1.3 ВАХ у випадку монополярної інжекції носіїв у напівпровідник .....	21
1.3.1 Залежність струм–напруга у випадку присутності у напівпровіднику моноенергетичних пасток .....	26
1.3.2 Особливості ВАХ у випадку неперервних розподілів пасток .....	34
1.3.3 Обмеження моделей слабого та сильного заповнення пасток носіями.....	39
1.3.4 Нові підходи до визначення параметрів глибоких пасток з ВАХ СОПЗ .....	42
РОЗДІЛ 2 ВАХ СОПЗ У ВИПАДКУ СКЛАДНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛС ЗА ЕНЕРГІЄЮ (ПРЯМА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ .....	45
2.1. Аналіз придатності аналітичних виразів для коректних розрахунків ВАХ СОПЗ .....	45
2.2. Наближений метод розрахунку залежностей струм – напруга за відомими розподілами носіїв заряду на пастках ....	56
2.3. Вплив параметрів ЛС та температури вимірювань на вигляд ВАХ .....	60
РОЗДІЛ 3 ОСОБЛИВОСТІ РЕКОНСТРУКЦІЇ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ МЕТОДОМ ІС (ЗВОРОТНА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ .....	64
3.1. Теоретичні основи методу ІС.....	64
3.2. Визначення параметрів глибоких пасток у випадку різних типів розподілів ЛС .....	77

3.3. Вплив експериментальних факторів на точність визначення параметрів глибоких локалізованих центрів методом ІС .....	80
3.4. Вплив спрощень робочих співвідношень на точність визначення параметрів пасток методом ІС .....	87
3.5. Самоузгоджений метод ІС .....	96
3.6. Високотемпературне наближення методу ІС.....	102
<b>РОЗДІЛ 4 ІНЖЕКЦІЯ НОСІЇВ В УМОВАХ НЕОДНОРІДНОГО ПРОСТОРОВОГО РОЗПОДІЛУ ЛС.....</b>	<b>114</b>
4.1. Основні підходи до визначення параметрів ЛС у напівпровідниках методом аналізу ВАХ СОПЗ .....	114
4.2. Врахування впливу просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів ЛС.....	115
4.3. Вплив просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів ЛС методом аналізу ВАХ СОПЗ .....	118
4.4. ВАХ СОПЗ неоднорідних матеріалів .....	120
4.5. Врахування приповерхневих станів, розташованих поблизу однієї поверхні зразка.....	124
4.6. Врахування приповерхневих станів, розташованих поблизу обох поверхонь зразка .....	132
<b>ГЛАВА 5 КЛАСИФІКАЦІЯ МЕХАНІЗМІВ ЗАРЯДОПЕРЕНЕСЕННЯ У НАПІВПРОВІДНИКАХ.....</b>	<b>138</b>
5.1 Ідентифікація механізму зарядоперенесення в досліджуваних структурах.....	138
5.2. Ідентифікація СОПЗ серед інжекційних процесів.....	144
<b>ГЛАВА 6 ДОСЛІДЖЕННЯ ТД У ПЛІВКАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ У РАМКАХ КВАЗІХІМІЧНОГО ФОРМАЛІЗМУ .....</b>	<b>149</b>
6.1. Класифікація дефектів у плівках сполук $A_2B_6$ .....	149
6.2. Розрахунок ансамблю ТД у CdTe у рамках квазіхімічного формалізму .....	150
6.2.1. Розрахунок ансамблю ТД у монокристалах CdTe .....	150
6.2.2. Квазіхімічний опис ансамблю ТД у плівках CdTe для випадків повної рівноваги та гартування .....	164

6.2.3. Моделювання ансамблю точкових дефектів у плівках CdTe з використанням параметрів дефектоутворення розрахованих « <i>ab initio</i> » .....	169
6.3. Розрахунок ансамблю ТД у сульфіді цинку в рамках квазіхімічного формалізму.....	182
6.3.1. Розрахунок ансамблю ТД у монокристалах ZnS з використанням параметрів дефектоутворення розрахованих « <i>ab initio</i> » .....	182
6.3.2. Розрахунок ансамблю ТД у плівках ZnS для випадків повної рівноваги та гартування .....	184
<b>ГЛАВА 7 ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЛС У НАПІВІЗОЛЮЮЧИХ СПОЛУКАХ A<sub>2</sub>B<sub>6</sub>.....</b>	<b>189</b>
7.1. Загальна характеристика ВАХ та $\sigma - T$ залежностей плівок халькогенідів .....	189
7.1.1. ВАХ багат шарових структур на основі плівок ZnTe	189
7.1.2. ВАХ багат шарових структур на основі плівок CdTe	196
7.1.3. ВАХ багат шарових структур на основі плівок ZnS .	203
7.2. Визначення параметрів ЛС плівок халькогенідних сполук із ВАХ СОПЗ та $\sigma - T$ залежностей .....	206
7.2.1. Параметри ЛС у плівках ZnTe .....	206
7.2.2. Параметри ЛС у плівках CdTe.....	212
7.2.3. Параметри ЛС у плівках ZnS .....	216
7.2.4. Параметри ЛС у плівках CdS.....	217
Додаток А .....	222
Список використаної літератури .....	227

## СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ВАХ	вольт-амперна характеристика
ЛС	локалізований стан
ІС	інжекційна спектроскопія
СОПЗ	струми обмежені просторовим зарядом
МІ	монополярна інжекція носіїв
ПдІ	подвійна інжекція носіїв
ПдІ + ПІ	польова іонізація при подвійній інжекції носіїв
ПІ	польова іонізація дефектів
ТД	точкові дефекти
КЗО	квазізамкнений об'єм
ЗЗ, $E_g$	заборонена зона
$h$	стала Планка
$k$	стала Больцмана
$e$	заряд електрона
$m_n^*$	ефективна маса електронів
$m_p^*$	ефективна маса дірок
$\chi$	спорідненість до електрону
$\phi_m$	робота виходу електронів з металу
$\phi_s$	робота виходу електронів з напівпровідника
$\epsilon_0, \epsilon$	абсолютна діелектрична стала та відносна діелектрична проникливість матеріалу
$g$	фактор спінового виродження ЛС
$\mu_n, \mu_p$	рухливість електронів і дірок
$v$	теплова швидкість руху носіїв заряду
$\nu$	частота світла
$f(E)$	функція Фермі–Дірака
$I$	сила струму
$j$	густина струму
$j_{diff}, j_{drift}$	густина дифузійного та дрейфового струмів
$j_{eom}$	густина струму, отримана екстраполяцією омичного струму до дійсної напруги, що прик-

	ладена до зразка
$U$	напруга зміщення на зразку
$U_{TFL}$	напруга повного заповнення пасток
$E_e$	напруженість електричного поля
$\eta$	нахил ВАХ у подвійних логарифмічних координатах
$N_C$	ефективна густина станів у зоні провідності напівпровідника
$N_V$	ефективна густина станів у валентній зоні напівпровідника
$E_C$	енергія дна зони провідності
$E_V$	енергія стелі валентної зони
$E$	поточна енергія
$E_t$	енергія залягання ЛС
$E_{F0}$	рівноважне положення квазірівня Фермі у зразку при відсутності інжекції
$E_F$	енергія квазірівня Фермі
$E_{dn}, E_{dp}$	енергія електронного та діркового демаркаційного рівнів
$N_t$	концентрація моноенергетичних пасток
$N_t^{\wedge}$	концентрація пасток, яка відповідає максимуму енергетичного розподілу
$h(E)$	функція, що описує енергетичний розподіл пасток
$\sigma$	півширина гауссівського розподілу пасток
$S_n, S_p$	перетини захоплення електрона (дірки) пастками
$\rho$	густина об'ємного заряду у зразку
$\rho_a$	густина об'ємного заряду у зразку поблизу анода
$\theta$	коефіцієнт прилипання носіїв (параметр Ламперта)
$\theta^*$	величина, що залежить від другої похідної

	$\frac{dn_f/dE_F}{dn_s/dE_F}$
$Q$	відношення густини об'ємного заряду до ефективної концентрації носіїв заряду
$a_{m0}$	фактор генерації носіїв в с-зону з рівня $m$ при $E \rightarrow 0$
$a_{ext}, b_{ext}, A_{ext}$	константи, що залежать від $h_{ext}$
$B_{ext}$	
$L$	товщина зразка
$L_{ef}$	ефективна товщина зразка
$W_a$	ширина віртуального катода
$C$	ємність конденсатора
$T$	температура зразка
$kT$	теплова енергія
$T_c$	параметр експоненціального енергетичного розподілу ЛС
$T_e$	температура випарника
$T_p$	температура відпалу зразків
$T_s$	температура підкладки
$q, l, E_1, E_2, E_3$	параметри високопольових процесів у напівпровідниках
$A, B, x_0$	константи, що характеризують просторовий розподіл пасток
$r_1, r_2$	параметри просторового розподілу приповерхневих станів
$S(x)$	функція, що описує просторовий розподіл пасток
$S_0, S_1$	параметр, що описує вклад об'ємних та приповерхневих ЛС на інжектувальному (катоді) або колектувальному (аноді) електродах відповідно
$S_1, S_2$	приповерхневі ЛС на електродах, що інжектують та колектують носії, відповідно
$\{S\}$	усереднене за товщиною шару значення фун-



	кції просторового розподілу
$\alpha$	коефіцієнт, що враховує відмінність напруженості електричного поля поблизу анода від його середнього значення $F(L) = \alpha U/L$ у зазорі між контактами зразка
$\beta$	коефіцієнт, що враховує відмінність концентрації $n_s$ поблизу анода від середньої концентрації інжектованих у зразок зарядів $n_s(L) = \beta n_s$
$\delta_1, \delta_2$	корегувальні коефіцієнти
$C_A, C_B$	домішкові атоми у вузлах кристалічної ґратки
$C_i$	домішкові атоми у міжвузлях
$A_i, B_i$	міжвузлові атоми сполук $A_2B_6$
$A_B, B_A$	антиструктурні дефекти
$V_A, V_B$	вакансії у вузлах кристалічної ґратки
$G$	індекс, що відповідає атомам у газовій фазі
$N_{(X0)}^z$	концентрація відповідного точкового дефекту
$E_X$	енергія утворення дефекту
$S_{vibx}$	коливна ентропія дефекту
$U_{vibx}$	коливна енергія дефекту
$z$	ступінь іонізації дефектів
$P_{Cd}, P_{Te2}$	тиск пари компонентів сполуки при відпалі
$p_f$	концентрація вільних дірок
$n_{f0}$	рівноважна концентрація вільних електронів у зразку
$n_f$	концентрація вільних електронів
$n_i$	концентрація інжектованих з катода носіїв
$n_{fc}, n_{fL}$	концентрація вільних носіїв на катоді та аноді відповідно
$n_{i0}$	концентрація рівноважних носіїв локалізованих на пастках
$n_t$	концентрація носіїв, локалізованих на пастках
$n_{s0}$	загальна рівноважна концентрація (вільних та захоплених) носіїв
$n_s$	загальна концентрація (вільних та захоплених)

	носіїв
$n_{finh(L)}$	концентрація вільних носіїв на аноді у випадку неоднорідного матеріалу
$n_H$	холівська концентрація носіїв заряду
$E_a, E_d$	енергія іонізації дефекту акцепторних та донорних типів
$\alpha^-$	параметр регуляризації
$Y, F$	деякі метричні простори
$y(s)$	функція, що описує розподіл пасток за енергіями $h(E)$
$\Delta E_n$	глибина залягання енергетичних рівнів власних дефектів
$A$	неперервний оператор, що переводить елементи $Y$ в елементи $F$

## ВСТУП

Швидкий розвиток мікроелектроніки нерозривно пов'язаний з розробленням, освоєнням і використанням нових напівпровідникових матеріалів. Серед напівпровідників, що будуть визначати майбутнє сенсорики, опто-, акустоелектроніки та геліоенергетики, важливе місце займають сполуки  $A_2B_6$ , утворені елементами другої (Cd, Zn, Hg) та шостої (O, S, Se, Te) груп періодичної системи елементів. Зростаючий інтерес до цих матеріалів пояснюється унікальними фізичними властивостями, що дозволяє використовувати їх у різних приладах електроніки.

Електричні властивості напівпровідникових матеріалів значною мірою визначаються наявністю глибоких пасток, здатних захоплювати вільні носії заряду. Дослідження локалізованих станів (ЛС) у забороненій зоні (ЗЗ) цих речовин є актуальним науковим завданням, оскільки вони зумовлюють такі важливі параметри матеріалу, як час життя носіїв заряду, їх довжину вільного пробігу та інше, а отже, й експлуатаційні характеристики таких напівпровідникових приладів, як сонячні елементи, фотодетектори, сенсори та інше. Особливістю сполук  $A_2B_6$  є широкий спектр ЛС у ЗЗ напівпровідників, це пов'язано з наявністю у матеріалах значної кількості залишкових домішок та електричною активністю власних точкових дефектів (ТД), таких як вакансії, міжвузлові атоми, дислокації тощо.

Монографія складається із семи розділів.

У першому розділі роботи проведена класифікація ЛС у напівпровідниках, викладені основні поняття, пов'язані з електропровідністю, обмеженою просторовим зарядом при монополярній інжекції носіїв у напівпровідниках, розглянуті особливості ВАХ у разі наявності ЗЗ матеріалу моноенергетичних та неперервних розподілів пасток, наведені обмеження моделей слабого

та сильного заповнень пасток носіями та представлені нові підходи до визначення параметрів глибоких пасток з вольт-амперних характеристик (ВАХ) струмів обмежених просторовим зарядом (СОПЗ).

У другому розділі роботи представлені результати побудови теоретичних ВАХ СОПЗ з використанням декількох різних методів у випадку присутності у ЗЗ матеріалу складних розподілів ЛС за енергією (пряма задача експерименту). Проаналізовано вплив виду аналітичних виразів, що при цьому використовуються, на точність побудови ВАХ. Викладено наближений метод побудови залежностей струм-напруга за відомими розподілами носіїв заряду на пастках, визначено вплив параметрів ЛС та температури вимірювань на їх вигляд.

У третьому розділі монографії розглянуті особливості реконструкції енергетичних розподілів ЛС з ВАХ СОПЗ методом інжекційної спектроскопії (ІС) (зворотна задача експерименту). Наведені теоретичні основи цього методу, досліджено вплив експериментальних факторів та спрощень робочих співвідношень на точність визначення параметрів ЛС з експериментальних ВАХ методом ІС. Описано самоузгодження та високотемпературне наближення методу.

У четвертому розділі розглянуто вплив неоднородності розподілу пасток за товщиною зразка на точність визначення їх параметрів з ВАХ СОПЗ. Розглянуті випадки присутності приповерхневих ЛС поблизу однієї або обох поверхонь зразка. Наведені результати розрахунку корегуючих коефіцієнтів, що дозволяють врахувати вплив неоднорідності матеріалу на точність визначення параметрів пасток.

П'ятий розділ монографії присвячений класифікації механізмів зарядоперенесення у напівпровідниках та процедурі ідентифікації інжекційних серед подібних за проявом на ВАХ.

У шостому розділі подані результати досліджень ансамблю ТД у плівках халькогенідів у рамках квазіхімічного формалізму. Розрахунки проведені для випадку відпалу монокристалів CdTe під надлишковим тиском кадмію, плівок CdTe, ZnS при їх нанесенні на підкладку при різних температурах. Також наведені результати моделювання ансамблю ТД у плівках телуриду кадмію та сульфїду цинку з використанням параметрів дефектоутворення розрахованих «*ab initio*».

Останній розділ монографії присвячений визначенню параметрів ЛС у плівках сполук ZnTe, CdTe, ZnS, CdS із ВАХ СОПЗ методом ІС та шляхом аналізу температурних залежностей провідності. З використанням літературних даних проведена ідентифікація цих рівнів як таких, що належать власним точковим дефектам, неконтрольованим домішкам, а також їх комплексам.

Розділ 1 монографії підготовлено Опанасюком А.С., розділи 2,3 – Тиркусовою Н.В., розділ 4 – Колесником М.М., розділ 5 – Доброжаном О.А., розділ 6 – Косяком В.В., розділ 7 – Курбатовим Д.І., Косяком В.В., Колесником М.М.

# РОЗДІЛ 1

## СТРУМИ ОБМЕЖЕНІ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

### 1.1 Класифікація ЛС у напівпровідниках

Напівпровідникові матеріали та діелектрики будь-якої чистоти завжди містять неконтрольовані домішкові атоми, які створюють у ЗЗ матеріалу свої власні енергетичні рівні, які отримали назву домішкових. Ці рівні можуть розташовуватися як у дозволених так і в ЗЗ матеріалу на різній відстані від вершини валентної зони, або дна зони провідності. Рівні, розташовані досить глибоко ( $E_t \geq kT$ , де  $kT$  – теплова енергія) у ЗЗ матеріалу отримали назву локалізованих станів (ЛС). Своїм виникненням, крім домішкових атомів, вони можуть бути також зобов'язані таким недосконаlostям кристалічної структури напівпровідника, як власні ТД, дислокації, межі зерен, поверхня та ін. [1-7]. Для опису ЛС прийнято використовувати фізичні параметри, які одержали назву глибини залягання рівня у ЗЗ матеріалу ( $E_t$ ), концентрації пасток ( $N_t$ ), перетину захоплення носіїв заряду (електрону або дірки) дефектом ( $S_n$ ), коефіцієнту прилипання носіїв ( $\theta$ ) та ін. [1-3, 8].

У залежності від кінетики захоплення основних носіїв заряду ЛС їх поділяють на рекомбінаційні центри та пастки [1, 6, 7, 9, 10]. Для того, щоб встановити критерій розмежування центрів рекомбінації і центрів прилипання носіїв за енергією залягання у ЗЗ напівпровідника вводиться поняття про демаркаційні рівні.

У подальшому будемо вважати що процеси генерації-рекомбінації носіїв відбуваються у матеріалі з електронним типом провідності.

Локалізований енергетичний рівень, розташований на відстані  $E_t$  нижче дна зони провідності, буде належати електронним пасткам, якщо для електрона, що знаходиться на цьому рівні, ймовірність термічного збудження в зону провідності буде більшою ймовірності рекомбінації з вільною діркою валентної зони:

$$n_t \nu S_n N_c \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) > n_t \nu S_p p_f, \quad (1.1)$$

де  $n_t$  – концентрація електронів захоплених пастками;  $\nu$  – теплова швидкість носія;  $S_n, S_p$  –перетини захоплення електрона (дірки) пастками;  $N_c$  – ефективна густина станів у зоні провідності напівпровідника;  $k$  – стала Больцмана;  $T$  – температура;  $p_f$  – концентрація дірок.

Відповідно положення електронного демаркаційного рівня  $E_{dn}$  визначається співвідношенням:

$$S_n N_c \exp\left(-\frac{E_{dn}}{kT}\right) = S_p p_f. \quad (1.2)$$

Таким чином, центр, що характеризується енергетичною глибиною  $E_{dn}$ , знаходиться на грані переходу з класу електронних пасток до класу рекомбінаційних центрів і навпаки. Виражаючи  $N_c$  у співвідношенні (1.2) через концентрацію вільних електронів  $n_f$  і енергію квазірівня Фермі  $E_{Fn}$  отримаємо зв'язок між електронним демаркаційним рівнем і електронним квазірівнем Фермі:

$$E_{dn} = E_{Fn} - kT \ln\left(\frac{n_f S_n}{p_f S_p}\right). \quad (1.3)$$

Аналогічно вводиться поняття про дірковий демаркаційний рівень:

$$S_p N_V \exp\left(-\frac{E_{dn}}{kT}\right) = S_n n_f. \quad (1.4)$$

Очевидно, що

$$E_{dp} = E_{Fp} - kT \ln\left(\frac{nS_n}{pS_p}\right). \quad (1.5)$$

Таким чином, для даного типу центрів з перетинами захоплення електронів і дірок  $S_n$ ,  $S_p$  можна ввести два демаркаційні рівні (рис.1.1).

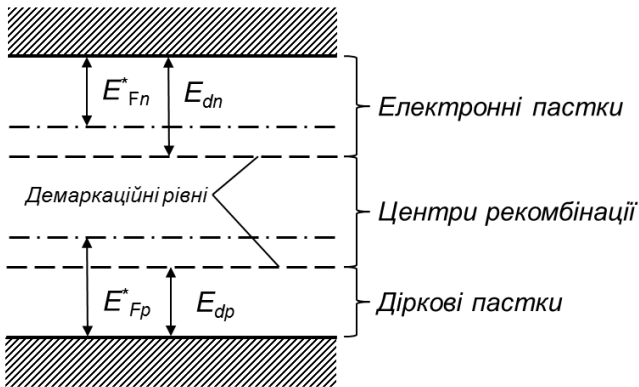


Рис. 1.1. Відносне розташування демаркаційних рівнів і квазірівнів Фермі

Демаркаційні рівні і квазірівні Фермі поділяють ЗЗ напівпровідника на п'ять областей, які мають наступні властивості. У найближчій до зони провідності області розташовуються енерге-



тичні рівні електронних пасток, що знаходяться у термічній рівновазі з даною зоною. Очевидно, що ці рівні слабо заповнені електронами, тому вони отримали назву *мілких пасток*. У другій області розташовані енергетичні рівні, які поки що знаходяться у термічній рівновазі з зоною провідності, але значно більше заповнені електронами. Вони отримали назву *глибоких пасток*. У третій області розташовані рівні *рекомбінаційних центрів*, заповнення яких визначається кінетикою рекомбінації. Нижче знаходяться рівні суттєво заповнені дірками, але такі що поки що знаходяться у термічному обміні з валентною зоною і нарешті мілкі пастки для дірок.

Необхідно враховувати, що положення демаркаційних рівнів у ЗЗ напівпровідника визначається відношенням величин поперечних перетинів захоплення електронів  $S_n$  і дірок  $S_p$ , яке залежить від природи центра. Звідси ясно, що центрам різних типів будуть відповідати різні демаркаційні рівні. Характер ЛС в значній мірі визначається також концентрацією вільних носіїв того чи іншого типу в матеріалі. Так у випадку монополярної інжекції носіїв у напівпровідник, коли концентрація носіїв одного знаку набагато більша ніж іншого, ряд дефектів, які у звичайних умовах є рекомбінаційними центрами, починають поводити себе як глибокі пастки [9, 10].

З ЛС у ЗЗ напівпровідників пов'язані як бажані, так і небажані ефекти. Наприклад, присутність великої концентрації рекомбінаційних центрів призводить до суттєвого зменшення часу життя і дифузійної довжини пробігу неосновних носіїв заряду. Як глибокі пастки, ЛС можуть впливати на кінетику спаду фотопровідності, ефекти накопичення заряду та ін. [1-3, 7, 10]. У ряді випадків введення глибоких центрів контрольовано надає напівпровідниковим матеріалам і, відповідно, електронним приладам

на їх основі, необхідні властивості [11, 12], наприклад, у випадку швидкодіючих приладів малий час життя носіїв заряду. Все це свідчить про важливість розуміння властивостей ЛС, необхідність контролю їх присутності у матеріалі у процесі одержання та обробки робочих шарів напівпровідникових приладів.

## **1.2 Основні поняття пов'язані з електропровідністю обмеженою просторовим зарядом**

Областю об'ємного (просторового) заряду напівпровідникового матеріалу звичайно називають частину простору у якому є надлишковий позитивний або негативний заряд. Об'ємний заряд може утворюватися у різноманітних ситуаціях, що виникають при використанні напівпровідників або діелектриків у електроніці. Наприклад, якщо катод емітує за одиницю часу більше електронів ніж може прийняти об'єм матеріалу, залишок електронів буде утворювати негативний об'ємний заряд, поле якого буде знижувати швидкість емісії електронів з катоду. У результаті густина струму крізь зразок у даному випадку буде контролюватися не електродом, що інjektує носії, а об'ємними властивостями напівпровідника або діелектрика, або іншими словами, рухливістю носіїв заряду в об'ємі речовини. Як правило, електрони, що емітовані, визначеним чином розподілені за енергією, а у самому матеріалі знаходяться ЛС, що також мають розподіл за енергією, нарешті існує ряд фізичних ефектів викликаних присутністю у напівпровіднику сильних полів. Таким чином, реальна картина процесів, що відбуваються у речовині, досить складна і для того щоб отримати ВАХ явища достатньо простим шляхом, потрібні спрощуючі припущення.

Темновий СОПЗ, який не зв'язаний ні з поглинанням світла, ні з термічним збудженням носіїв заряду, виникає у тих випадках, коли контактні електроди спроможні інjektувати або елект-

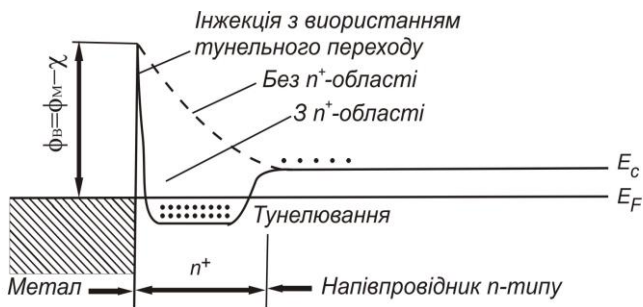
рони у зону провідності, або дірки у валентну зону напівпровідника чи діелектрика, при цьому початкова швидкість такої інжекції перевищує швидкість їх рекомбінації. Внаслідок цього інжектвані носії будуть створювати об'ємний заряд, що обмежує потік носіїв з контакту. Таким чином, СОПЗ контролюються об'ємними властивостями речовини.

Існує декілька методів отримання інжектувальних контактів до напівпровідникових матеріалів, які необхідні для забезпечення СОПЗ (рис. 1.2). Ці методи можна класифікувати наступним чином [1, 13-16]:

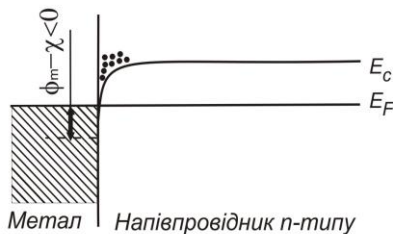
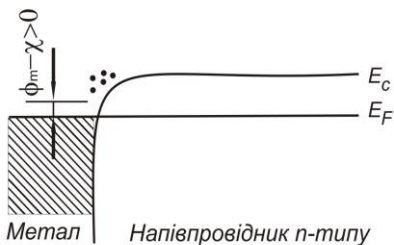
1. Інжекція електронів може здійснюватися за допомогою квантово-механічного тунельного переходу з метала у сильнолеговану  $n^+$ -область, а після цього за допомогою термічного збудження – з цієї області в зону провідності напівпровідника  $n$ -типу (рис.1.2 а). З рисунку видно, що фактична висота бар'єру для переходу електронів з  $n^+$ -області в зону провідності виявляється значно меншою ніж висота бар'єру, який електрони повинні долати при прямому збудженні з метала в зону провідності.

2. Інжекція електронів з метала в зону провідності напівпровідника може відбуватися за допомогою термоелектронної, автоелектронної або термоавтоелектронної емісії. Слід відзначити, що у випадку коли метал контактує з іншою речовиною через достатньо тонке вістря, поблизу його створюється інтенсивне електричне поле, яке зменшує ширину запертого бар'єра, сприяючи проникненню електронів через бар'єр при відносно малій прикладеній напрузі.

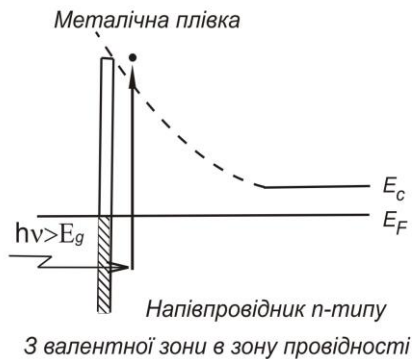
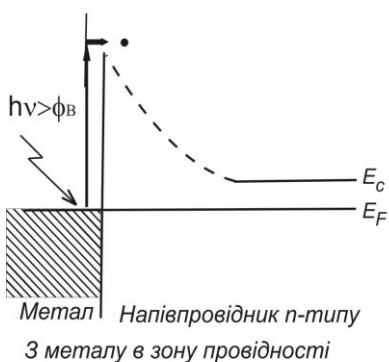
3. Інжекція електронів з метала у зону провідності напівпровідника може здійснюватися через омичний контакт (рис.1.2 б). Він реалізується при умові  $\phi_m < \phi_s$  для матеріалів  $n$ -типу провідності або  $\phi_m > \phi_s$  для матеріалів  $p$ -типу. Тут  $\phi_m$ ,  $\phi_s$  – робота виходу електронів з метала та напівпровідника.



а)



б)



в)

Рис. 1.2. Схеми енергетичних рівнів для деяких контактів, що інжектують електрони: контакт вироджений  $n^+$  -невироджений  $n$  напівпровідник (а); омичний контакт (б); інжектувальний контакт з фотозбудженням (в)

4. Інжекція електронів з металу у напівпровідник або з валентної зони напівпровідника в його зону провідності на границі розділу з металом може відбуватися в наслідок збудження матеріала світлом з частотою  $\nu$ . У першому випадку енергія кванта  $h\nu$  повинна перевершувати висоту бар'єра, у другому – ширину ЗЗ напівпровідника (рис. 1.2 в).

5. Інжекція електронів з електрода в зону провідності речовини може здійснюватися шляхом перенесення заряду. Контакт електроліт-ізолятор інjektує носії саме так. Такий процес перенесення заряду для інжекції носіїв звичайно використовується в органічних напівпровідниках.

Слід відзначити, що приповерхневі стани на границі розділу між металом і напівпровідником можуть полегшити інжекцію носіїв, а тонка плівка ізолятора між ними може змінити швидкість інжекції основних і неосновних носіїв заряду завдяки присутності різниці потенціалів на цьому шарі.

Якщо інjektувальний контакт може слугувати резервуаром носіїв заряду, поведінка цих носіїв, а отже, і струм будуть контролюватися вже властивостями тієї речовини, у якій розміщені додаткові носії. В напівпровідникових матеріалах, як вже вказувалося, завжди присутні ЛС, які створюються недосконаlostями кристалів усіх типів. Ці пастки взаємодіють з носіями інjektованими з контактів і тим самим контролюють їх потік носіїв через багат шарову структуру тим самим визначаючи вигляд ВАХ.

### **1.3 ВАХ у випадку монополярної інжекції носіїв у напівпровідник**

Для визначення параметрів ЛС у напівпровідникових матеріалах у теперішній час запропоновано багато різних методів [1, 13-16]. Усі ці методи умовно поділяють на стаціонарні та релак-

саційні [16]. Аналіз інформаційних можливостей, області застосування, переваг та недоліків різних методів проведений у роботах [15, 16]. Однак більшість відомих методів не може бути застосована для вивчення ЛС у високоомних матеріалах.

При вивченні властивостей широкозонних напівпровідників і діелектриків (напівізоляторів) широке застосування знайшов метод, заснований на аналізі ВАХ у режимі СОПЗ [1, 17-22]. Метод ВАХ СОПЗ базується на монополярній інжекції основних носіїв заряду ( $n_i$ ,  $p_i$ ) у досліджуваний матеріал (аналогічно емісії електронів у вакуум) з металевого контакту шляхом прикладання до зразка напруги зміщення ( $U$ ). Оскільки в реальних напівпровідниках і діелектриках завжди присутні ЛС, частина інжекттованих носіїв захоплюється пастками, утворює нерухомий об'ємний заряд з густиною  $\rho$  і в перенесенні струму через зразок участі не бере. Поле цього об'ємного заряду знижує швидкість емісії електронів з катода. В результаті величина струму через зразок контролюється не характеристиками електрода, що інжекттує носії заряду (катода), а об'ємними властивостями самого напівпровідника або ізолятора. При цьому, як було показано у роботах [21, 22], існує тісний зв'язок між видом ВАХ СОПЗ і параметрами ЛС, такими як глибина їх залягання, концентрація, розподіл за енергіями та ін. Це дозволяє визначити характеристики пасток безпосередньо з експериментальних кривих. При виведенні рівнянь, що встановлюють зв'язок між енергетичним спектром пасток у ЗЗ матеріалу і видом ВАХ, авторами [1, 17] використовувалася ціла низка припущень, які викладені, наприклад, у [17, 19-21].

Звичайно вважається, що:

1. Для опису властивостей інжекттованих носіїв може бути застосована зонна енергетична модель твердого тіла.

2. Розглядаються лише інжектвані носії одного знаку (електрони або дірки), а омичні контакти які їх інжектують є ідеальними. Це означає, що струм який проходить через структуру не обмежений жодними електродними процесами.

3. Рухливість вільних носіїв не залежить від величини електричного поля і характеру заповнення пасток.

4. Розподіл вільних електронів (дірок) описується статистикою Максвелла-Больцмана, в той час як захоплених носіїв – статистикою Фермі – Дірака.

5. Електричне поле настільки сильне, що складовою струму, обумовленою дифузією, а також внеском від термічно згенерованих у зразку носіїв можна знехтувати. Перша умова виконується при прикладанні напруги, яка в декілька разів перевищує  $kT/q$ , так що переважаючим у рівнянні неперервності струму стає дрейфовий член; друга умова буде виконуватися, якщо опір контакта набагато менший, ніж власний опір зразка.

6. При описі зарядоперенесення носіїв не враховуються такі ефекти сильного електричного поля як ефект Пула-Френкеля, модель Онзагера, ударна іонізація речовини, а також залежність рухливості носіїв струму від напруженості поля.

7. Теоретична модель зарядоперенесення є одновимірною (рис.1.3). Площина  $x = 0$  приймається за контакт що інжектуює носії (катод), а площина  $x = L$  співпадає з анодом (де  $L$  - товщина зразка). Цим припускається, що напруженість електричного поля дорівнює нулю ( $E_e = 0$ ) при  $x = 0$ , і відстань між реальною поверхнею електрода і віртуальним анодом, тобто поверхнею де  $dU/dx = E_e = 0$ , настільки мала, що для простоти можна вважати, що  $E_e (x = L - W_a \rightarrow L) = 0$ . Тут  $W_a$  - ширина віртуального катода. Звичайно приймається, що інжектувальні контакти до зразка є плоскими, хоча у роботі [17] розглянуті і інші випадки.

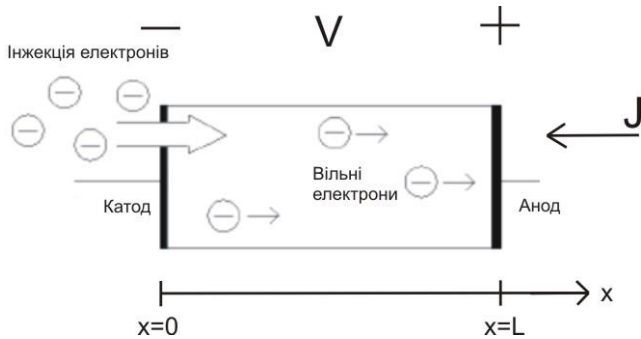


Рис. 1.3. Модель зразка при проходженні СОПЗ

У загальному випадку ВАХ СОПЗ при інжекції електронів може бути отримана шляхом спільного розв'язання рівняння неперервності струму, рівняння Пуассона і рівнянь балансу носіїв заряду як вільних, так і зв'язаних, у напівізоляторі. У найбільш загальному вигляді цю систему можна записати у такий спосіб [1-3]:

$$j = j_{diff} + j_{drift} = e\mu_n(n_f E_e + \frac{kT}{e} \frac{dn_f}{dx}) = const, \quad (1.6)$$

$$-\frac{\epsilon\epsilon_0}{e} \frac{dE_e}{dx} = (n_f - n_{f0}) + \sum_j (n_{t_j} - n_{t_{j0}}) = \rho, \quad (1.7)$$

$$n_f(x) = \int_{E_i}^{E_u} h(E, x) f(x) dE = \int_{E_i}^{E_u} h(E, x) dE / \left( 1 + g^{-1} \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) \right), \quad (1.8)$$

$$n_f(x) = N_{C(V)} \exp(-E_F / kT), \quad (1.9)$$

де  $j$  – густина струму, що проходить через зразок;  $j_{diff}$ ,  $j_{drift}$  – дифузійний та дрейфовий струми;  $\mu$  – рухливість носіїв заряду;  $E_e(x)$  – напруженість електричного поля уздовж зразка;  $\epsilon_0$ ,  $\epsilon$  – абсолютна діелектрична стала та відносна діелектрична проникливість матеріалу;  $e$  – заряд електрона;  $n_{f0}$  – рівноважна концент-



рація вільних носіїв у зразку;  $n_f = n_f(x)$  – фактична концентрація вільних носіїв, що змінюється за товщиною зразка  $L$ ;  $n_{t_{j_0}}$ ,  $n_{t_j}$  – рівноважна та фактична концентрація носіїв, захоплених на пастки  $j$ -ю групою рівнів;  $N_{C(V)}$  – ефективна концентрація вільних станів у зоні провідності (валентній зоні);  $f(E)$  – функція Фермі–Дірака;  $E$ ,  $E_F$  – поточна енергія та енергія Фермі;  $h(E, x) = \frac{dN_t}{dE}$  – функція, що описує просторовий та енергетичний розподіл пасток у зразку в інтервалі енергій ( $E_l$ ,  $E_u$ );  $N_{C(V)} = \frac{2(2\pi m_{n(p)}^* kT)^{3/2}}{h^3}$ ;  $m_n^*$ ,  $m_p^*$  – ефективні маси електронів і дірок;  $h$  – стала Планка;  $g$  – фактор спінового виродження електронних пасток, що, як правило, приймається рівним одиниці.

Вираз  $\rho = e[(n_f - n_{f_0}) + \sum_j (n_{t_j} - n_{t_{j_0}})]$  описує величину густини об'ємного заряду, яка відповідає за обмеження наскрізного струму через зразок. При розв'язку системи рівнянь дифузійним струмом у співвідношенні (1.6), як правило, нехтують.

Система рівнянь (1.6)–(1.9) звичайно розв'язується при граничній умові  $E_e(0) = 0$ . Розв'язання даної системи для основних фізично вагомих випадків проведено в роботах [1-3].

Систему рівнянь (1.6)–(1.9) також можна звести до інтегральних співвідношень, як це зроблено в [23]:

$$\frac{1}{j} = \frac{1}{e\mu_n L} \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e} \int_{n_{fc}}^{n_{fl}} \frac{dn_f}{n_f^2 [(n_f - n_{f_0}) + \sum_j (n_{t_j} - n_{t_{j_0}})]} \equiv y, \quad (1.10)$$

$$\frac{U}{j^2} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{e(e\mu_n)^2} \int_{n_{fc}}^{n_{fl}} \frac{dn_f}{n_f^3 [(n_f - n_{f_0}) + \sum_j (n_{t_j} - n_{t_{j_0}})]} \equiv z, \quad (1.11)$$

де  $n_{fc}$ ,  $n_{il}$  – концентрація вільних носіїв заряду на катоді та аноді відповідно.

Рівняння (1.10) і (1.11) визначають ВАХ СОПЗ у параметричному вигляді для довільного розподілу пасток у ЗЗ матеріалу поблизу анода. Це пов'язано з тим, що внаслідок інжекції носіїв з катоду розподіл носіїв у матеріалі стає неоднорідним. Концентрація носіїв  $a$ , відповідно, провідність напівпровідника буде найбільшою поблизу катода, в той час як біля анода вона буде найменшою. У подальшому індекс  $a$ , який свідчить про те що фізичні величини визначаються на аноді будемо опускати.

### 1.3.1 Залежність струм–напруга у випадку присутності у напівпровіднику моноенергетичних пасток

Розв'язання системи рівнянь (1.6)–(1.9) для випадку твердого тіла без пасток вперше проведено в [1].

Отримаємо ВАХ СОПЗ для простого випадку інжекції носіїв одного знаку, наприклад, електронів, при відсутності пасток і власних носіїв заряду в напівпровідниковому матеріалі. При нехтуванні дифузійним струмом перенесення інжекттованих носіїв здійснюється електричним полем.

$$j = e\mu_n n_f(x) E_e(x). \quad (1.12)$$

Напруженість електричного поля визначається рівнянням Пуассона. Для даного випадку воно має вигляд:

$$\frac{dE_e}{dx} = \frac{en_f(x)}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (1.13)$$

Підставивши вираз  $en(x)$  з першого рівняння у друге і проінтегрувавши його при граничній умові  $x = 0$ ,  $E_e = 0$ , отримаємо:

$$E_e(x) = \left( \frac{2j}{\varepsilon\varepsilon_0\mu_n} \right)^{1/2} \cdot x^{1/2}. \quad (1.14)$$

Повне падіння напруги на напівпровіднику буде дорівнювати:

$$U = \int_0^L E_e(x) dx = \left( \frac{8j}{9\varepsilon\varepsilon_0\mu_n} \right)^{1/2} \cdot L^{3/2}. \quad (1.15)$$

Тоді залежність густини струму від напруги буде мати вигляд:

$$j = \frac{9}{8} \varepsilon\varepsilon_0\mu_n \frac{U^2}{L^3}. \quad (1.16)$$

В результаті одержано добре відоме рівняння Мотта і Герні [24], що описує ВАХ СОПЗ у ідеальному напівпровіднику. Фактично рівняння (1.16) характеризує максимальний струм монополярної інжекції можливий в напівпровіднику при заданій відстані між катодом і анодом  $L$  та відомій рухливості носіїв заряду  $\mu_n$ .

При виведені рівняння ми знехтували впливом термічно генерованих у напівпровіднику носіїв. У присутності таких носіїв, при малих значеннях прикладеної напруги ВАХ може описуватися законом Ома, якщо густина термічно генерованих вільних носіїв  $n_{f0}$  перевищує концентрацію інжектованих.

$$en_{f0}\mu_n \frac{U}{L} \gg \frac{9}{8} \varepsilon\varepsilon_0\mu_n \frac{U^2}{L^3}. \quad (1.17)$$

Початок відхилення від закону Ома та виникнення провідності, обумовленою СОПЗ, буде спостерігатися тоді коли ця нерівність перетвориться у тотожність. Звідси можна знайти напругу, що відповідає цій умові:

$$U_{\Omega} = \frac{8}{9} \frac{en_f L^2}{\varepsilon \varepsilon_0}. \quad (1.18)$$

Аналогічні розрахунки для напівпровідників з пастками, що описуються  $\delta$ -функцією, у параметричному вигляді з використанням безрозмірних змінних наведені у [25]. Однак, одержані рівняння досить громіздкі, що обмежує їх практичне використання та ускладнює аналіз. Тому, як правило, для розрахунку ВАХ використовують *наближення мілких та глибоких пасток* або *метод регіональних наближень* [1]. Для випадку мілких пасток ( $E_t < E_F$ ) ВАХ СОПЗ може бути отримана наступним чином.

З рівнянь (1.7) та (1.8) враховуючи, що  $h(E) = N_t \delta(E - E_t)$  знайдемо  $n_t(x)$

$$n_t(x) = \int_{E_t}^{E_g} \frac{N_t \delta(E - E_t) dE}{1 + g^{-1} \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)} \approx \frac{N_t}{1 + N_t \theta / n_f(x)} \quad (1.19)$$

Тут

$$\theta = \frac{n_f}{g(n_f + n_t)} = \frac{N_c}{gN_t} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right).$$

Підставлення виразу (1.19) у (1.7) дає

$$\frac{dE_e(x)}{dx} = \frac{e}{\varepsilon\varepsilon_0} \left( n_f(x) + \frac{N_t}{1 + N_t\theta/n_f(x)} \right). \quad (1.20)$$

Аналітично розв'язати це рівняння в залежності від прикладеної напруги неможливо, хоча можливий числовий розв'язок спільно з співвідношеннями (1.6) для окремих реальних випадків. Якщо пастки мілкі, то  $N_t\theta > n_f(x)$ . Множачи обидві частини співвідношення (1.20) на  $2E_e(x)$  і підставляючи вираз (1.6) отримуємо:

$$2E_e(x) \frac{dE_e(x)}{dx} = \frac{d(E_e(x))^2}{dx} = \frac{2j\theta}{\varepsilon\varepsilon_0\mu_n\theta}. \quad (1.21)$$

Інтегрування цього рівняння з використанням граничної умови  $U = \int_0^L E_e(x) dx$  дає

$$j = \frac{9}{8} \varepsilon\varepsilon_0\mu_n \frac{\theta}{\theta+1} \frac{U^2}{L^3} \sim \frac{9}{8} \theta \varepsilon\varepsilon_0\mu_n \frac{U^2}{L^3}, \quad (1.22)$$

де функція  $\frac{\theta}{\theta+1} = \frac{n_f}{n_f + n_t} \ll 1$  – являє собою відношення концентрації вільних носіїв ( $n_f$ ) на аноді до загальної концентрації (вільних та захоплених) носіїв ( $n_s$ ).

Отже, для мілких пасток концентрації  $n_f$  і  $n_s$  пропорційні одна одній, при цьому коефіцієнт пропорційності  $\theta$  залежить від глибини залягання пасток. Це і зрозуміло, тому що чим глибше лежать пастки, тим менша частина електронів залишається в зоні провідності оскільки збільшується енергія викиду електронів з пасток.

Отримані ВАХ СОПЗ (співвідношення (1.16), (1.22)) легко лінійізуються при представленні їх в подвійному логарифмічному масштабі, а ступінь ВАХ в цих координатах легко знайти визначивши першу похідну  $\eta = \frac{d \ln j}{d \ln U}$ .

Рівняння (1.22) відрізняється від рівняння (1.16) тільки чисельним множником  $\theta$ , і оскільки  $\theta \ll 1$ , то і струм через зразок при наявності мілких пасток буде значно меншим, ніж в діелектрику без пасток. Присутність електронних пасток у матеріалі таким чином призводить до сильного зменшення густини інжекційного струму, оскільки ці пастки, будучи спочатку порожніми, захоплюють переважну частину інжекттованих електронів, не допускаючи їх переміщення електричним полем. Електрони, захоплені на пастки, створюють об'ємний заряд, але не беруть участі в перенесенні струму через напівпровідник чи діелектрик. При цьому квадратична залежність струму від напруги і кубічна залежність від товщини зберігається. Але так буде відбуватися тільки у випадку, якщо інжекттованих електронів не вистачає для помітного заповнення пасток.

Перехід від омічної провідності зразка до провідності пов'язаної зі СОПЗ визначається умовою (1.17). Звідси перехід на напруга дорівнює

$$U_{\Omega} = \frac{8 en_{f0}(\theta + 1)L^2}{9 \theta \epsilon \epsilon_0}. \quad (1.23)$$

Ця напруга збільшується при збільшенні концентрації термічно генерованих носіїв  $n_{f0}$  та пасток  $N_t$ .

При підвищенні напруги концентрація інжекттованих вільних носіїв збільшується, що приводить до зміщення квазірівня Фермі. У результаті пастки можуть стати глибокими ( $E_F > E_t$ ). Після

цього їх переважна частина заповнюються носіями. При граничному значенні напруги ( $U_{TFL}$ ) густина струму через зразок буде швидко збільшуватись від малої величини, яка відповідає області вільних пасток, до значення безпасткового СОПЗ

$$U_{TFL} = \int_0^L E_{TFL} dx = \frac{eN_t L^2}{2\epsilon\epsilon_0}. \quad (1.24)$$

Це рівняння є базовим для визначення концентрації пасткових рівнів в матеріалі і широко застосовується до теперішнього часу [18-20, 26-34].

Для випадка, коли  $\theta$  не дуже мале, так що  $N_t/n_{fo} > \frac{16}{9} \left( \frac{\theta+1}{\theta} \right)$ ,

отримаємо  $U_{TFL} > U_{\Omega}$ .

Якщо стрибку струму на ВАХ безпосередньо передуює квадратична ділянка, то струм на ньому визначається виразом (1.22). Розрахувавши безпастковий струм, для відомих геометричних розмірів досліджуваного зразка легко знайти параметр Ламперта  $\theta$ . Відзначимо також, що даний параметр може бути визначений за напругою переходу від омичної ділянки струму до квадратичної (співвідношення (1.23)).

Якщо відомі значення концентрації пасток  $N_t$  і параметр  $\theta$ , глибина залягання пасток  $E_t$  розраховується з використанням співвідношення [1, 17].

$$E_t = kT \ln \frac{N_c}{\theta g N_t}. \quad (1.25)$$

Звернемо увагу на те, що для розрахунку параметрів пасток необхідно знати фізичні сталі матеріалу ( $\mu_b$ ,  $N_c$ ) та фактор спінового виродження ЛС ( $g$ ). У більшості робіт приймається, що  $g =$

1, хоча, як показано в [9], у залежності від виду центра і його заповнення носіями  $g$  може приймати значення  $1/2$ , 1 та 2.

Більш надійним методом визначення  $E_t$  є вимірювання параметра  $\theta$  на пастковій квадратичній ділянці як функції температури [17]. При цьому результуючий графік залежності  $\ln j - 1/T$  на квадратичній ділянці ВАХ СОПЗ являє собою пряму з тангенсом кута нахилу  $E_t/k$ , а відрізок, що вона відтинає на осі ординат  $1/T$ , дорівнює  $\ln N_C/gN_t$ . Зазначений метод визначення  $E_t$  вимагає знання температурної залежності  $\mu_n$ , однак похибка у визначенні рухливості відбивається на величині  $E_t$  тільки логарифмічно. Методика визначення параметрів напівпровідника з ВАХ СОПЗ у випадку монорівнів докладно викладена в [35].

Якщо моноенергетичні пастки, що містяться в напівпровіднику є глибокими ( $E_t > E_{F0}$ ) вираз для напруги повного заповнення пасток має вигляд

$$U_{TFL} = \frac{e(N_t - n_{t0})L^2}{2\epsilon\epsilon_0}. \quad (1.26)$$

У цьому випадку усі носії, що інжектуються з контакту, спочатку заповнюють пастки. Саме тому напругу  $U_{TFL}$  можна розглядати як таку, що необхідна для початку переходу від омичної провідності до СОПЗ, тобто як  $U_\Omega$ . Однак для випадку глибоких пасток цей перехід являє собою перехід від омичної провідності до безпасткових СОПЗ, оскільки всі ЛС вже заповнені ( $U_{TFL} = U_\Omega$ ).

ВАХ СОПЗ у подвійних логарифмічних координатах у присутності у напівізоляторі як мілких так і глибоких моноенергетичних пасток наведені на рис. 1.4.

Якщо у матеріалі існують пастки двох або більше типів, що дають кілька дискретних енергетичних рівнів то рівняння (1.22)



залишається справедливим, якщо  $\theta$  замінити на  $\theta^{-1} = \sum_i \theta_i^{-1}$  де

$$\theta^{-1} = \frac{N_c}{g_i N_{ii}} \exp(-E_{ii}/kT). \text{ Тут всі величини з індексом відносяться}$$

до  $i$ -го дискретного монорівня.

Слід зазначити, що задача розрахунку ВАХ СОПЗ навіть у випадку моноенергетичного рівня різко ускладнюється при

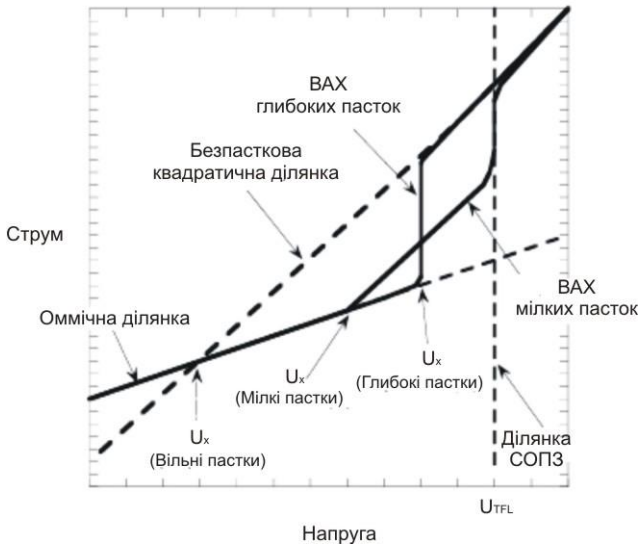


Рис.1.4. ВАХ СОПЗ у подвійних логарифмічних координатах при присутності у напівізоляторі моноенергетичних пасток

спробі врахувати дифузійні струми [1], залежність рухливості носіїв заряду від напруженості поля [36], неоднорідність провідності за товщиною зразка [17] або присутності у зразках наряду з пастками донорних або акцепторних центрів [37].







### 1.3.2 Особливості ВАХ у випадку неперервних розподілів пасток

Експериментальні дослідження показують, що дискретні пасткові рівні являються характерними для чистих монокристалічних матеріалів. В матеріалах з високим ступенем структурної непорядкованості, для яких характерна полікристалічна або аморфна структура, можна очікувати наявність у ЗЗ матеріалу ЛС, які розподілені за енергіями неперервно [17]. У роботах [38, 39] показано, що такий квазінеперервний розподіл пасток за енергіями можна пов'язати з статистичною дисперсією поляризаційної енергії носіїв заряду, яка зумовлена флуктуаційними нерегулярностями кристалічної ґратки матеріалу. Він може бути описана гауссівською функцією з різною півшириною.

З іншого боку структурна непорядкованість ґратки матеріалу приводить до того, що необхідно враховувати велику кількість різних груп ЛС. У результаті набір близько розташованих нормальних розподілів може сприйматися як більш складний розподіл пасткових рівнів, розмазаних за енергіями. Це звичайно враховують, прийнявши, що їхній спектр описується однорідним [40-43], експоненціальним [44, 45] чи гауссівським [46-49] розподілами. При цьому будь-який неперервний енергетичний розподіл пасток може фіксуватися експериментально, наприклад, як ряд однорідно чи експоненціальних розподілених за енергіями рівнів, якщо характерна енергія розподілу багаторазово перевищує термічну енергію ґратки ( $\Delta E > kT$ ), чи навпаки, як сукупність деяких гауссівських розподілів – при зворотному співвідношенні енергій ( $\Delta E < kT$ ) [24]. У той же час, незалежно від характеру розподілу ЛС за енергіями, стаючи глибокими ці стани сприймаються на залежності струм – напруга як рівні граничного заповнення пасток [1, 17].

Добре відомо, що у випадку розподілів пасток, відмінних від моноенергетичного, точний аналітичний вираз для опису ВАХ СОПЗ одержати неможливо, а метод регіональних наближень [1], який традиційно використовують для розрахунку теоретичних кривих, дає похибки, які сягають 70%. У зв'язку з цим для розрахунку залежностей струм – напруга використовуються асимптотичні рівняння, отримані в припущенні заповнення мілких чи глибоких пасток [17, 26, 41-53]. Відповідні аналітичні вирази для ВАХ СОПЗ наведені в табл. 1.1.

Таблиця 1.1. Вирази, що описують ВАХ СОПЗ у випадку відсутності або присутності пасток у напівпровіднику

Вид розподілу	Положення рівня Фермі	Вираз, що описує розподіл пасток $h(E)$ за енергіями	Ступінь ВАХ ( $\eta$ ) у білогарифмічному масштабі	Коефіцієнт прилипання носіїв $\Theta$	Співвідношення, що описують ВАХ $j(U)$
Монорівень (мілкі пастки)		$N_t \delta(E - E_t)$	2	$\frac{N_v}{N_t} \exp\left(-\frac{E_t}{E_t}\right)$	$\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \Theta U^2 / L^3$
Монорівень (глибокі пастки)		— “ —	$\rightarrow \infty$	$\rightarrow \frac{1}{N_t}$	$\rightarrow U_{\text{пл}}$
Експоненціальний розподіл		$\frac{N_t}{kT_c} \exp\left(\frac{E - E_c}{kT_c}\right)$	$1 + \frac{T_c}{T}$	$\frac{N_v}{N_t^{\eta-1}}$	$\frac{(\varepsilon \varepsilon_0)^{\eta-1} \mu_0}{e^{\eta-2}} \Theta \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta-1}{\eta}\right)^{\eta-1} \frac{U^\eta}{L^{2\eta-1}}$
Подвійний експоненціальний розподіл		$\frac{N_t}{kT_c} \exp\left(\frac{E - E_t}{kT_c}\right) \cdot \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_t}{kT_c}\right)\right]^{-2}$	$1 + \frac{T_c}{T}$	$\frac{N_v}{N_t^{\eta-1}} \exp\left(-\frac{E_t}{kT(\eta-1)}\right)$	$\frac{(\varepsilon \varepsilon_0)^{\eta-1} \mu_0}{e^{\eta-2}} \Theta \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta-1}{\eta}\right)^{\eta-1} \frac{U^\eta}{L^{2\eta-1}}$
Гауссовський розподіл (мілкі пастки)		$\frac{N_t}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(E - E_t)^2}{2\sigma^2}\right)$	2	$\frac{N_v}{N_t} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) \exp\left(\frac{\sigma}{2k^2T^2}\right)$	$\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \Theta U^2 / L^3$
Гауссовський розподіл (глибокі пастки)		— “ —	$1 + \left(\frac{2\pi\sigma^2}{16k^2T^2} + 1\right)^{1/2}$	$\frac{N_v}{N_t^{\eta-1}} \exp\left(-\frac{E_t}{kT(\eta-1)}\right)$	$\frac{(\varepsilon \varepsilon_0)^{\eta-1} \mu_0}{e^{\eta-2}} \Theta \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta-1}{\eta}\right)^{\eta-1} \frac{U^\eta}{L^{2\eta-1}}$

У випадку експоненціального розподілу ЛС (див. табл. 1.1), що починається від краю зони провідності (чи валентної зони) або від деякого дискретного рівня  $E_{tc}$ , ВАХ при  $E_F > E_{tc}$  записується у вигляді [45]

$$j = e^{l-1} \mu_n N_c \left( \frac{2l+1}{l+1} \right)^{l+1} \left( \frac{l}{l+1} \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{N'_t} \right)^l \frac{U^{l+1}}{L^{2l+1}}, \quad (1.27)$$

де  $T_c$  – параметр розподілу;  $l = T_c/T$ ;  $N'_t$  – концентрація пасток, яка відповідає максимуму розподілу.

При аналізі експериментальних результатів у даному випадку з температурної залежності струмів на суперлінійній ділянці ВАХ визначають концентрацію пасток  $N'_t$ , а з нахилу ВАХ у подвійному логарифмічному масштабі ( $\eta$ ), значення  $l$ . Якщо відомо  $l$ , то  $T_c$  знаходять із співвідношення  $l = \frac{T_c}{T} = \eta - 1$ . Це дозволяє визначити основні параметри експоненціального розподілу, що починається від краю зони провідності (чи валентної зони). Якщо розподіл починається від деякого рівня  $E_{tc}$ , то будують графік залежності  $\ln N'_t$  від  $1/kT_c$ . Потім з нахилу отриманої прямої визначають  $E_{tc}$ , а екстраполюючи пряму до  $1/kT_c = 0$  – знаходять значення  $N'_t$  [45]. У випадку гауссівського розподілу пасток (див. табл. 1.1) рівняння, що описує ВАХ [46-49], аналогічні співвідношенню, отриманому для випадку пасток з експоненціальним розподілом у середині 33 матеріалу, за винятком того, що  $l$  замінено на вираз  $m = (1 + 2\pi\sigma_t^2 / 16k^2T^2)^{1/2}$ . ВАХ СОПЗ для пасток з однорідним розподілом рівнів у вузькій зоні енергій між  $E_l$  і  $E_u$ , розташованій усередині 33 напівпровідника, була отримана в [40-43]. Співвідношення, що описують ВАХ СОПЗ у випадку присутності в матеріалі пасток що мають різний розподіл за енергією

Таблиця 1.2. Вирази для розрахунку  $U_{\Omega}$  і  $U_{TFL}$  для різних типів розподілу пасток за енергіями у напівпровіднику

Тип розподілу	$U_{\Omega}$	$U_{TFL}$
Відсутність пасток	$\frac{8 en_{f0}L^2}{9 \varepsilon\varepsilon_0}$	—
Пастки з одним дискретним енергетичним рівнем	$\frac{8 en_{f0}(\theta+1)L^2}{9 \varepsilon\varepsilon_0\theta}$	$\frac{eN_tL^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$ (мілкі); $\frac{e(N_t - n_{f0})L^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$ (глибокі)
Пастки з експоненціальним розподілом за енергією	$\frac{eL^2N_t' \left( \frac{n_{f0}}{N_v} \right) \left( \frac{l+1}{l} \right) \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{(l+1)/l}}{\varepsilon\varepsilon_0}$	$\frac{eL^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{9 N_t^l}{8 N_v} \left( \frac{l+1}{l} \right) \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{l+1} \right]^{1/(l-1)}$
Пастки з гауссівським розподілом за енергією	$\frac{eL^2N_t' \left( \frac{n_{f0}}{N_v} \right)^{1/\eta} \left( \frac{\eta+1}{\eta} \right) \left( \frac{\eta+1}{2\eta+1} \right)^{(\eta+1)/\eta}}{\varepsilon\varepsilon_0}$	$\frac{eL^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \left[ \frac{9 N_t^\eta}{8 N_v} \left( \frac{\eta+1}{\eta} \right) \left( \frac{\eta+1}{2\eta+1} \right)^{\eta+1} \right]^{1/(\eta-1)}$
Пастки з однорідним розподілом за енергією	$\frac{eN_t kTL^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$	$\frac{eN_t (E_u - E_t)L^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$

наведені у таблиці 1.1. Вирази для визначення напруги  $U_{\Omega}$  і  $U_{TFL}$  для експоненціального, гауссівського та однорідного розподілів ЛС наведені в табл. 1.2.

### **1.3.3 Обмеження моделей слабого та сильного заповнення пасток носіями**

У бездифузійній теорії СОПЗ звичайно застосовують наближення необмеженої прикатодної концентрації носіїв (віртуального катода), при цьому задача про вигляд ВАХ розв'язується лише в граничних випадках мілких і глибоких пасток [1, 17]. Разом з тим, концентрація інжекттованих носіїв, а, отже, і ступінь заповнення пасток у реальному матеріалі істотно змінюється на міжелектродній відстані, так, що біля катода заповнення може мати характер, який суттєво відрізняється від об'ємного.

Правомірність наближення слабого і сильного заповнення для напівпровідника із неідеальним інжектуючим контактом розглянута в роботі [24, 53-60]. Авторами розраховані відхилення максимального ступеня ВАХ від значень, що передбачаються аналітичною теорією, і встановлений діапазон значень відношень  $n_{f0}/n_{fk}$  (де  $n_{fk}$  - приконтактна концентрація носіїв), при яких можливо застосування моделей слабого і сильного заповнення пасток. Показано, що у випадку їх слабого заповнення максимум кривої  $\eta(U)$  виявляється плавним, а нахил ВАХ СОПЗ у подвійних логарифмічних координатах близький до квадратичного ( $\eta \sim 2$ ) лише у випадку, якщо інжекція з контакту досить інтенсивна. При виконанні критерію сильного заповнення пасток максимум кривої  $\eta(U)$  стає різким, так що відрізок, де  $\eta = \eta_{max}$ , стягується в точку (при  $U = U_{TFL}$ ). У цьому випадку вигляд ВАХ істотно залежить від інжекційних властивостей контакту, а її ступінь завжди більше двох.

Надалі в [24] було показано, що піддіапазонні апроксимації Мотта–Генрі і Пекара, а також цілий ряд інших ступеневих апроксимацій ВАХ, які широко використовуються в теорії інжекційних-контактних явищ, придатні лише у вузькому діапазоні значень  $j$  і  $U$ . У роботах [54, 55] безпосереднім розрахунком ступеня ВАХ продемонстровано, що ступенева апроксимація виду  $\rho \approx an^m$ ,  $m = \text{const} > -1$ , яка звичайно використовується при розрахунках залежностей струм – напруга, має точковий характер. Відповідно на експериментальних кривих  $j - U$  спостерігаються як довгі ділянки  $\eta(U) \sim \text{const}$ , що представляють собою плоскі екстремуми ступеня ВАХ, так і порівняно вузькі піки ступеня, останні звичайно відповідають чистим напівпровідникам.

З урахуванням точкового характеру будь-якого екстремуму ступеня залежностей струм-напруга, авторами [24] запропонована апроксимація, яка ґрунтується на параболічній інтерполяції ходу ступеня ВАХ поблизу екстремуму, що описується виразом

$$\eta(U) \cong \eta_{ext} + 1/2\eta''_{ext} (U - U_{ext})^2, \quad (1.28)$$

$$\text{де } \eta''_{ext} = \left( \frac{d^2\eta}{dU^2} \right)_{U=U_{ext}}.$$

У цьому випадку ВАХ СОПЗ може бути наведена у вигляді

$$j(U) = j_{ext} \left( \frac{U}{U_{ext}} \right)^{\eta_{ext} + 0.5\eta''_{ext}U_{ext}^2} \exp \left[ \frac{1}{4} \eta''_{ext} (U - U_{ext})(U - 3U_{ext}) \right]. \quad (1.29)$$

Точкова апроксимація дозволяє одержати ВАХ, що збігаються з залежностями струм-напруга, отриманими в припущенні ступеневої апроксимації в діапазоні  $(U - U_{ext})^2 \ll \eta \frac{\eta_{ext}}{|\eta''_{ext}|}$ .



Автори [24] також оцінили фізичні умови виникнення максимумів ( $\eta''_{ext} < 0$ ) і мінімумів ( $\eta''_{ext} > 0$ ) ступеня ВАХ у випадку використання ряду моделей розподілу пасток за енергіями. При цьому використовувалися співвідношення отримані в [51]. Оскільки вирази (1.10) і (1.11) є безмодельними і можуть бути застосовані для будь-якого об'ємного механізму зарядоперенесення через зразок, авторам [24], на основі відповідної обробки статичних ВАХ, вдалося розробити цілий комплекс нових вимірювальних методик визначення фізичних параметрів інжекційних структур. При цьому, знаючи чисельні значення основних інжекційних параметрів структури, можна ідентифікувати інжекційні процеси серед подібних по прояву на ВАХ, конкретизувати характер інжекції (монополярна чи подвійна), а також скласти деякі кількісні уявлення про інтегральну потужність спектра ЛС (чи його узагальнені рекомбінаційні властивості).

У випадку високоінжекційної вимірювальної методики, вирази, отримані в [24], дають лише загальне уявлення про потужність (зарядову чи рекомбінаційну) ЛС, що обмежують струм, а також характер їх заповнення носіями. Для деталізації спектра цих станів у [57] використані деякі модельні уявлення і розрахункові дані.

На основі проведеного аналізу авторами [24] запропонована методика, що дозволяє ідентифікувати вузькі і широкі енергетичні розподіли в 33 напівпровідника, а також визначати параметри ЛС в обох випадках. Ефективність розробленого способу визначення параметрів таких станів з ВАХ (модель Зюганова) продемонстрована експериментально в [24] шляхом одночасного проведення досліджень з використанням трьох різних методів визначення параметрів пасткових центрів: високоінжекційного, низькоінжекційного і термостимульованої провідності.

Слід зазначити, що в роботах [24, 53-60] фактично вперше зроблена спроба розв'язати зворотну задачу досліджень, тобто на безмодельній основі одержати інформацію про пасткові розподіли безпосередньо з експериментальних ВАХ СОПЗ. Однак, використання для деталізації спектра станів додаткових модельних уявлень, хоча і найбільш загальних, дозволило вирішити цю задачу тільки частково.

### **1.3.4 Нові підходи до визначення параметрів глибоких пасток з ВАХ СОПЗ**

Оскільки форма і величина струму ВАХ залежать від концентрації та енергетичного положення ЛС, можна одержати інформацію про їх параметри з експериментально вимірних залежностей струму від напруги. У більшості робіт де використовувалася подібна методика [18-20, 26-34, 61-64] параметри пасток знаходились із порівняння експериментальних кривих з доступними аналітичними рівняннями, отриманими для типових розподілів. При цьому використовувався так названий метод "підгонки", тобто у припущенні, що пастки підкоряються одному з типових розподілів за енергією, підбиралися параметри ЛС таким чином, щоб теоретична крива якомога точніше збігалася з експериментальною.

З використанням цього методу у роботах [30-34] в ряді матеріалів розраховані параметри ЛС, в припущенні присутності у ЗЗ моноенергетичних пасток (модель Ламперта). В той час як у роботах [1, 35, 61-64] розраховані параметри експоненціальних розподілів пасток (модель Роуза).

Спосіб обробки експериментальних кривих, застосований у роботах [1, 30-34, 61-64], є типовим прямим методом досліджень і має суттєві недоліки, пов'язані з інтегральним характером співвідношень, які використовувались при розрахунках. Крім

того ця методика потребує незалежного визначення ряду параметрів напівпровідника, таких як рухливість носіїв заряду, ефективна концентрація носіїв у зоні провідності та ін.

Додатковим фактором, який ускладнює одержання достовірної інформації про енергетичний спектр пасткових рівнів методом ВАХ, є присутність цілого ряду конкуруючих і супутніх СОПЗ механізмів зарядоперенесення, що приводять до якісно подібних залежностей струму через структуру від прикладеної напруги: показникові за напругою ділянки, які розділені стрибками струму [60]. Незважаючи на це, ідентифікація механізмів зарядоперенесення в зразках, що досліджуються, як правило, не проводиться, а стрибки струму на ВАХ апріорно пов'язуються з механізмом СОПЗ [18-20, 26-29].

Останнім часом у ряді робіт розроблені підходи, які дозволяють, принаймні частково, уникнути недоліків традиційного методу ВАХ СОПЗ, відзначених вище. У теоретичній роботі [51] були отримані рівняння, які пов'язують величини, що можуть бути виміряні експериментально ( $U, j$ ), та ті, що визначають зарядоперенесення у зразку у присутності пасток ( $n_b, \rho$ )

$$z' = \frac{dz}{dy} = \frac{d(U/j^2)}{d(1/j)} = \frac{L}{e\mu n_{fL}}, \quad (1.30)$$

$$z'' = \frac{d^2z}{dy^2} = \frac{d}{d(1/j)} \frac{d(U/j^2)}{d(1/j)} = \frac{|(n_f - n_0) + \sum_j (n_{i_j} - n_{i_{j0}})| eL^2}{\epsilon\epsilon_0}. \quad (1.31)$$

На основі цих рівнянь автори [65-72] розвивають метод ІС глибоких пасток, який дозволяє одержувати інформацію про параметри ІС безпосередньо з експериментальних ВАХ СОПЗ шляхом їх диференціальної обробки (зворотна задача експери-

менту). Але цей метод залишається маловідомим і майже не використовується на практиці, очевидно, у зв'язку з тим, що потребує досить складної обробки даних. У небагатьох експериментальних роботах [65, 71], де застосовувався цей метод, як правило, використовували його низькотемпературне наближення та спрощені диференціальні співвідношення, які містять тільки першу похідну, що дає суттєві похибки при розрахунках параметрів пасток. У роботах [72-74] представлено самоузгоджений метод аналізу ВАХ СОПЗ, який дозволяє зробити деталізацію енергетичної топології рівнів у 33 напівпровідника без залучення додаткових експериментальних методик. Але метод [72-74] апробований тільки для високомолекулярних сполук (полімерів) з шириною 33  $E_g > 3$  еВ, для яких характерні розмиті за енергією розподіли пасток. Нарешті у роботах [24, 57, 59, 60] запропонований спосіб однозначної ідентифікації механізму зарядоперенесення скрізь зразок, що досліджується, за однією експериментальною ВАХ. Роботи [24, 51, 57, 59, 60, 65-74] дозволяють розробити принципово новий підхід до визначення параметрів глибоких пасток з ВАХ СОПЗ розвинутий нами у цій монографії.

## РОЗДІЛ 2

### ВАХ СОПЗ У ВИПАДКУ СКЛАДНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛС ЗА ЕНЕРГІЄЮ (ПРЯМА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ)

#### 2.1. Аналіз придатності аналітичних виразів для коректних розрахунків ВАХ СОПЗ

Для перевірки коректності результатів, отриманих при розв'язанні зворотної задачі експерименту, яка є математично досить складною, нами вирішувалася пряма задача: за заданими модельними розподілами ЛС у ЗЗ матеріалу розраховувалися теоретичні ВАХ СОПЗ. При цьому використовувалась процедура докладно описана пізніше. При розрахунках вважалося, що зразки, в які здійснюється інжекція носіїв заряду, мають плоскопаралельну форму, крім того задовольняються звичайні фізичні припущення теорії СОПЗ [17]. У якості модельних обрані розподіли пасток, що традиційно використовуються в літературі і відображають ситуації, які спостерігаються у реальних зразках [1, 17]. Нами зокрема розглядалися випадки, коли у ЗЗ матеріалу присутні пастки, розподіл яких за енергією описується за допомогою однієї або декількох дельта-функцій, гауссівських, експоненціальних та інших функцій, а також їх комбінацій. Відповідні вирази, що описують дані розподіли, наведені в таблиці 1.1. Для спрощення розв'язання задачі в першій частині роботи припускалося, що ЛС розподілені за об'ємом матеріалу однорідно, тобто досліджувані зразки є просторово гомогенними  $h \neq h(x)$ .

Для визначеності також вважалося, що напівпровідниковий матеріал має  $p$ -тип провідності (це є характерним для сполук CdTe, ZnTe), відповідно з контакту здійснюється інжекція дірок, а ЛС є дірковими пастками. Відлік енергії залягання пасткових рівнів у цьому випадку проводився від краю валентної зони.

Слід зазначити, що всі приведені у роботі співвідношення можуть бути також використані для розрахунку ВАХ матеріалу  $n$ -типу провідності шляхом простої заміни у виразах  $N_V$  на  $N_C$ , а також зміни початку відліку рівня енергії (від краю зони провідності).

При обчисленнях нами в основному використовувалися параметри напівпровідників, які є характерними для сполук  $A_2B_6$  (зокрема телуриду кадмію). CdTe є гарним модельним матеріалом для дослідження глибоких пасток завдяки здатності до самокомпенсації [75-80]. Це дозволяє легко одержувати плівки напівпровідника з високим питомим опором, у яких реалізується режим СОПЗ. Обрані параметри пасткових центрів є характерними і для таких типових напівпровідників різних груп періодичної системи елементів, як Si, GaAs, ZnTe. Тому одержані результати можуть бути використані для пояснення властивостей великої групи напівізолюючих матеріалів.

Як уже відзначалося раніше, точні аналітичні вирази для ВАХ СОПЗ можна одержати лише у випадку моноенергетичних пасток. Тому він був використаний нами для перевірки можливості застосування інтегральних співвідношень (1.10), (1.11) для точного розрахунку залежностей струм – напруга. З цією метою для різноманітних параметрів пасток нами будувалися ВАХ як із використанням точного параметричного методу [50], так і шляхом чисельного інтегрування співвідношень (1.10) і (1.11).

У випадку присутності в напівпровідниковому матеріалі моноенергетичних пасток густина об'ємного заряду може бути подана у вигляді:

$$\rho(n) = n_f + \frac{n_f N_t}{n_f + n_1}, \quad (2.1)$$

$$\text{де } n_1 = N_V \exp\left(-\frac{\Delta E_1}{kT}\right).$$

Якщо у ЗЗ напівпровідника є декілька монорівнів із глибиною залягання  $\Delta E_{t1}$ ,  $\Delta E_{t2}$ ,  $\Delta E_{t3}$  ... і концентрацією  $N_{t1}$ ,  $N_{t2}$ ,  $N_{t3}$  ... відповідно, то співвідношення (2.1) набуде вигляду:

$$\rho(n) = n_f + \frac{n_f N_{t1}}{n_f + n_1} + \frac{n_f N_{t2}}{n_f + n_2} + \frac{n_f N_{t3}}{n_f + n_3}, \quad (2.2)$$

$$\text{де } n_i = N_V \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right).$$

Підставляючи відповідні вирази у (1.10) і (1.11), легко одержати співвідношення, придатні для розрахунку ВАХ у випадку присутності у ЗЗ матеріалу одного або декількох монорівнів. Параметром при цьому є верхня межа інтегрування (концентрація носіїв на аноді), водночас концентрація носіїв на катоді приймалася рівною нескінченності (випадок необмеженої інжекції з контакту). При чисельному інтегруванні співвідношень (1.10), (1.11) в якості змінної замість  $n_f$  використовувалась енергія квазірівня Фермі у зразку  $E_F$  при заданому рівні інжекції. У цьому випадку параметр інтегрування змінюється в інтервалі  $E_{F0} \leq E_F < E_V$ , де  $E_{F0}$  - рівноважне положення квазірівня Фермі у зразку при відсутності інжекції.

Результати порівняння ВАХ СОПЗ, розрахованих з використанням двох різних методів, наведені на рис. 2.1. З рисунка видно, що у випадку присутності у ЗЗ матеріалу моноенергетичних рівнів залежності струм – напруга, отримані з використанням параметричного методу та інтегральних співвідношень (1.10), (1.11), збігаються. Це дало можливість зробити висновок, що

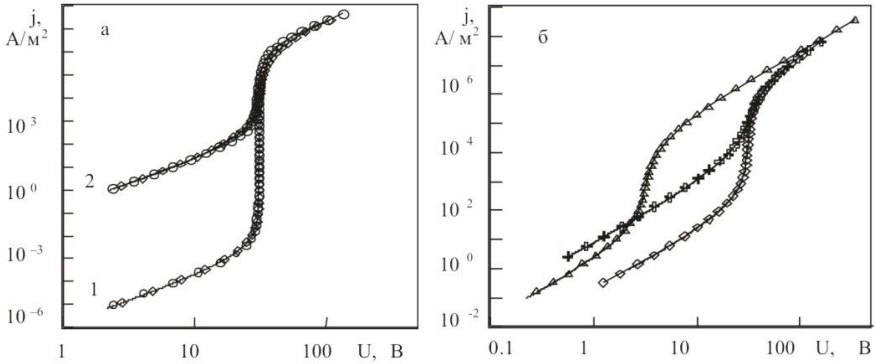


Рис.2.1. ВАХ СОПЗ, розраховані при різних температурах з використанням параметричного методу, інтегральних співвідношень (1.10) (1.11) та співвідношень (3.24), (3.25). Випадок моноенергетичних пасток з параметрами:  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>;  $\Delta$  –  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{19}$  м<sup>-3</sup>; + –  $E_t = -0,47$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup> (співвідношення (1.10) (1.11)); суцільна лінія – параметричний метод; о – запропонована методика (1.30), (1.31). Температура, К: 200 (1), 300 (2) (а); 300 (б).

дані співвідношення можуть також ефективно застосовуватися для точного розрахунку ВАХ у випадку більш складних розподілів пасток, наприклад експоненціального або гауссівського. При розрахунку ВАХ СОПЗ для таких розподілів ЛС густина об'ємного заряду записувалася у вигляді

$$\rho(E_F) = n_f + \int_{E_{F0}}^{E_v} h(E) f(E - E_F) dE, \quad (2.3)$$

де  $h(E)$  – функція, що описує енергетичний розподіл пасток;  $f(E - E_F)$  – функція Фермі-Дірака.

Після цього була застосована процедура обчислень, аналогічна розрахунку проведеному для випадку моноенергетичних ЛС. Криві, отримані за допомогою інтегральних рівнянь (1.10) (1.11),



надалі використовувалися нами в якості еталонних при подальшому співставленні з ВАХ, розрахованими за допомогою інших методів.

Добре відомо, що у випадку розподілів пасток, відмінних від моноенергетичних, неможливо одержати точні аналітичні вирази для ВАХ СОПЗ, а метод регіональних наближень [1], що традиційно використовується для обчислення теоретичних кривих, дає похибки, що досягають 70%. У зв'язку з цим для розрахунку залежностей струм – напруга звичайно використовуються аналітичні рівняння, отримані в припущенні заповнення мілких або глибоких пасток [17, 41-50]. Відповідні аналітичні вирази наведені у таблиці 1.1.

На рис. 2.2 наведені ВАХ СОПЗ для випадку гауссівського розподілу пасток за енергіями, розраховані з використанням інтегральних рівнянь, а також за допомогою наближених аналітичних формул (табл. 1.1). Оскільки аналітичні вирази дозволяють одержати ВАХ тільки у граничних випадках мілких або глибоких пасток, для побудови повної кривої проводилася "зшивка" декількох розрахункових залежностей струм – напруга. З рисунка добре видно, що при низьких температурах вимірювання ( $T = 100$  К) криві, отримані цими двома методами, мають значну відмінність тільки в області найбільшої крутизни ВАХ (на ділянці переходу від граничного заповнення пасток до безпасткового закону), в той же час при кімнатній температурі ( $T = 300$  К) відмінність кривих дуже значна практично на всьому інтервалі зміни прикладеної до зразка напруги. ВАХ, отримані з використанням аналітичних рівнянь, краще збігаються з еталонними у випадку вузьких розподілів пасток, при збільшенні півширини розподілу  $\sigma$  похибки розрахунків зростають. Розглянемо причину такої великої похибки розрахунку ВАХ із використанням наближених аналітичних співвідношень наведених у [73].

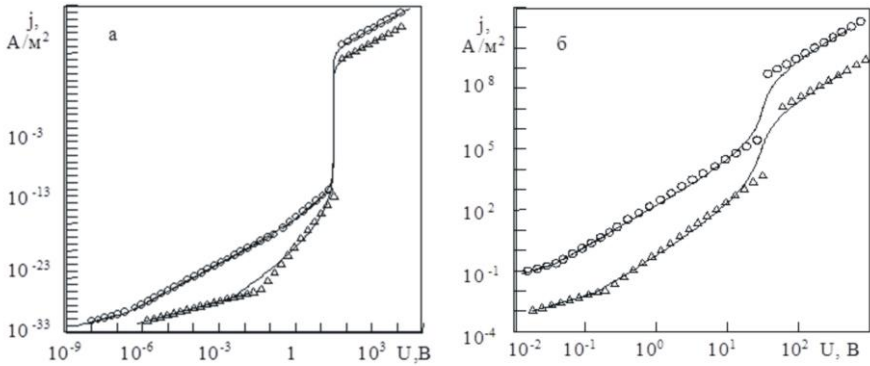


Рис. 2.2. ВАХ СОПЗ розраховані для гауссівського розподілу пасток ( $h(E) = N_t / [\sigma(2\pi)^{1/2}] \exp[-(E - E_t)^2 / 2\sigma^2]$ ) з параметрами  $E_t = -0,50$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  о –  $\sigma = 0,025$  еВ,  $j \cdot 100$  – аналітичне наближення;  $\Delta$  –  $\sigma = 0,05$  еВ – аналітичне наближення; суцільна лінія – інтегральні співвідношення (1.10) (1.11); температура, К: 100 (а), 300 (б).

Як видно із табл. 1.1, параметри  $\eta$  і  $\theta$  у робочих співвідношеннях, які традиційно використовуються для обчислень, вважаються константами, що не залежать від напруги [73]. Водночас залежність  $\eta = f(E)$  від положення квазірівня Фермі має вид східчастої функції:

$$\eta = \begin{cases} \text{const}_1, & E_F < E_{Ft} \\ \text{const}_2, & E_F > E_{Ft} \end{cases},$$

де  $E_{Ft}$  - деяка константа, що залежить від виду функції розподілу пасток  $h(E)$ .

Встановимо, наскільки вірні подібні припущення. Для цього, виходячи з основних визначень, одержимо співвідношення, що зв'язують параметр Ламперта  $\theta$  із напругою і положенням квазірівня Фермі у зразку.

Оскільки  $\theta = \frac{n_f}{n_s} = \frac{n_f}{n_f + n_t}$ , а відповідні концентрації вільних

і захоплених носіїв заряду описуються співвідношеннями

$$n_f = N_v \exp\left(\frac{E_F(x)}{kT}\right), \quad (2.4)$$

$$n_t = \int_{E_U}^{E_L} h(E, x) f(E - E_F(x)) dE, \quad (2.5)$$

можна остаточно записати

$$\theta = \left\{ 1 + \exp\left(-\frac{E_{F_L}}{kT}\right) \int_{E_U}^{E_L} \frac{h(E) dE}{N_v (1 + \exp\left(\frac{E - E_{F_L}}{kT}\right))} \right\}^{-1}. \quad (2.6)$$

Даний параметр є функцією координат  $\theta = \theta(x)$ , проте вигляд ВАХ визначається його значенням на електроді, що колектує носії,  $\theta(L)$ . Характер просторового розподілу напруженості електричного поля, положення квазірівня Фермі та інших змінних величин в зразках при інжекції обговорений в роботі [17].

У звичайному наближенні мілких пасток ( $E_F < E_L$ ), параметр Ламперта  $\theta$  не залежить від положення рівня Фермі  $E_F$  і, відповідно, від напруги, прикладеної до зразка. У цьому випадку співвідношення (2.6) можна записати у вигляді

$$\theta = N_v / \int_{E_L}^{E_U} h(E) \exp\left(\frac{E}{kT}\right) dE < 1, \quad (2.7)$$

де значення  $\theta$  залежить від форми функції розподілу ЛС  $h(E)$ .

Значення  $\theta$  для деяких типових розподілів пасток у випадку мілких пасток розраховані в роботах [1, 17, 40-48] і наведені у табл. 1.1.

Використовуючи рівняння безперервності струму і Пуассона (1.6), (1.7) для випадку мілких пасток, легко також одержати залежності, що зв'язують струм і напругу у структурі з положенням рівня Фермі у зразку

$$j = \frac{9}{8} \mu_n \varepsilon \varepsilon_0 \theta \frac{U^2}{L^3}, \quad (2.8)$$

$$n_f = \frac{3}{4e} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 \theta U}{L^2}, \quad (2.9)$$

$$U = \frac{4eL^2}{3\varepsilon \varepsilon_0 \theta} N_v \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right). \quad (2.10)$$

Рівняння (2.10) показує, що при зміні положення квазірівня Фермі напруга у зразку зростає експоненціально. Вираз (2.9) є базовим рівнянням методу ІС, який розглянутий нижче, (зворотна задача експерименту), оскільки демонструє, що при збільшенні напруги, прикладеної до зразка, відбувається зсув квазірівня Фермі у 33 матеріалу, а це у свою чергу дозволяє здійснювати сканування розподілів пасток.

При достатньо високій зовнішній напрузі, прикладеній до зразка, квазірівень Фермі перетинає розподіл ЛС  $E_L < E_F < E_U$ , спрощення (2.7) більше непридатне для обчислень і параметр  $\theta$  стає залежним від положення квазірівня Фермі  $E_F$ . Оскільки інтеграл у (2.6) можна розрахувати тільки для окремих випадків розподілів ЛС при низьких температурах, універсального загального розв'язку у цьому випадку не існує. У зв'язку з цим, в асимптотичних рівняннях, отриманих у [40-49] дійсні значення  $\theta$

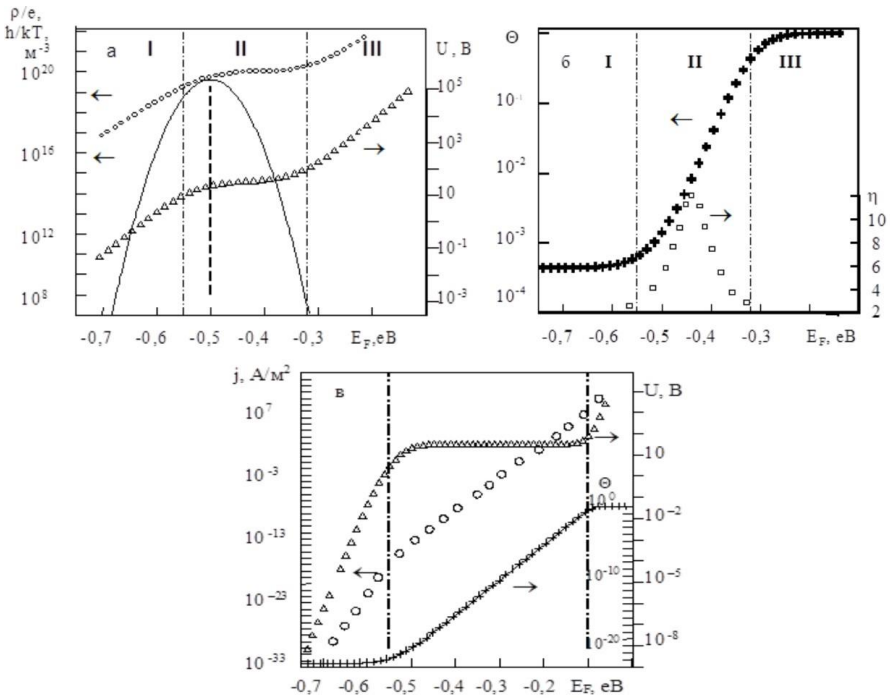


Рис. 2.3. Залежність  $\rho/e$ ,  $U$ ,  $j$ ,  $\theta$ ,  $\eta$  від положення квазірівня Фермі  $E_F$  для гауссівського розподілу пасток з параметрами:  $E_t = -0,5$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $T = 300$  К (а, б);  $T = 150$  К (в). Суцільна лінія – вхідний розподіл  $h(E)$ ; • – густина об'ємного заряду  $\rho(E_F)/e$ ;  $\Delta$  –  $U(E_F)$ , о –  $j(E_F)$ , +-  $\theta(E_F)$ ,  $\square$  –  $\eta(E_F)$ .

і  $\eta$  замінювалися деякими усередненими значеннями  $\theta_{cp}$  і  $\eta_{cp}$  відповідно. Реально, як видно з рис. 2.3, де наведені розрахунки цих величин з використанням співвідношень (1.10) (1.11), параметр  $\theta$  не є константою і його значення при низькій температурі ( $T = 150$  К) у випадку гауссівського розподілу змінюється від  $10^{-23}$  до  $10^{-1}$ , у той час як при кімнатних температурах ( $T = 300$  К) він лежить в інтервалі  $10^{-3} < \theta < 10^{-1}$  (рис 2.3 б).

Параметр  $\eta$ , розрахований із використанням аналітичних виразів (табл. 1.1), на квадратичній ділянці ВАХ для даного виду розподілу пасток дорівнює  $\sim 2,17$ , у той час як більш точні обчислення показують, що його значення змінюється в інтервалі від  $2 \leq \eta \leq 12$ .

Таким чином, результати точних розрахунків параметра  $\eta$  підтверджують висновки авторів [24] про те, що степеневі апроксимації ВАХ СОПЗ виду  $j \sim U^m$ , які широко використовуються на практиці [40-49], дійсні лише в обмеженому діапазоні значень  $j$  та  $U$ . Реальні залежності  $\eta = f(U)$  являють собою криві з максимумом, характер поведінки яких (вузькі піки ступеня ВАХ чи розмиті плоскі екстремуми) визначається видом розподілу ЛС за енергіями у ЗЗ напівпровідника.

При деякій напрузі квазірівень Фермі зміщується достатньо високо у ЗЗ матеріалу, так, що всі ЛС стають розташованими нижче нього (глибокі пастки). З співвідношення (2.6) випливає, що практично всі глибокі центри при цьому заповнені носіями ( $\theta \sim 1$ ) і зразок поводить ся як безпастковий діелектрик. Відповідно рівняння (2.8) – (2.10) на даній ділянці приймають вигляд

$$j = \frac{9}{8} \mu \varepsilon \varepsilon_0 \frac{U^2}{L^3}, \quad (2.11)$$

$$n_f = \frac{3}{4e} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{L^2}, \quad (2.12)$$

$$U = \frac{4eL^2}{3\varepsilon \varepsilon_0} N_v \exp\left(\frac{E_F}{kT}\right). \quad (2.13)$$

Видно, що напруга  $U$  у цьому випадку залежить від  $E_F$  експоненціально, а струм підпорядковується закону Чайлда [1]. Відповідно напруга повного заповнення пасток  $U_{FTL}$  може бути обчислена з використанням співвідношення (1.26).

Результати розрахунків параметрів  $\rho$ ,  $\eta$ ,  $\theta$ ,  $U$  у залежності від положення квазірівня Фермі у матеріалі для випадку гауссівського розподілу пасток наведені на рис. 2.3. Проаналізуємо їх більш детально.

Як видно з рисунка, на залежностях  $\theta$ ,  $j$ ,  $U - E_F$  можна виділити три характерні області. У області 1, де  $E_F < E_t - \sigma^2/kT$  (квазірівень Фермі знаходиться нижче розподілу пасток) напруга залежить від  $E_F$  експоненціально, а параметр  $\theta$  залишається практично незмінним. У цьому випадку величина струму, пропорційна квадрату напруги (див. співвідношення (2.8)), параметр  $\eta \sim 2$ , і аналітичний вираз достатньо добре описує ВАХ СОПЗ.

В області 2 –  $E_t - \sigma^2/kT < E_F < E_U$  (квазірівень Фермі перетинає розподіл пасткових рівнів) параметр  $\theta$  сильно зростає при зміні  $E_F$ , у той час як напруга не залежить від  $E_F$  і дорівнює  $U_{TFL}$ . У результаті вигляд залежності  $j \sim E_F$  визначається, в основному, характером зміни параметра  $\theta$ . Як показали розрахунки, чим нижче температура вимірювань, тим більше кут нахилу прямої  $\ln \theta - E_F$  на даній ділянці. Параметр  $\eta$  тут також істотно змінюється і залежність  $\eta \sim E_F$  являє собою криву з максимумом при  $E_F \sim E_t + \sigma^2/kT$ . Відповідно аналітичні вирази на цьому інтервалі погано описують ВАХ СОПЗ. Вони не дозволяють одержати зміну струму від напруги при  $E_F \sim E_t$  і розрахункові криві мають максимальну похибку поблизу  $U = U_{TFL}$ .

В області 3  $E_F > E_U$  (рівень Фермі знаходиться вище розподілу пасток) практично всі глибокі центри заповнені носіями і зразок поводить себе як безпастковий діелектрик чи напівпровідник ( $\theta \approx 1$ ). Оскільки  $\theta$  є тут константою, похибка розрахунку ВАХ із використанням аналітичних рівнянь на цій ділянці суттєво знижується.

## 2.2. Наближений метод розрахунку залежностей струм – напруга за відомими розподілами носіїв заряду на пастках

Інтегральні рівняння (1.10) (1.11), що використовуються для розрахунку ВАХ СОПЗ, мають деякі обмеження. Як буде показано нижче, в деяких випадках виникає необхідність побудови ВАХ СОПЗ не за відомим розподілом пасток  $h(E)$ , а за розподілом носіїв заряду  $n_s$  на пастках, який при цьому заданий у вигляді таблиці. У цьому випадку співвідношення (1.10) (1.11) для побудови залежностей струм – напруга використані бути не можуть. Аналогічна ситуація виникає також тоді, коли розподіл пасток описаний частково.

Для даних випадків нами використовувався метод наближеного розрахунку ВАХ, заснований на ряді ідей, запропонованих у [79]. Метод базується на співвідношеннях, отриманих уперше Мюллером [82]:

$$j = e\mu_n n_f \alpha \frac{U}{L}, \quad (2.14)$$

$$U = \frac{n_s e L^2}{\alpha \beta \epsilon \epsilon_0}, \quad (2.15)$$

де  $\alpha$  – коефіцієнт, що враховує відмінність напруженості електричного поля поблизу анода від його середнього значення  $E_e(L) = \alpha U/L$  у зазорі між контактами зразка;  $\beta$  – коефіцієнт, що враховує відмінність  $n_s$  поблизу анода від середньої концентрації інжектованих у зразок зарядів  $n_s(L) = \beta n_s$ .

Рівняння (2.14), (2.15) з урахуванням співвідношення (2.4) дозволяють розрахувати ВАХ СОПЗ у параметричному вигляді за змінним параметром  $E_F$ , якщо відомі  $\alpha$  і  $\beta$ .



Визначимо значення цих коефіцієнтів для довільного розподілу ЛС. Із співвідношень (2.14) і (2.15) випливає:

$$\frac{1}{j} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0\beta}{e^2\mu n_f n_s L},$$

звідки

$$\beta = \frac{1}{j} \frac{e^2\mu n_f n_s L}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (2.16)$$

Відповідно для коефіцієнта  $\alpha$  отримаємо:

$$\frac{U^2}{j^2} = \left( \frac{L}{e\mu_n n_f \alpha} \right)^2,$$

$$\frac{U}{j^2} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0\beta}{(e\mu_n n_f)^2 \alpha n_s},$$

звідси знайдемо

$$\frac{\alpha}{\beta} = \frac{U}{j^2} \frac{(e\mu_n n_f)^2 \alpha n_s}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (2.17)$$

Підставляючи значення  $1/j$  і  $U/j^2$  знайдені із (1.10) (1.11), одержимо остаточно такі співвідношення

$$\beta = n_f n_s \int_{\infty}^{n_L} \frac{dn_f}{n_f^2 n_s}, \quad (2.18)$$

$$\frac{\beta}{\alpha} = n_f^2 n_s \int_{\infty}^{n_L} \frac{dn_f}{n_f^3 n_s}. \quad (2.19)$$

Продиференціюємо рівняння (2.18), (2.19) за  $n_f$

$$d\left(\frac{\beta}{n_f n_s}\right) = -\frac{dn_f}{n_s n_f^2},$$

$$d\left(\frac{\beta}{\alpha n_s n_f}\right) = -\frac{dn_f}{n_s n_f^3}.$$

Після диференціювання отримаємо:

$$\frac{1}{\beta} = 1 + y - \frac{kT d \ln \beta}{dE_F}, \quad (2.20)$$

$$\alpha = 1 + \beta \left(1 + \frac{kT \ln \alpha}{dE_F}\right), \quad (2.21)$$

де  $y = \frac{dn_s}{dE_F} \frac{kT}{n_s} = \frac{n'_s}{n_s} kT$ .

Оскільки  $\alpha$  і  $\beta$  змінюються повільно при зміні  $E_F$ , у першому наближенні можна прийняти  $1/\beta = 1 + y$ . Підставивши це значення в співвідношення (2.20) знайдемо  $\beta$

$$\frac{1}{\beta} = \frac{n_s + 2kTn'_s + n''_s (kT)^2}{n_s + kTn'_s}. \quad (2.22)$$

Аналогічно, підставляючи в співвідношення (2.21) початкове наближення  $\alpha = 1 + \beta$ , запишемо

$$\alpha = \frac{2n_s + 3kTn'_s + n''_s (kT)^2}{n_s + 2kTn'_s + n''_s (kT)^2}. \quad (2.23)$$

У результаті рівняння (2.14), (2.15) набудуть вигляду

$$U = \frac{n_s e L^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \frac{(n_s + 2n_s' kT + n_s'' (kT)^2)^2}{(2n_s + 3n_s' kT + n_s'' (kT)^2)(n_s + n_s' kT)}, \quad (2.24)$$

$$j = e \mu_n n_f \frac{U (2n_s + 3kTn_s' + n_s'' (kT)^2)}{L (n_s + 2kTn_s' + n_s'' (kT)^2)}. \quad (2.25)$$

Як видно із співвідношень (2.24) і (2.25), для розрахунку залежності струм – напруга необхідно знати значення функцій  $n_f$ ,  $n_s$ ,  $n_s'$ , водночас, саме ці функції є вихідними параметрами при обробці експериментальних ВАХ СОПЗ диференціальним методом, що буде розглянутий нами пізніше. Значення  $n_s''$  можна легко обчислити використовуючи або методи чисельного диференціювання функцій, заданих у вигляді таблиці, або використовуючи процедуру побудови кубічного сплайну [83-85].

Як показали наші розрахунки, запропонований метод достатньо зручний для комп'ютерної реалізації і дозволяє досить точно розрахувати ВАХ СОПЗ за відомими значеннями концентрацій вільних і захоплених носіїв заряду. При розв'язанні модельних задач порівнювалися ВАХ, отримані з використанням інтегральних співвідношень (1.10) (1.11) і запропонованим методом (рис. 2.1). Результати чисельного моделювання показали, що похибка розрахунків кривих практично на всіх ділянках ВАХ не перевищує 1-2% і тільки в області найбільшої кривизни кривої досягає лише 10%, навіть у випадку монорівня, коли похибки розрахунків завжди максимальні. У випадку використання інших розподілів пасток похибка розрахунків кривих значно зменшувалась.

### 2.3. Вплив параметрів ЛС та температури вимірювань на вигляд ВАХ СОПЗ

Для визначення того, як впливають параметри ЛС і температура вимірювання на вигляд ВАХ СОПЗ, нами було проведено комп'ютерне моделювання ряду задач, оскільки у літературі за виключенням випадку монорівня [1, 17] такі розрахунки з використанням точного методу відсутні. У припущенні, що ЛС є моноенергетичними або такими, що описуються функцією Гаусса чи подвійною експонентою (вхідний розподіл див. вставку на рис. 2.5 а, б), нами розраховувалися теоретичні залежності  $\rho - E_F$  і  $1/e(d\rho/dE_F) - E_F$ . Як вже вказувалося при обчисленнях

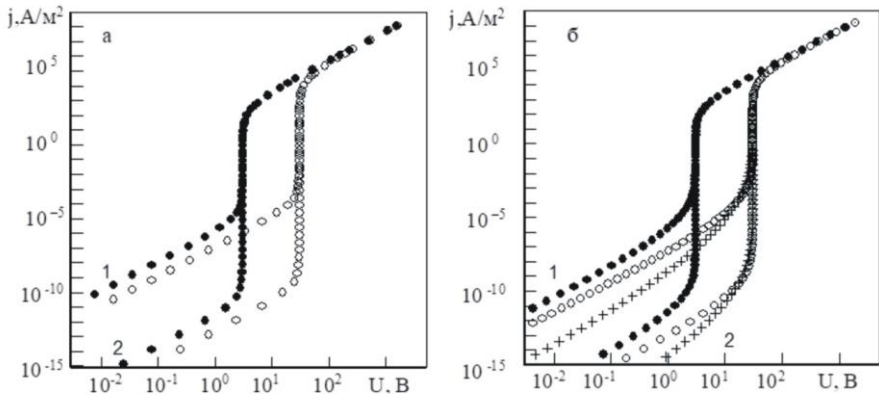


Рис. 2.4. ВАХ, розраховані для різних типів розподілу ЛС: а – монорівень з глибиною залягання  $E_t = -0,40$  еВ (1) та  $E_t = -0,57$  еВ (2), (відлік енергії проводиться від краю валентної зони)  $T = 150$  К:  $\bullet$  –  $N_t = 10^{19}$  м $^{-3}$ ;  $\circ$  –  $N_t = 10^{20}$  м $^{-3}$ ; б – гауссівський розподіл з глибиною залягання  $E_t = -0,40$  еВ (1) та  $E_t = -0,57$  еВ (2); густина станів описується функцією  $h(E) = N_t / [\sigma(2\pi)^{1/2}] \exp[-(E-E_t)^2 / 2\sigma^2]$ ,  $T = 150$  К:  $\bullet$  –  $N_t = 10^{19}$  м $^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  еВ;  $\circ$  –  $N_t = 10^{20}$  м $^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  еВ;  $+$  –  $N_t = 10^{20}$  м $^{-3}$ ,  $\sigma = 0,05$  еВ.

використовувалися значення фізичних констант телуриду кадмію, що наведені в підписунокних надписах. Далі з використанням рівнянь (1.10) (1.11) були отримані теоретичні ВАХ для цих розподілів при різноманітних параметрах пасток ( $E_t$ ,  $N_t$ ,  $\sigma$ ) і температурі вимірювання.

Як видно з рис. 2.4, значення напруги повного заповнення пасток  $U_{TFL}$  визначається величиною  $N_t$  і не залежить від глибини залягання ЛС  $E_t$ , ширини розподілу  $\sigma$ , а також його типу і температури вимірювання. Водночас, величина стрибка струму на ВАХ і його значення при фіксованій напрузі істотно залежить від цих параметрів. Тип розподілу в основному визначає особливості ВАХ при переході від її омічної області до квадратичної ділянки. Так, наприклад, у випадку присутності у ЗЗ матеріалу гауссівського розподілу при збільшенні його півширини  $\sigma$  кут нахилу кривої на цій ділянці збільшується (рис. 2.4 б). Слабкий вплив на загальний вигляд ВАХ типу пасткового розподілу обумовлений тим фактом, що при моделюванні вибиралися в основному достатньо вузькі розподіли ЛС, характерні для моно- та полікристалічних матеріалів. При використанні розмитих за енергіями розподілів пасток залежності струм – напруга набувають вигляду, аналогічного наведеному у [73] (рис. 2.5 а).

У випадку пасток, що описуються експоненціальною функцією, на ВАХ спостерігаються добре виражені ділянки степеневі залежності струму від напруги ( $j \sim U^\eta$ , де  $\eta > 2$ ) (рис. 2.5 а) описані у [17].

На рис. 2.5 б наведені ВАХ СОПЗ, розраховані для більш складного випадку пасткових розподілів за енергією: двох дискретних рівнів або двох рівнів, що описуються функцією Гаусса. Для наочності значення параметрів пасток ( $E_{t1}$ ,  $N_{t1}$ ,  $E_{t2}$ ,  $N_{t2}$ ) при моделюванні в першому і в другому випадку обрані однаковими.

Як видно з рисунка, для таких ВАХ характерна наявність двох стрибків струму, обумовлених заповненням глибоких центрів. Перший стрибок струму є вираженим слабо, тому, що він визначається пастковим рівнем із низькою концентрацією.

Рисунок 2.5 наглядно демонструє, що особливості ВАХ, обумовлені присутністю у ЗЗ матеріалу різних типів пасткових розподілів, добре помітні лише при низьких температурах вимірювань ( $T = 100$  К). При підвищенні цієї температури до кімнатної, а саме у таких умовах проводиться більшість вимірювань, залежності струм – напруга для розглянутих випадків стають

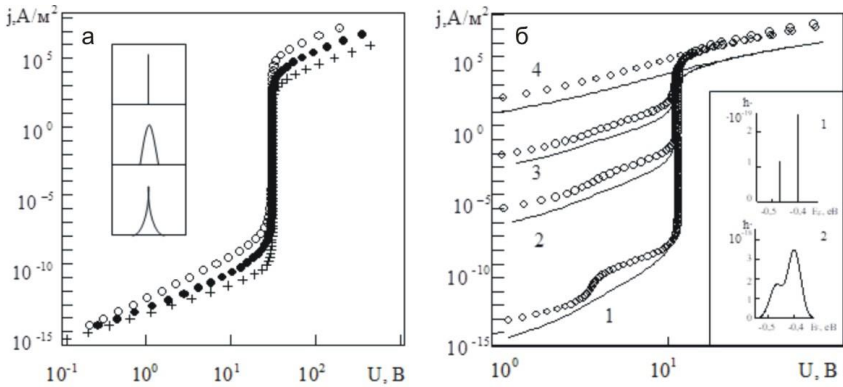


Рис. 2.5. ВАХ, розраховані для різних типів розподілу ЛС, які наведені на вставці: а –  $T = 150$  К,  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>: + - монорівень; • - гауссівський розподіл,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $j \cdot 10$ ; о - подвійний експоненціальний розподіл, густина станів описується функцією  $h(E) = N_t / [2kT_c] \exp[-|E - E_t| / kT_c]$ ,  $kT_c = 0,025$  еВ,  $j \cdot 100$ ; б – о - два дискретних рівня з енергією залягання  $E_1 = -0,47$  еВ;  $E_2 = -0,4$  еВ та концентрацією  $N_{t1} = 1,2 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>;  $N_{t2} = 2,5 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>, відповідно  $j \cdot 10$ . Суцільна лінія - два гауссівських розподіли  $E_1 = -0,47$  еВ;  $E_2 = -0,4$  еВ;  $N_{t1} = 1,2 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>;  $N_{t2} = 2,5 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>;  $\sigma = 0,025$  еВ. Температура, К: 100 (1), 150 (2), 200 (3), 300 (4)

практично однаковими. Оскільки при традиційному підході (пряма задача експерименту) при обробці ВАХ СОПЗ модель пасткового розподілу вибирається, як правило, апріорно, можливі принципові помилки.

Це неминуче призводить до істотних похибок при розрахунках таких параметрів глибоких центрів як їхня глибина залягання  $E_t$  та концентрація  $N_t$ , а в деяких випадках і навіть при визначенні самого вигляду розподілу ЛС за енергіями.

## РОЗДІЛ 3

### ОСОБЛИВОСТІ РЕКОНСТРУКЦІЇ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ МЕТОДОМ ІС (ЗВОРОТНА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ)

#### 3.1. Теоретичні основи методу ІС

Як вже відмічалось, інформацію про глибину залягання, концентрацію і характер розподілу пасткових рівнів за енергіями у даний час, як правило, одержують шляхом порівняння експериментальних ВАХ із розрахованими теоретично для дискретного, рівномірного, експоненціального, подвійного експоненціального, гауссівського та інших видів розподілів [1, 17] (рис. 2.5). Такий спосіб одержання інформації про ЛС є типовим прикладом розв'язання прямої задачі експерименту і має суттєві недоліки, пов'язані із апріорним завданням моделі розподілу пасток та інтегральним характером співвідношень, які використовуються для аналізу ВАХ. Все це призводить до суттєвого зниження інформативності методу та деякої некоректності одержаних за його допомогою результатів.

Принципово інший підхід запропоновано авторами [70], де зроблена спроба одержати співвідношення, що дозволяють реконструювати профіль розподілу пасток безпосередньо з ВАХ СОПЗ на безмодельній основі (зворотна задача експерименту). Однак у цій роботі були виведені робочі вирази у вигляді, який, як показали наші дослідження, є непридатними для обробки реальних експериментальних кривих. У зв'язку з цим, використовуючи підхід запропонований у [70], одержимо співвідношення, які можна застосувати для розв'язання зворотної задачі при обробці реальних експериментальних ВАХ.



Для одержання вихідних виразів із використанням рівнянь (1.10) і (1.11) визначимо першу і другу похідні від  $z$  за  $y$ . Перша похідна має вигляд:

$$z' = \frac{dz}{dy} = \frac{d\left(\frac{U}{j^2}\right)}{d\left(\frac{1}{j}\right)} = \frac{U}{j} \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right) = \frac{U}{j} (2-\gamma) = \frac{L}{e\mu_n}, \quad (3.1)$$

а друга дорівнює:

$$z'' = \frac{d^2z}{dy^2} = \frac{d}{d\left(\frac{1}{j}\right)} \frac{d\left(\frac{U}{j^2}\right)}{d\left(\frac{1}{j}\right)} = \left[ \left(\frac{2\eta-1}{\eta} \cdot \frac{\eta-1}{\eta}\right) (1+B) \right] U = [(2-\gamma)(1-\gamma) + \gamma] U = \left| \frac{\rho_f L^2}{\varepsilon \varepsilon_0} \right|. \quad (3.2)$$

Оскільки ВАХ СОПЗ прийнято наводити у подвійних логарифмічних координатах, то рівняння (3.1), (3.2) зручно записати з використанням похідних:

$$\eta = \frac{d(\ln j)}{d(\ln U)}, \quad \eta' = \frac{d^2(\ln j)}{d(\ln U)^2}, \quad \eta'' = \frac{d^3(\ln j)}{d(\ln U)^3}$$

Тоді одержимо такі співвідношення

$$n_f = \frac{\eta}{2\eta-1} \frac{jL}{e\mu_n U} = \frac{1}{\alpha} \frac{jL}{e\mu_n U}, \quad (3.3)$$

$$\frac{\rho_f}{e} = \frac{2\eta-1}{\eta} \frac{\eta-1}{\eta} \left[ 1 - \frac{\eta'}{\eta(2\eta-1)(\eta-1)} \right] \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{eL^2} = \alpha \beta \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{eL^2}, \quad (3.4)$$

$$\text{де } \alpha = \frac{2\eta-1}{\eta}, \quad \beta = \frac{\eta-1}{\eta} \left[ 1 - \frac{\eta'}{\eta(2\eta-1)(\eta-1)} \right].$$

З використанням обернених похідних

$\gamma = \frac{d(\ln U)}{d(\ln j)}$ ,  $\gamma' = \frac{d^2(\ln U)}{d(\ln j)^2}$ ,  $\gamma'' = \frac{d^3(\ln U)}{d(\ln j)^3}$  вирази (3.3) (3.4) можуть

бути подані у вигляді

$$n_f = \frac{1}{2 - \gamma} \frac{jL}{e\mu_n U} = \frac{1}{\alpha} \frac{jL}{e\mu U}, \quad (3.5)$$

$$\frac{\rho_f}{e} = [\gamma' + (2 - \gamma)(1 - \gamma)] \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} = \alpha\beta \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2}. \quad (3.6)$$

У результаті з рівнянь безперервності і Пуассона отримані фундаментальні співвідношення, які в явному вигляді зв'язують концентрацію вільних носіїв (енергію Фермі) і густину об'ємного заряду на аноді з напругою і густиною наскрізного струму через структуру. Дані рівняння, як показано нижче, дозволяють одержувати інформацію про розподіл пасток у ЗЗ напівпровідника безпосередньо з експериментальних кривих на безмодельній основі.

Встановимо, як з використанням виразів (3.3) і (3.4) або (3.5) і (3.6) може бути реконструйований розподіл пасток у ЗЗ досліджуваного матеріалу. Для визначеності, як було вказано раніше, розглянемо інжекцію дірок.

У стані термодинамічної рівноваги повна концентрація носіїв ( $n_{s0}$ ), концентрація локалізованих на пастках ( $n_{t0}$ ) і вільних зарядоносіїв ( $n_{f0}$ ) у напівпровіднику пов'язані очевидним співвідношенням  $n_{s0} = n_{t0} + n_{f0}$ , де  $n_{f0} = N_V \exp\left(-\frac{E_V - E_{F_0}}{kT}\right)$  у випадку, якщо  $E_V - E_F \geq 3kT$  ( $3kT = 0,078$  еВ при кімнатній температурі).

Інжекція носіїв з електрода приводить до виникнення у зразку об'ємного заряду, що складається з носіїв, локалізованих на пастках, і вільних зарядоносіїв

$$\rho = en_i = e(n_s - n_{s_0}) = e[(n_i + n_f) - (n_{i_0} + n_{f_0})], \quad (3.7)$$

У режимі СОПЗ концентрація інжекттованих носіїв значно перевищує їх рівноважну концентрацію в матеріалі і, у той же час, істотно менша повної концентрації пасткових центрів ( $n_{f_0} \ll n_i \ll N_i$ ). Тому надалі, за винятком особливо відзначених випадків, другим доданком в співвідношенні (3.7) будемо нехтувати. Звідси  $\rho = en_s$ .

Як було показано раніше, напруга, що прикладена до зразка і положення квазірівня Фермі пов'язані між собою співвідношенням (2.13). У результаті, при зміні зовнішньої напруги, внаслідок інжекції носіїв заряду з електрода рівень Фермі починає рухатись поміж розподілених у ЗЗ матеріалу ЛС у напрямі краю зони провідності. Таке зміщення  $E_F$  приводить до заповнення пасток носіями і, як наслідок, зміні провідності структури. Оскільки напруга і густина струму пов'язані з концентрацією пасток і положенням квазірівня Фермі, з'являється можливість сканування енергетичних розподілів ЛС. Ця залежність є фізичною основою методу ІС.

Збільшення концентрації зарядоносіїв  $dn_s$  у зразку при малій зміні положення рівня Фермі задається співвідношенням

$$\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} = \frac{dn_i}{dE_F} \approx \frac{dn_s}{dE_F} \approx \frac{dn_i}{dE_F}. \quad (3.8)$$

Концентрація носіїв на глибоких станах може бути знайдена з використанням статистики Фермі-Дірака

$$n_s = \int_{E_1}^{E_2} n_s(E) dE = \int_{E_1}^{E_2} h(E) f(E - E_F) dE + n_f, \quad (3.9)$$

Після підстановки (3.9) у співвідношення (3.8) одержимо робочий вираз, який зв'язує функції  $\frac{d\rho}{dE_F}$  та  $h(E)$

$$\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} = \frac{dn_s}{dE_F} = \frac{d}{dE} \int_E n_s(E) dE = \int_E h(E) \frac{d(f(E - E_F)) dE}{d(E - E_F)} + \frac{n_f}{kT}. \quad (3.10)$$

Таким чином, при довільних температурах задача реконструкції розподілів ЛС зводиться до знаходження функції  $h(E)$  із згортки (3.9) чи (3.10) за відомими функціями  $n_s(E_F)$  або  $\frac{d\rho}{dE_F}$ .

При цьому, як буде з'ясовано пізніше, перевагу слід надати виразу (3.9). У загальному випадку розв'язання цієї задачі є досить складаним і буде розглянуто нами пізніше. Але у випадку низьких температур задача спрощується, оскільки тоді функцію Фермі-Дірака у (3.10) можна замінити на функцію Хевісайда, звідки, нехтуючи  $n_f$ , одержимо

$$\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_f} \approx \frac{dN_t}{dE_F} \approx h(E). \quad (3.11)$$

З даного рівняння випливає, що графік залежності  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  у низькотемпературному наближенні безпосередньо дає форму розподілів ЛС у 33 напівпровідника. Використовуючи співвідношення (3.1) і (3.2), вираз (3.10) наведемо у вигляді,

більш зручному для обробки експериментальних кривих. Оскільки відповідні співвідношення можна записати в такий спосіб

$$n_f = \frac{L}{e\mu_n} \frac{j}{2U - U'j}, \quad (3.12)$$

$$\frac{\rho}{e} = (U''j^2 - 2U'j + 2U) \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{eL^2},$$

вираз (3.10) набуде вигляду

$$\frac{d\rho}{e dE_f} = \frac{\varepsilon\varepsilon_0(2U - U'j)}{eL^2 kT} \frac{U''j^3}{(U''j^2 - 2U'j + 2U)}. \quad (3.13)$$

З використанням похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$  легко записати дане рівняння також у формі

$$h(E) \approx \frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_f} = \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} \frac{2\eta - 1}{\eta^2} \left\{ 1 + \frac{(3\eta - 3)\eta\eta' - \eta\eta'' + 3\eta'^2}{\eta^2[(2\eta - 1)(\eta - 1) - \eta'/2]} \right\} \quad (3.14)$$

Співвідношення (3.14) також може бути записано тільки через першу похідну ( $\eta$ ). Для цього введемо позначення

$$C = \frac{(3\eta - 3)\eta\eta' - \eta\eta'' + 3\eta'^2}{\eta^2[(2\eta - 1)(\eta - 1) - \eta'/2]} = (2 - 3\eta)B + \frac{d \ln(1+B)}{d \ln U} = \frac{(2\eta - 1)B + (3\eta - 2)B^2 + \frac{d[\ln(1+B)]}{d \ln U}}{1 + (\eta - 1)B},$$

$$\text{де } B = - \frac{1}{\eta(2\eta - 1)(\eta - 1)} \frac{d\eta}{d \ln U}.$$

У результаті одержимо вираз

$$h(E) \approx \frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_f} = \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} \frac{2\eta - 1}{\eta^2} (1 + C) = \frac{\alpha\beta_2}{kT} \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} \frac{1}{\eta - 1} \left( \frac{1 + C}{1 + B} \right), \quad (3.15)$$

$$\text{де } \alpha = \frac{2\eta-1}{\eta}; \beta = \frac{\eta-1}{\eta}(1+B).$$

Запишемо також даний вираз з використанням обернених похідних  $\gamma, \gamma', \gamma''$ . Для цього знайдемо зв'язок між відповідними похідними

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{d(\ln j)}{d(\ln U)}, & \gamma &= \frac{d(\ln U)}{d(\ln j)} = \frac{1}{\eta}, \\ \eta' &= \frac{d(\ln \eta)}{d(\ln U)}, & \gamma' &= \frac{d(\ln \gamma)}{d(\ln j)} = -\frac{\eta'}{\gamma^3}, \\ \eta'' &= \frac{d(\ln \eta')}{d(\ln U)}, & \gamma'' &= \frac{d(\ln \gamma')}{d(\ln j)} = \frac{3\eta'^3 - \eta\eta''}{\eta^5}. \end{aligned}$$

У результаті отримаємо:

$$\frac{\eta}{2\eta-1} = \frac{1}{2-\gamma}. \quad (3.16)$$

Відповідно співмножник у (3.14), що містить похідні, набуде вигляду

$$\frac{2\eta-1}{\eta} \frac{\eta-1}{\eta} \left[ 1 - \frac{\eta'}{\eta(2\eta-1)(\eta-1)} \right] = [\gamma' + (2-\gamma)(1-\gamma)]$$

З урахуванням цього одержимо остаточно:

$$\begin{aligned} h(E) &\approx \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} \frac{2\eta-1}{\eta^2} (1+C) = \\ &= \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2} \left[ \frac{(2\gamma-3)\gamma' + \gamma''}{(2-\gamma)(1-\gamma) + \gamma'} + \gamma \right] (2-\gamma). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Дані вирази у низькотемпературному наближенні методу ІС дозволяють розрахувати концентрацію ЛС у матеріалі за відомими експериментальними кривими струм – напруга.

Енергетичний масштаб при реконструкції розподілів глибоких пасток може бути знайдений шляхом підставлення співвідношень (3.3), (3.5) або (3.12) у рівняння (3.4). Тоді з використанням різних похідних отримуємо

$$\begin{aligned}
 E_F &= kT \ln \frac{e\mu_n N_V}{L} + kT \ln \frac{2U - Uj}{j} = \\
 &= kT \ln \frac{e\mu_n N_V}{L} + kT \ln \frac{j}{U} + kT \ln \frac{\eta}{2\eta - 1} = \\
 &= kT \ln \frac{e\mu_n N_V}{L} + kT \ln \frac{j}{U} + kT \ln \frac{1}{2 - \gamma}. \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

Спільне використання одержаних виразів дозволяє визначити функцію, що описує розподіл ЛС у ЗЗ матеріалу за енергією. Для реконструкції пасткових розподілів безпосередньо з ВАХ СОПЗ можуть бути використані як співвідношення (3.13), (3.18), так і (3.14), (3.18) або (3.17), (3.18), оскільки з аналітичної точки зору усі вони ідентичні. Разом з цим, одночасне використання для обробки ВАХ виразів, записаних у різному вигляді, дозволяє підвищити достовірність кінцевих результатів, тому що дає можливість у деякій мірі компенсувати некоректність, обумовлену числовим диференціюванням експериментальних ВАХ.

З співвідношень (3.13), (3.18), так і (3.14), (3.18) або (3.17), (3.18) видно, що для одержання інформації про пасткові розподіли необхідно визначити три похідні у кожній точці залежності струму від напруги в різних координатах. Безпосередньо в експерименті ВАХ вимірюється поточною, тому задача зводиться до побудови кривої, що апроксимує експериментальні дані, із

наступним диференціюванням її у вузлах. Ця проблема вирішувалася нами шляхом побудови сгладжувального кубічного сплайну [83-85]. Оскільки чисельне диференціювання є математично некоректною операцією, а похибка диференціювання збільшується при обчисленні похідних високих порядків, з'ясувалося можливість проведення цієї процедури з мінімальною похибкою. Для цього використовувалася методика комп'ютерного моделювання, що включала розв'язання спочатку прямої, а потім зворотної задачі експерименту. Розглянемо її більш детально.

При розв'язанні прямої задачі нами за відомим розподілом пасток у 33 матеріалу (вхідний розподіл) із використанням співвідношень (3.9) (3.10) розраховувалися залежності  $\rho - E_F$  і  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  (див. рис. 3.1). Потім, із використанням процедури, описаної раніше, будувалися теоретичні ВАХ СОПЗ. Слід зазначити, що операції, які при цьому використовувалися, є математично коректними. Для розв'язання зворотної задачі, ВАХ оброблялися з використанням диференціальної методики. При цьому застосовувалися як співвідношення (3.14), (3.18), так і (3.17), (3.18). У результаті знову був отриманий розподіл глибоких центрів у 33 матеріалу (вихідний розподіл). Критерієм коректності процедури обробки ВАХ при розв'язанні зворотної задачі був збіг вхідного і вихідного розподілів ЛС. Результати розрахунків наведені на рис. 3.1.

Як видно з рисунка, при використанні диференціальних співвідношень як у вигляді, записаному як через похідні  $\gamma, \gamma', \gamma''$ , так і через похідні  $\eta, \eta', \eta''$ , вхідний розподіл  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  відтворюється достатньо точно. У той же час, використання робочих виразів у вигляді (3.29) (3.30), відомому з літератури [65], приз-



води́ло до непри́йнятно́ї похи́бки реконструкції форми розподілів пасток. У випадку використання співвідношень (3.14) (3.18) в області екстремумів функції  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  також спостерігається деякий розкид даних. Подібний недолік однак відсутній, якщо для обчислень застосовувати формули у вигляді (3.17) (3.18).

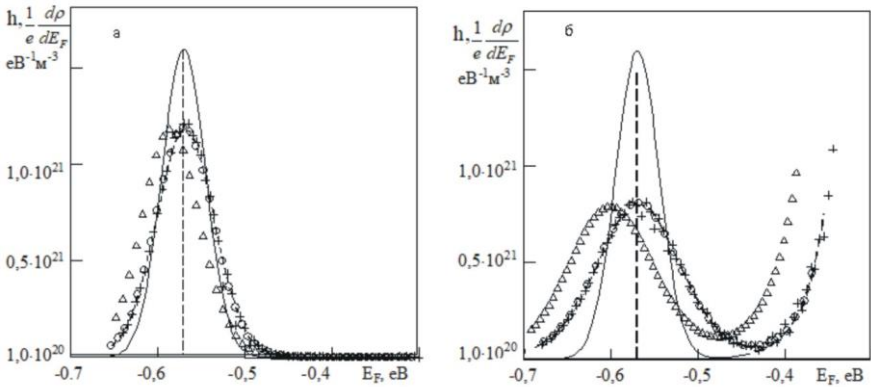


Рис. 3.1. Залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  для гауссівського розподілу ЛС у

33 матеріалу з параметрами  $E_t = -0,57$  eV,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  eV, одержана у результаті обробки ВАХ СОПЗ з використанням різних методів: суцільна лінія – вхідний розподіл  $h(E)$ ; о – з використанням похідних  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma''$ ; + – за допомогою похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$ ;  $\Delta$  – з використанням співвідношень (3.14) (3.18) при різних температурах. Температура, К: 150 (а), 300 (б)

З'ясуємо причини, що призводять до збільшення похибок результатів у випадку використання похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$ . Як відзначалося раніше, у випадку коли  $U \approx U_{TFL}$ , при малій зміні напруги на ВАХ спостерігається різкий стрибок струму, і, як наслідок, похідна  $d(\ln j)/d(\ln U)$  може зростати на декілька порядків.

Очевидно, що процес чисельного диференціювання в окрузі цієї точки є нестійким, тому що при практично сталому  $U$  значення похідної змінюється в інтервалі  $2 < \eta < A$ , при цьому величина  $A$ , у випадку вузьких розподілів пасток, наближається до нескінченності. У той же час, оскільки функція  $U(j)$  не має ділянок різкої зміни значень змінної (тому що є оберненою для функції  $j(U)$ ), похідна  $d(\ln U)/d(\ln j)$  у цьому випадку змінюється в межах від  $1/2$  до  $0$  і, як наслідок, чисельне диференціювання буде давати більш стійкі результати (рис. 3.2 а). Відзначене вище, наочно демонструє рис. 3.2, де наведені залежності похідних першого і більш високих порядків від змінної  $U$  або  $j$ . Розрахунок був проведений для випадку монорівня і гауссівського розподілу пасток з глибиною залягання  $E_t = -0,57$  еВ і напівшириною  $\sigma = 0,025$  еВ.

З рис. 3.2 добре видно, що у випадку диференціювання кривої  $U(j)$  похідна другого порядку практично на всьому інтервалі зміни напруги суттєво менша похідної першого порядку. Аналогічне співвідношення спостерігається і між похідними третього і другого порядку. Легко побачити, що в даному випадку внесок в остаточний результат похідних високого порядку, що розраховуються з максимальною похибкою, мінімальний. У результаті загальна похибка розрахунків знижується. Принципово інша ситуація складається при диференціюванні кривої  $j(U)$ . З рис. 3.2 видно, що в цьому випадку друга і третя похідні значно перевищують першу. Відповідно похибка розрахунку функції  $h(E)$  істотно зростає.

Як відзначалося вище, для обчислення похідних експериментальні значення  $j(U)$  апроксимувалися кубічним сплайном. Дана процедура дає більш коректні результати, якщо аргумент змінюється з рівномірним кроком, при цьому його значення у вузлах апроксимації повинні бути строго зростаючими ( $x_1 < \dots < x_i < \dots < x_n$ )... У випадку вузьких розподілів пасток при ни-

зьких температурах для функції  $j(U)$  в області  $U \approx U_{TFL}$ , як показали розрахунки, ця умова виконується не завжди.

Слід зазначити, що оскільки для одержання інформації про спектр глибоких ЛС методом ІС потрібна достатньо складна математична обробка експериментальних ВАХ СОПЗ, яка включає чисельне диференціювання, при зніманні експериментальних кривих повинні бути виконані певні вимоги.

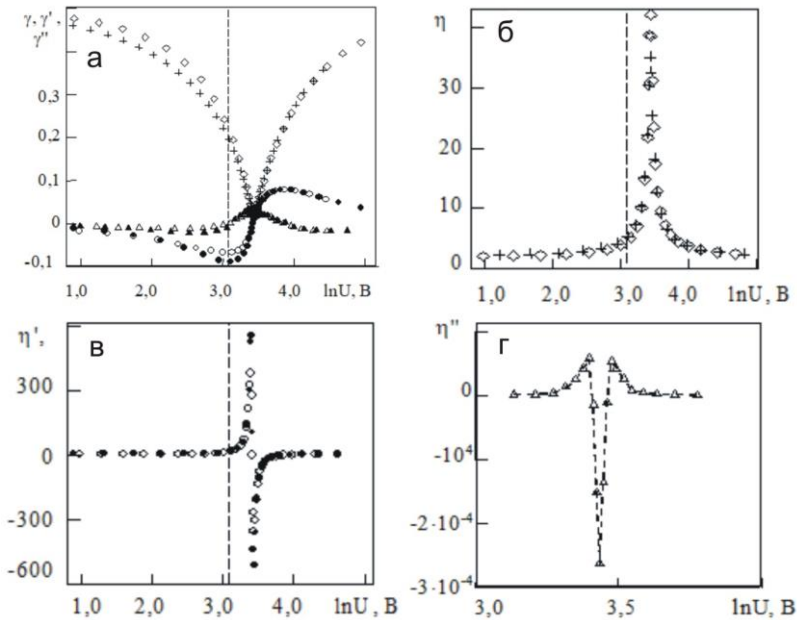


Рис. 3.2. Залежність похідних  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma''$  (а) та  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$  від  $\ln U$  (б, в, г) для монорівня з параметрами  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  та гауссівського розподілу з параметрами  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $T = 300$  К;  $\gamma(\ln U)$ ,  $\eta(\ln U)$  для монорівня –  $\square$ ; для гауссівського розподілу –  $+$ ;  $\gamma'(\ln U)$ ,  $\eta'(\ln U)$  для монорівня –  $\bullet$ ; для гауссівського розподілу –  $\circ$ ;  $\gamma''(\ln U)$ ,  $\eta''(\ln U)$  для монорівня –  $\sigma$ ; для гауссівського розподілу –  $\Delta$ . Пунктирна лінія – значення  $U$ , що відповідає максимуму розподілу пасток.

Першою вимогою, що дозволяє знизити похибку визначення параметрів пасток, є використання для вимірювання струму і напруги високоточних цифрових приладів.

Другою вимогою є проведення вимірювань в умовах, при яких сітка вузлів даних у логарифмічному масштабі повинна бути близькою до рівномірної. Третя вимога стосується вибору кроку зміни струму і напруги при вимірюваннях. Оскільки напівширина 33 багатьох напівпровідників не перевищує 1 еВ, то сканування енергетичної шкали доцільно проводити з точністю не гірше 0,005 еВ, що дозволяє досягти точності у визначенні  $E_i \sim 0,5\%$  (не гірше точності приладів, що використовуються при вимірюваннях).

З'ясуємо, яким чином необхідно здійснювати вимірювання експериментальних залежностей струм–напруга, щоб сканування енергетичної шкали відбувалося з необхідною точністю. Для цього, використовуючи вирази (3.1) (3.2), обчислимо відношення похідних

$$\frac{Z''}{Z'} = \frac{d(L/(e\mu_n n_f))/d(1/j)}{L/(e\mu_n n_f)} = \frac{[(2-\gamma)(1-\gamma)+\gamma']U}{(2-\gamma)U/j} = \left(1-\gamma + \frac{\gamma'}{2-\gamma}\right)j. \quad (3.19)$$

Після спрощення даного співвідношення одержимо:

$$\frac{j d(\ln n_f) L e \mu_n n_f}{n_f d(\ln j) e \mu_n L} = \left[1 - \gamma + \frac{\gamma'}{2 - \gamma}\right] j,$$

або в остаточному вигляді:

$$\frac{dE_F}{kT} = \left[ 1 - \gamma + \frac{\gamma'}{2 - \gamma} \right] d(\ln j). \quad (3.20)$$

З використанням рівняння (3.20), приймаючи  $dE_F \approx \Delta E_F$ ,  $d(\ln j) \approx \Delta j/j$ , легко розрахувати крок зміни струму, що забезпечує визначення глибини залягання пасток із заданою точністю. Для зазначеного вище значення  $\Delta E_F \sim 0,005$  еВ при  $T = 300$  К даний крок складає  $d(\ln j) \approx \Delta j/j \approx 0,1$ .

У результаті аналізу даних комп'ютерного моделювання можна зробити висновки, які дозволяють знизити похибки реконструкції розподілів ЛС методом ІС при його практичному застосуванні:

- при знятті експериментальних ВАХ доцільно будувати залежність  $U(j)$ , а не  $j(U)$ , як прийнято традиційно;
- при математичній обробці кривих варто використовувати диференціальні співвідношення у вигляді (3.17) (3.18);
- необхідно використовувати визначений крок зміни струму для одержання відповідного кроку зміни енергетичного масштабу, при цьому сітка вузлів за струмом у логарифмічному масштабі повинна бути рівномірною.

### **3.2. Визначення параметрів глибоких пасток у випадку різних типів розподілів ЛС**

Для граничних випадків присутності у ЗЗ матеріала монорівня або рівномірного розподілу пасток за енергією встановимо,

яким чином за відомою залежністю  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  може бути ви-

значена глибина залягання і концентрація ЛС. У випадку монорівня розподіл пасток може бути записаний у вигляді

$$h(E) = N_t \delta(E - E_F), \quad (3.21)$$

де  $\delta$  – дельта-функція.

При підстановці співвідношення (3.21) у вирази (3.9), (3.10) отримаємо

$$n_t = \frac{N_t}{1 + g \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right)}, \quad (3.22)$$

$$\frac{dn_t}{dE_F} = \frac{gN_t \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right)}{kT(1 + g \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right))^2}, \quad (3.23)$$

де  $g$  - фактор спінового виродження ЛС, що, як вже відмічалося, звичайно приймається рівним 1.

Значення даної функції в максимумі ( $E_F = E_t$ ) при  $g = 1$  дорівнює

$$\left(\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}\right)_{E_{Fm}} = \frac{N_t}{4kT},$$

звідки

$$N_t = 4kT \left(\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}\right)_{E_{Fm}}. \quad (3.24)$$

Таким чином, побудувавши залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  і визначивши на ній максимуми з використанням рівняння (3.24), легко знайти параметри дискретних моноенергетичних рівнів.

У випадку, коли у ЗЗ матеріалу присутні ЛС, які розподілені за енергіями рівномірно  $h(E) = AN_t = const$ , легко одержати, що

$$N_t = h(E) = \frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}. \quad (3.25)$$

Тобто, концентрація пасток при наявності таких розподілів знаходиться безпосередньо із залежності  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ .

У загальному випадку, якщо розподіл ЛС у ЗЗ матеріалу описується функцією довільного виду, їх концентрація визначається площею під кривою  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  і при низьких температурах може бути знайдена із співвідношення

$$N_t = \int_{E_1}^{E_2} h(E) dE.$$

Точність визначення концентрації пасток із залежності  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  можна перевірити, скориставшись залежністю  $\rho - E_F$ .

У випадку монорівня у точці, де квазірівень Фермі збігається з глибиною залягання пасток, із (3.22) легко отримати

$$[n_t]_{E_{Fm}} = \frac{N_t}{2}.$$

Звідки

$$N_t = [2n_t]_{E_{Fm}}.$$

Якщо розподіл ЛС описується функцією Гаусса, скориставшись роботою [17] можна одержати наближення для визначення  $n_t$

$$n_t = \frac{N_t}{(2\pi)^{1/2} \sigma_t} \int \frac{\exp(-Z^2 / 2\sigma_t^2) dZ}{1 + g \exp[(E_F - E_t - Z) / kT]} = H_t (n_f / N_v)^{1/m}, \quad (3.26)$$

де  $H_t = (N_t / 2g) \exp(E_t / mkT)$ ,  $m = (1 + 2\pi\sigma_t^2 / 16k^2T^2)^{1/2}$ ,  
 $Z = E - E_t$ .

У випадку, коли  $E_t = E_F$ , із (3.26) легко знайти співвідношення, для розрахунку  $n_t$  і  $N_t$ , аналогічні отриманим раніше для монорівня.

$$n_t = \frac{N_t}{2g}, \quad N_t = 2gn_t.$$

### 3.3. Вплив експериментальних факторів на точність визначення параметрів глибоких локалізованих центрів методом ІС

Як було показано раніше, співвідношення (3.14), (3.17), (3.18) дозволяють реконструювати вид пасткових розподілів безпосередньо з ВАХ СОПЗ. Водночас, при їхньому виведенні було зроблено ряд припущень, які реалізуються лише у визначених експериментальних ситуаціях. Одним із найбільш істотних припущень є припущення про те, що функція Фермі-Дірака може бути замінена функцією Хевісайда (низькотемпературне наближення методу). Водночас, у більшості випадків залежності струм – напруга реальних зразків знімаються при температурах, близьких до кімнатної. При отриманні виразів (3.3), (3.4), (3.17) також вважалося, що омичним струмом через зразок можна знехтувати ( $n_{f0} \ll n_i$ ), фактор спінового виродження ЛС дорівнює одиниці ( $g = 1$ ), а умови зйняття ВАХ є стаціонарними. Ці припущення можуть призводити до викривлення інформації, яка одержується з ВАХ СОПЗ, зниження роздільної здатності методу, а також обмеження придатності метода ІС.



Даний розділ присвячений вивченню впливу ряду експериментальних факторів, зокрема температури вимірювання, фактору спінового виродження та іншого на точність визначення параметрів ЛС. Для дослідження впливу температури та інших параметрів на достовірність реконструкції розподілів пасток із ВАХ СОПЗ методом ІС нами використовувалася процедура комп'ютерного моделювання, що включала розв'язок спочатку прямої, а потім оберненої задачі, яка описана вище. У якості модельних використовувалися розподіли глибоких центрів, наведені на вставці рис. 2.5 а.

Результати порівняння вхідного і вихідного розподілів пасток для типових моделей ЛС отримані при різних температурах наведені на рис 3.3. На цих рисунках вхідні розподіли  $h(E)$  зображені суцільними лініями, у той час як розрахункові залежності  $\rho - E_F$  і  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  – штриховими і штрихпунктирними.

Оскільки в реальних зразках фактор виродження ЛС може приймати значення  $g = 1/2, 1, 2$ , залежно від зарядового стану пасток розрахунки провадилися як для випадку  $g = 1$  (рис. 3.3 а, б), так і для  $g = 2$  (рис. 3.3 в). З рисунка видно, що залежності  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  мають вигляд розмитих кривих із максимумами,

форма яких у випадку монорівнів не залежить від значення  $E_t$  і  $N_t$ . Водночас, на залежностях  $\rho - E_F$  спостерігається вихід на насичення, коли квазірівень Фермі перетинає максимум розподілу пасток.

Кут нахилу залежності  $\rho - E_F$  на ділянці, де пастки є мілкими, залежить від температури і при її збільшенні зменшується.

Як видно з рис. 3.3 а, при низьких температурах вимірювання форма вихідних розподілів досить добре збігається з формою

вхідних. При цьому дискретні енергетичні рівні відтворюються як дифузійні криві з півшириною, що залежить від температури. Як показали розрахунки, при збільшенні температури вимірювання ВАХ їхня півширина зростає. Розподіли, відмінні від моноенергетичного, диференціальним методом також

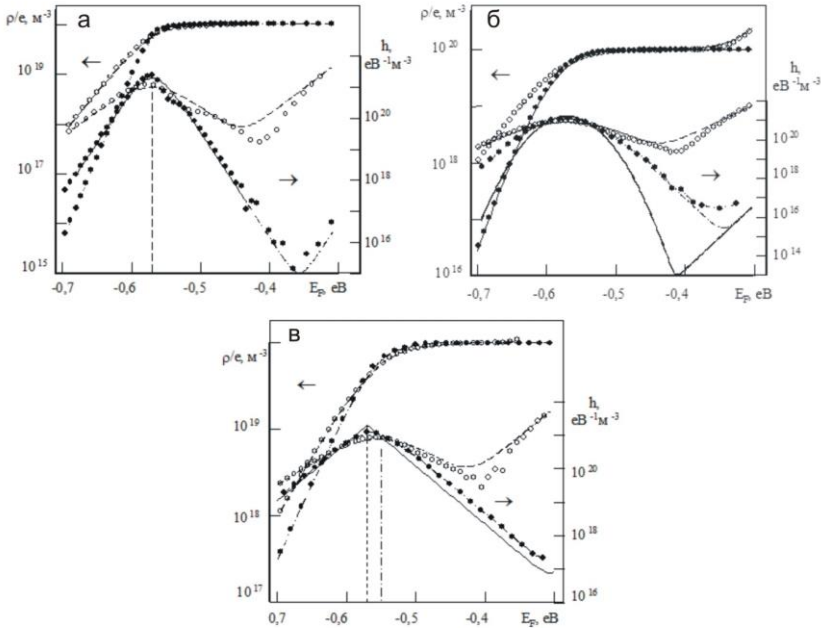


Рис. 3.3. Густина об'ємного заряду і розподіл ЛС у 3З матеріалу. Суцільна лінія – вхідний розподіл; штрих-пунктирна лінія – розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  ( $T = 100$  K); пунктирна лінія – розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  ( $T = 300$  K); • – реконструйований розподіл ( $T = 150$  K); о – реконструйований розподіл ( $T = 300$  K); а – випадок монорівня,  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $g = 1$ ; б – випадок гауссівського розподілу  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  eВ,  $g = 1$ ; в – випадок подвійного експоненціального розподілу  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $kT_c = 0,025$  eВ,  $g = 2$ .

реконструюються з деяким розширенням за енергіями (рис. 3.3 б, в ). При цьому значення функції  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  у максимумі при збільшенні температури зменшується, у той час як площа під кривою залишається незмінною.

Як встановлено в результаті моделювання (рис. 3.3), використання співвідношень низькотемпературного наближення методу ІС призводить до викривлення форми реконструйованих розподілів пасток у порівнянні з формою вхідних, особливо при підвищених температурах (близьких до кімнатної). При цьому, якщо при обчисленнях фактор виродження приймався рівним одиниці, максимуми вхідного і вихідного розподілів пасток збігаються, однак при  $g=2$  відбувається зсув положення максимуму реконструйованого розподілу відносно вхідного (рис. 3.3 в).

Розглянемо причини, що призводять до похибок при відтворенні профілю енергетичного розподілу ЛС.

У низькотемпературному наближенні, як відзначалося раніше, функція Фермі-Дірака у співвідношенні (3.10) замінюється функцією Хевисайда, тоді крива  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  безпосередньо дає розподіл ЛС (див. співвідношення (3.11)) за енергією. Реально при довільних температурах зв'язок між  $h(E)$  і  $\frac{dn_s}{dE_F}$  задається

виразом (3.10), звідки ясно, що крива  $(1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F)$  дозволяє

визначити функцію, що описує розподіл носіїв заряду, локалізованих на глибоких центрах. Ця функція при довільних температурах вимірювання відрізняється від функції, що характеризує розподіл пасток у 3D напівпровідника  $h(E)$ . Проведемо аналіз відмінностей.

Нехай у 33 матеріалу знаходиться моноенергетичний рівень пасток. З рівняння (3.23) випливає, що дискретні рівні повинні відтворюватися як вузькі розподіли симетричної форми, півширина яких за енергетичною шкалою залежить від температури і визначається виразом

$$E_{1/2} = kT \ln \left( \frac{3 + \sqrt{8}}{3 - \sqrt{8}} \right) = 3,5kT. \quad (3.27)$$

Очевидно, що при збільшенні температури вимірювання похибка реконструкції форми монорівня збільшується. Цей висновок підтверджується результатами комп'ютерного моделювання, наведеними на рис. 3.3 а.

У випадку, якщо в 33 матеріалу присутні ЛС, розподілені за енергіями рівномірно, із співвідношення (3.25) випливає, що  $n_t(E) = h(E)$ . Таким чином видно, що подібні розподіли методом ІС відновляються точно. Помилка, яка виникає при відтворенні довільного розподілу пасток, знаходиться між цими двома граничними випадками і не перевищує  $2kT$ . Результати моделювання для глибоких станів, що мають гауссівський розподіл або описуються подвійною експонентою, підтверджують цей висновок.

Розглянемо вплив фактора спінового виродження  $g$  на положення максимуму кривої  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ . Легко показати, що у випадку монорівня похідна  $d\rho/dE_F$  у співвідношенні (3.6) має максимум при  $E_{F \max} = E_t + kT \ln g$ .

Таким чином, якщо параметр  $g$  для ЛС не відомий, диференціальний метод дозволяє визначити енергію залягання моноенергетичних рівнів з точністю  $\approx kT \ln(g)$  (у випадку матеріалів з двократно виродженою зоною провідності  $\approx kT \ln(4)$ ). Аналогічний висновок можна зробити для інших модельних розподілів пас-

ток. Відмітимо, що похибка знаходження енергетичного положення рівня розглянутим методом залежить від температури вимірювання.

Якщо провести вимірювання залежностей струм – напруга при температурах  $T_1$  та  $T_2$  і розрахувати відповідні залежності  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ , то з'являється можливість визначити фактор спінового виродження  $g$ , а отже більш точно вказати його природу

$$\ln g = \frac{E_{F2max} - E_{F1max}}{k(T_2 - T_1)}, \quad (3.28)$$

де  $E_{F1max}$ ,  $E_{F2max}$  – положення максимумів функції  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  при температурі  $T_1$  та  $T_2$  відповідно.

Оскільки при вимірюванні ВАХ СОПЗ на реальних зразках, сканування розподілу пасток за енергіями відбувається з деяким кроком  $\Delta E$  важливо вибрати інтервал  $\Delta T = T_2 - T_1$  таким чином, щоб величина  $E_{F2max} - E_{F1max}$  була більша ніж  $\Delta E$ . Результати відповідних розрахунків наведені у таблиці 3.1. Тут наведені результати розрахунків для різних комбінацій типів розподілів та факторів спінового виродження при різних температурах вимірювання. За результатами комп'ютерного моделювання, можна зробити висновок, що різниця температур для коректного визначення  $g$  повинна складати приблизно 50 К.

У випадку, якщо  $g \neq 1$  значення функції  $d\rho/dE_F$  у максимумі при довільному  $g$  у випадку монорівня задається виразом (див. (3.23))

$$\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} = \frac{gN_t}{kT(1 + g)^2},$$

Таблиця 3.1. Визначення параметрів зйомки ВАХ для розрахунку коефіцієнта спінового виродження ЛС  $g$

Тип розподілу	$E_i$ , еВ	$N_i$ , $\text{м}^{-3}$	$\sigma$ , еВ	$g$ (ln $g$ )	$T_0$ , К	$T_1$ , К	$T_2$ , К	$T_3$ , К	$T_4$ , К	$T_5$ , К	$T_6$ , К	$T_7$ , К
					250	275	280	285	290	300	325	346
Гауссівський	0,80	$10^{20}$	0,03	2,0 (0,693)		0,928	0,773	0,663	0,580	0,464	0,618	0,725
Подвійна експонента	-0,40	$10^{20}$	0,025	4,0 (1,386)		1,856	1,546	1,326	1,740	1,392	1,547	1,450
Гауссівський	-0,20	$10^{20}$	0,015	2,0 (0,693)		0,0	0,773	0,663	0,580	0,464	0,618	0,483
					270	285	290	300	315	330	345	350
Гауссівський	-0,80	$10^{20}$	0,01	4,0 (1,386)		1,547	2,320	1,547	2,062	1,933	1,856	1,740
Гауссівський	-0,60	$10^{20}$	0,015	0,5 (-0,693)		0,0	0,0	-0,773	-0,515	-0,773	-0,928	-0,870
Гауссівський	-0,20	$10^{20}$	0,02	2,0 (0,693)		1,547	1,160	0,773	1,031	0,773	0,928	0,870
					300	325	350	375	400			
Монорівень	-0,75	$10^{20}$		1 (0)		0,0	0,0	0,0	0,0			
Монорівень	-0,5	$10^{20}$		2 (0,693)		0,928	0,464	0,773	0,696			
Монорівень	-0,25	$10^{20}$		4 (1,386)		0,928	1,392	1,160	1,392			
					270	300	320	345	360			
Гауссівський	-0,65	$10^{19}$	0,025	2 (0,693)		0	0,464	0,618	0,516			
Гауссівський	-0,40	$2 \cdot 10^{19}$	0,03	4 (1,386)		1,547	1,392	1,547	1,547			

Звідки легко знайти концентрацію ЛС за відомим  $g$

$$N_t = \frac{(1 + g)^2 kT}{g} \left( \frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} \right)_{E_{Fm}} .$$

Нами також досліджувався вплив присутності власних носіїв заряду у зразку на вигляд функції  $h(E)$ . Оскільки власні носії обумовлюють наявність на залежності  $j-U$  омічного струму при низькій напрузі, прикладеній до напівпровідника, проводився розрахунок ВАХ з урахуванням даного струму та без його урахування. Потім одержані ВАХ оброблялись у відповідності до процедури, що описана вище. Результати моделювання для гауссівського розподілу пасток показали, що у випадку, коли при обробці реальних ВАХ не віднімався омічний струм, на залежності  $h(E)$  з'являвся помилковий максимум в області енергії, яка наближено відповідає положенню рівноважного рівня Фермі.

### **3.4. Вплив спрощень робочих співвідношень на точність визначення параметрів пасток методом ІС**

Як було показано в попередньому розділі, використання точних співвідношень диференціальної методики, що містять похідні високих порядків (включаючи третю) можливо лише для обробки експериментальних ВАХ отриманих за допомогою високоточної цифрової апаратури при виконанні цілого ряду спеціальних вимог у процесі знімання кривих. Водночас, у ряді випадків виникає завдання визначення параметрів глибоких пасток із ВАХ СОПЗ знятих звичайним способом. Одним із можливих прийомів при цьому є використання спрощених виразів диференціальної методики, у яких нехтують похідними високих порядків. Оскільки чисельне диференціювання є процедурою, що вносить основну похибку у точність визначення параметрів пасток, особливо при знаходженні похідних високих порядків, даний прийом дозволяє використовувати метод ІС для реконструкції

профілів розподілів пасток безпосередньо з експериментальних ВАХ СОПЗ із прийнятною точністю. У даному розділі розглянуті спрощені диференціальні співвідношення методу, а також проведена оцінка похибок визначення глибини залягання ЛС і їх концентрації, що виникають при використанні даних виразів. Оскільки найбільш прийнятні результати були отримані при обробці ВАХ СОПЗ із використанням диференціальних співвідношень у вигляді (3.17) (3.18), вони і застосовувалися нами для аналізу. При цьому використовувалися процедури моделювання докладно описані вище.

Розрахунок проводився для традиційних моделей пасткових розподілів – монорівня і гауссівського. Результати реконструкції пасткових розподілів, отримані з використанням точних диференціальних співвідношень, а також спрощених виразів, у яких нехтують третьою похідною ( $\gamma'' = 0$ ) або другої і третьої похідними ( $\gamma'' = \gamma' = 0$ ) подані на рис. 3.4, 3.5. У цих випадках робочі співвідношення методу мали вигляд

$$h(E) \approx \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{eL^2} \left[ \frac{(2\gamma - 3)\gamma'}{(2 - \gamma)(1 - \gamma) + \gamma'} + \gamma \right] (2 - \gamma), \quad \gamma'' = 0$$

$$h(E) \approx \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{eL^2} (2 - \gamma)\gamma = \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 U}{eL^2} \frac{2\eta - 1}{\eta^2}. \quad \gamma' = \gamma'' = 0$$

При моделюванні використане також наближення, в якому приймалося, що коефіцієнти  $(2 - \gamma) = \alpha$  і  $[\gamma + (2 - \gamma)(1 - \gamma)] = \alpha\beta$  у співвідношеннях (3.17), (3.18) є константами [65]. Легко показати, що значення даних коефіцієнтів лежать в інтервалі  $1 \leq \alpha \leq 2$ ;  $0 \leq \alpha\beta \leq 2$ , де нижня межа  $\alpha = 1$ ,  $\alpha\beta = 0$  відповідає омичній провідності, а верхня  $\alpha \rightarrow 2$ ,  $\alpha\beta \rightarrow 2$  граничному заповненню пасток. У випадку безпасткового напівпровідника або



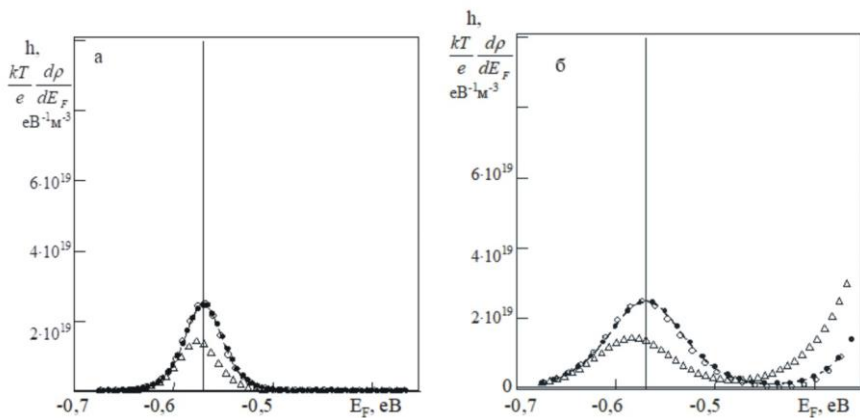


Рис. 3.4. Вплив спрощень розрахункових виразів на реконструкцію розподілу пасток для випадку монорівня з параметрами  $E_t = -0,57$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  в залежності від температури  $T = 150 \text{ К}$  (а),  $T = 300 \text{ К}$  (б). • – точні співвідношення; о –  $\gamma' = 0$ ;  $\Delta$  –  $\gamma' = 0$ ,  $\gamma'' = 0$ ; вхідний розподіл – суцільна лінія; розрахована залежність  $\frac{kT}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  – пунктирна лінія.

напівпровідника, який містить тільки мілкі ЛС, дані коефіцієнти дорівнюють  $\alpha = 3/2$ ,  $\alpha\beta = 3/4$ . Приймаючи, що  $\alpha = const$ ,  $\alpha\beta = const$  із використанням співвідношення (3.17) після диференціювання одержимо спрощений розрахунковий вираз у вигляді:

$$h(E) = \frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} = \frac{\alpha\beta\varepsilon\varepsilon_0}{eL^2} \frac{U}{kT(\eta-1)} = \frac{\alpha\beta\varepsilon\varepsilon_0}{eL^2} \frac{U}{kT} \frac{\gamma}{1-\gamma}. \quad (3.29)$$

Відповідно для енергії квазірівня Фермі легко записати співвідношення :

$$E_F = kT \ln \frac{L}{\alpha N_c e \mu} + kT \ln \frac{j}{U} \quad (3.30)$$

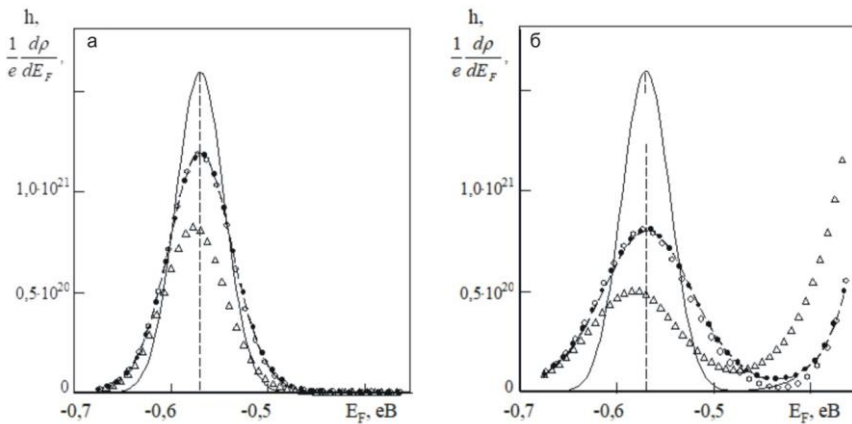


Рис. 3.5. Вплив спрощень розрахункових виразів на реконструкцію розподілу пасток для випадку ЛС, що описуються функцією Гаусса з параметрами  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  eВ, в залежності від температури  $T = 150$  К (а),  $T = 300$  К (б). • – точні співвідношення; о –  $\gamma'' = 0$ ;  $\Delta$  –  $\gamma' = 0$ ,  $\gamma'' = 0$ . Вхідний розподіл – суцільна лінія; розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  – пунктирна лінія.

Слід зазначити, що дані вирази з математичної точки зору еквівалентні співвідношенням, що використали автори [65] у їхньому спрощеному методі аналізу експериментальних ВАХ СОПЗ, а при  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$  збігаються з виразами використаними у [211] при моделюванні.

Із співвідношення (3.29) легко також помітити, що залежність  $h(E)$  може бути отримана шляхом множення функції  $\frac{1}{\eta - 1}$  на параметр, що залежить від прикладеної до зразка напруги  $U$ . Розрахунок даної функції для різних видів розподілів поданий на рис. 3.6. Відповідно стає ясно, що функція  $\frac{1}{\eta - 1}$  в ряді випадків

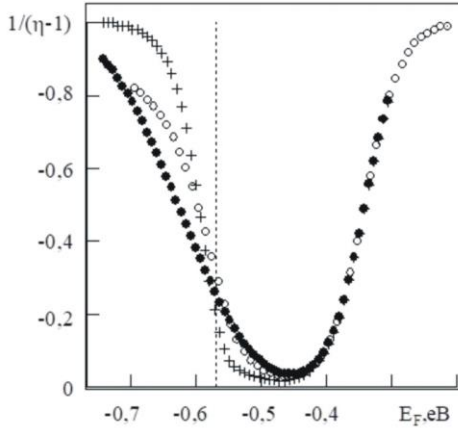


Рис. 3.6. Залежність  $1/(\eta-1)$  від  $E_F$  для різних розподілів з параметрами:  $E_t = -0.57$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ К}$ ,  $\times$  – монорівень;  $\bullet$  – гауссівський розподіл;  $\circ$  – подвійний експоненціальний розподіл. Штрихова лінія визначає максимум пасткового рівня.

(наприклад, у випадку монорівня) може бути використана для визначення глибини залягання пасток, а також їхньої концентрації, як це зроблено в роботі [68].

Результати аналізу похибок, що виникають при використанні спрощених співвідношень методу ІС, для випадку монорівня та гауссівського розподілу пасток зведені в таблицях 3.2 – 3.4. Було встановлено, що у випадку нехтування третьою похідною  $\gamma''$  у виразі (3.17) похибка у визначенні функції  $h(E)$  у точці  $E_F = E_t$  не перевищує 0,4%. У той же час в інтервалі  $|E_F - E_t| \approx kT$  дана похибка дещо зростає, але не перевищує 2-4%.

Така низька похибка обумовлена тим фактором, що похідна  $\gamma'$ , як видно з рис. 3.2, проходить через нуль поблизу точки  $E_F = E_t$  (звичайно в інтервалі  $|E_F - E_t| < 0,2kT$ ). У результаті, хоча третю похідну не можливо визначити з вимірювань із достатньою точністю, це не позначається на диференціальній обробці ВАХ на найбільш важливій її ділянці в області, де квазірівень

Таблиця 3.2. Вплив спрощень на похибки розрахунку  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  для монорівня з параметрами  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ К}$

Значення коефіцієнтів	$E_F - E_t$ , еВ		
	0	$-kT$	$kT$
$\gamma$	0,2063	0,3240	0,1065
$\gamma'$	-0,0895	-0,07205	-0,0699
$\gamma''$	0,0008	-0,0202	0,0267
$\alpha_1$	1,8040	1,6760	1,8930
$\alpha_2$	1,5300	1,2100	1,7800
Вид спрощення	Похибка у визначені $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ (%)		
$\gamma' = 0$	0,1	4	7
$\gamma' = 0, \gamma'' = 0$	45	30	56
$\alpha_1 = 2, \alpha_2 = 1$	23	27	52

Таблиця 3.3. Вплив спрощень на похибки розрахунку  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  для гауссівського розподілу пасток з параметрами  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $T = 300$  К

Значення коефіцієнтів	$E_F - E_t$ , еВ		
	0	$-kT$	$kT$
$\gamma$	0,1949	0,3020	0,1158
$\gamma'$	-0,0695	0,0589	-0,0599
$\gamma''$	0,0013	-0,0108	0,0148
$\alpha_1$	1,805	1,697	1,88
$\alpha_2$	1,38	1,24	1,59
Вид спрощення	Похибка у визначенні $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ (%)		
$\gamma''=0$	0,28	2,3	4
$\gamma'=0, \gamma''=0$	43	27	49
$\alpha_1=2, \alpha_2=1$	17	13	42

Таблиця 3.4. Вплив спрощень на похибки розрахунку  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  для гауссівського розподілу пасток з параметрами  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,05$  еВ,  $T = 300$  К.

Значення коефіцієнтів	$E_F - E_t$ , еВ		
	0	$-kT$	$kT$
$\gamma$	0,176	0,226	0,120
$\gamma'$	-0,0448	-0,043	-0,041
$\gamma''$	0,0021	-0,0028	0,0059
$\alpha_1$	1,824	1,774	1,879
$\alpha_2$	1,458	1,33	1,61
Вид спрощення	Похибка у визначені $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ (%)		
$\gamma'' = 0$	0,4	0,7	2
$\gamma' = 0, \gamma'' = 0$	32	26	39
$\alpha_1 = 2, \alpha_2 = 1$	10	6	28

Ферми збігається з глибиною залягання пасток. У випадку нехтування у робочих виразах похідною другого порядку помилка у визначенні функції  $h(E)$  у найбільш вагомій області ( $E_F \approx E_t$ ) складає 30-40%. В обох випадках спрощення не вносять похибку у точність визначення енергетичного положення рівня ЛС.

Ситуація принципово змінюється при використанні для обробки ВАХ СОПЗ диференціальних співвідношень у вигляді (3.29), (3.30). Як видно з таблиць 3.2-3.4, у випадку, якщо  $\alpha_1=2$ ,  $\alpha_2=1$  похибка визначення концентрації пасток може сягати 30–50%. При цьому вноситься систематична похибка як у результати визначення концентрації пасток  $N_t$ , так і їх глибини залягання  $E_t$ . Отримані значення глибини залягання ЛС будуть на  $kT$  глибше істинних, а їхня концентрація на 30-50% менша. Слід зазначити, що навіть у даному випадку похибка визначення параметрів глибоких рівнів порівнянна з тією, що утворюється при використанні методу ВАХ СОПЗ у його традиційній формі. Відмітимо також, що похибки визначення параметрів пасток для більш розмитих розподілів нижчі, ніж для вузьких, близьких до монорівня.

Отже, у результаті моделювання встановлено, що застосування для обробки експериментальних ВАХ спрощених співвідношень методу ІС, у яких нехтують похідними високих порядків, приводить до похибок визначення параметрів пасток, які у цілому ряді випадків є прийнятними для обробки кривих, оскільки похибка визначення  $N_t$  навіть при кімнатній температурі не перевищує 30-40%.

Більшість стрілочних приладів, що досить часто використовуються для вимірювання значень струмів і напруги, дозволяють проводити виміри з точністю 5% (5-й клас приладів). Таким чином, використання спрощених співвідношень диференціальної методики, де нехтується третя похідна, для обробки таких даних є цілком прийнятним.

### 3.5. Самоузгоджений метод ІС

Суттєвим недоліком диференціального методу аналізу ВАХ СОПЗ, як і традиційного, є те, що у вираз (3.18), що визначає енергетичний масштаб, входять фізичні константи і параметри електроперенесення напівпровідникового матеріалу  $N_V$ ,  $\mu$ ,  $g$ , які повинні бути визначені незалежними методами. Водночас рухливість носіїв заряду  $\mu$  істотно залежить як від виду напівпровідника, так і від технологічних режимів одержання плівок і тому повинна вимірюватися на зразках-свідках у кожному конкретному випадку, наприклад методом Холу. У випадку високоомних зразків, для яких можна застосувати метод ВАХ СОПЗ, це зробити досить проблематично.

У той же час якщо для традиційних напівпровідникових матеріалів ефективна густина вільних станів  $N_V$  відома і є довідковою величиною, то у випадку нових екзотичних матеріалів вона також потребує визначення, що є ще більш складною проблемою. Все це призводить до того, що метод ІС повинен бути доповнений цілою низкою допоміжних методик вимірювання фундаментальних характеристик напівпровідників. На жаль, це істотно ускладнює процедуру визначення параметрів пасткових станів із використанням методу ВАХ СОПЗ.

У даній главі розглянуто самоузгоджену модифікацію методу ІС, що у процесі реконструкції розподілів пасток не тільки не потребує будь-яких додаткових вимірювань, але і дозволяє визначити ряд важливих характеристик напівпровідникового матеріалу і конкретного зразка, зокрема рухливість носіїв  $\mu$ .

Незалежний метод визначення енергетичного масштабу при дослідженні ЛС може бути отриманий у такий спосіб [71]. Підставивши у рівняння (3.18), значення для  $E_F$  та  $E_{F0}$  знайдемо робоче співвідношення для енергії квазірівня Фермі у вигляді



$$E_F - E_{F_o} = kT \ln \frac{j}{j_{om}^e} - kT \ln \frac{2\eta - 1}{\eta} =$$

$$kT \ln \frac{j}{j_{om}^e} - kT \ln(2 - \gamma)$$

де  $j_{om}^e$  – величина струму, отриманого екстраполяцією омічного закону (при низькій напрузі) ВАХ до дійсної напруги, що прикладена до зразка;

Останній параметр може бути безпосередньо визначений з активаційної енергії, знайденої на омічній ділянці ВАХ (із залежності  $\ln \sigma - 1/T$ ).

З урахуванням вищевикладеного, мікроскопічну рухливість носіїв заряду легко знайти в результаті спільного розв'язання рівнянь (3.5) і (3.6). Тоді для довільної точки ВАХ СОПЗ отримаємо:

$$\mu_{no} = \frac{jL}{N_v U e} \frac{\eta}{2\eta - 1} \exp\left(\frac{E_F - E_v}{kT}\right) = \frac{jL}{N_v U e} \frac{1}{2 - \gamma} \exp\left(\frac{E_F - E_v}{kT}\right).$$

На омічній ділянці ВАХ ( $\eta=1$ ) це рівняння приймає вигляд

$$\mu_{no} = \frac{jL}{N_v U e} \exp\left(\frac{\Delta E_{F_o}}{kT}\right).$$

З використанням співвідношень (3.3), (3.5), (3.14), (3.17) може бути також отриманий вираз, який дозволяє визначити дрейфову рухливість носіїв у зразку

$$\begin{aligned} \mu_{ef} = \mu_{no} \theta &= \frac{\gamma L^3}{\varepsilon \varepsilon_0 U^2} \left[ \left( \frac{\eta-1}{\eta} \right) \left( \frac{2\eta-1}{\eta} \right)^2 (1+B) \right]^{-1} = \\ &= \frac{\gamma L^3}{\varepsilon \varepsilon_0 U^2} \frac{1}{(2-\gamma)(\gamma' + (2-\gamma)(1-\gamma))} \end{aligned}$$

Ще більш радикальний засіб незалежного визначення енергетичного масштабу може бути запропонований із використанням концепції так званого домінуючого рівня, тобто рівня, що переважає в статистиці захоплення носіїв заряду пастками, розвиненої у роботі [86]. Згідно з цією концепцією для будь-якого положення квазірівня Фермі існують ЛС (домінуючі стани) з енергією  $E_d^*$  (яка у загальному випадку відрізняється від  $E_F$ ), що переважають у статистиці захоплення носіїв заряду, тобто задають не тільки положення рівня Фермі, але і концентрацію вільних і захоплених носіїв, а також фактор Ламперта  $\theta$ . Фактично запропонована концепція дозволяє звести задачу про переміщення квазірівня Фермі поміж розподілених у ЗЗ матеріалу ЛС до задачі, де розглядається моноенергетичний рівень пасток положення якого збігається з енергією  $E_d^*$ , яка змінюється при зміщенні квазірівня Фермі. Положення домінуючого рівня при довільному рівні інжекції в зразок визначається співвідношенням:

$$\begin{aligned} E_d^* &= -\frac{d(\ln \theta^*)}{d(1/kT)} = E_{a'} - \frac{d(\ln \mu_n)}{d(1/kT)} - \frac{2\eta-3}{\eta(2\eta-1)} \frac{d(E_{a'})}{d \ln U} + \frac{1}{1+C} \frac{dC}{d(1/kT)} = \\ &= E_{a'} - \frac{d(\ln \mu)}{d(1/kT)} - \frac{\gamma^2(4-3\gamma) + B\gamma(1-\gamma)(2\gamma-3)}{(1-\gamma)(2-\gamma)(1+B)} \frac{dE_{a'}}{d \ln U} + \\ &\quad + \frac{\gamma^3}{(1-\gamma)(2-\gamma)(1+B)} \frac{d^2 E_{a'}}{d(\ln U)^2}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\text{де } \theta^* = \frac{dn_f / dE_F}{dn_s / dE_F}; \quad B = \frac{\gamma'}{(1 - \gamma)(2 - \gamma)} \quad - \text{ величина, що зале-$$

жить від другої похідної  $\gamma$  за  $U$ ;  $E_{a'}$  – енергія активації СОПЗ.

Енергія активації обчислюється з використанням виразу:

$$E_{a'} = - \frac{d(\ln j)}{d(1/kT)} \quad (3.32)$$

Важливо, що активаційна енергія  $E_a$  може бути визначена експериментально шляхом вимірювання ВАХ при різних температурах. Тоді враховуючи, що  $\mu \neq f(T)$ , із співвідношення (3.31) можна знайти положення домінуючого рівня енергії  $E_d^*$  при довільній напрузі, прикладеній до зразка.

Можливість використання концепції домінуючого рівня для незалежного визначення енергетичного масштабу при дослідженні ЛС та розрахунків рухливості носіїв перевірялись нами шляхом комп'ютерного моделювання. Обчислення  $E_d^*$  проведено таким чином. Для вибраної модельної функції  $h(E)$  розраховувались ВАХ СОПЗ при різних температурах поблизу заданої  $T$ . Потім з використанням співвідношень (3.31), (3.32) визначали енергію активації  $E_a$ , а отже, і  $E_d^*$ . Для моделювання були вибрані розподіли пасток, які описуються функцією Гаусса з різною дисперсією  $\sigma$ . Результати розрахунків наведені на рис. 3.7. Глибина залягання пасток та їх концентрація наведені у підписах під рисунками. Як видно з рис.3.7 у випадку розмитих розподілів пасток ( $\sigma \geq 0,1$  еВ) положення домінуючого рівня енергії, як і стверджують автори [72-74], дійсно збігається з положенням енергії Фермі в досить широкому інтервалі значень  $E_F$ . При цьому цей інтервал розширюється при зменшенні температури вимірювання ВАХ і звужується при її збільшенні. Суттєве змен-

шення інтервалу, у якому спостерігається співпадіння енергій  $E_F$  та  $E_d^*$  відбувається також при зменшенні півширини енергетичних розподілів пасток, що використовувались при моделюванні. Встановлено, що у більшості розглянутих випадків різниця між цими енергіями різко зростала, коли квазірівень Фермі зміщувався таким чином, що перетинав максимум розподілу пасток. Так, для прикладу, при зміщенні квазірівня Фермі на 0,1 еВ відносно положення максимуму у випадку гауссівського розподілу пасток (див. рис. 3.7), різниця між  $E_F$  та  $E_d^*$  сягала 0,2 еВ.

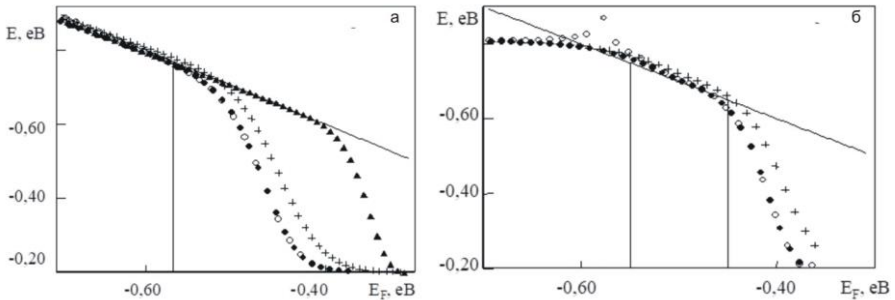


Рис. 3.7. Залежність положення енергії активації  $E_a$  (+) та домінуючого рівня  $E_d^*$  (o –  $T = 300$  К;  $\sigma - T = 150$  К) від положення рівня Фермі  $E_F$  для різних розподілів ЛС,  $E'_F$  (o) – положення рівня Фермі, розраховане з використанням методу [73] ( $T = 300$  К): гауссівський розподіл з  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,1$  еВ,  $g = 1$  (а) два гауссівських розподіли з параметрами  $\sigma = 0,025$  еВ,  $g = 1$ ,  $E_{t1} = -0,55$  еВ,  $N_{t1} = 2 \cdot 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $E_{t2} = -0,45$  еВ,  $N_{t2} = 2,5 \cdot 10^{20}$  м<sup>-3</sup> (б).

З наведених результатів стає зрозуміло, що концепція домінуючого рівня енергії дозволяє правильно визначати енергетичний масштаб лише в обмеженому інтервалі енергій. Як правило, на цьому інтервалі квазірівень Фермі знаходиться усередині розподілу ЛС. У результаті енергетичне положення максимуму розподілу пасток у 33 матеріалу за допомогою цього методу визначається майже точно, у той час як реальний профіль відтворю-

ється з викривленням. Відповідно це призводить до похибок при визначенні повної концентрації пасток.

Результати розрахунків функції  $h(E_d^*)$  з використанням співвідношень (3.31) і (3.19) наведені на рис. 3.8. Як видно з рисунку, у випадку вузьких розподілів пасток метод, запропонований у [72] призводить до значних похибок у визначенні енергетичного профіля ЛС, що робить його використання недоцільним.

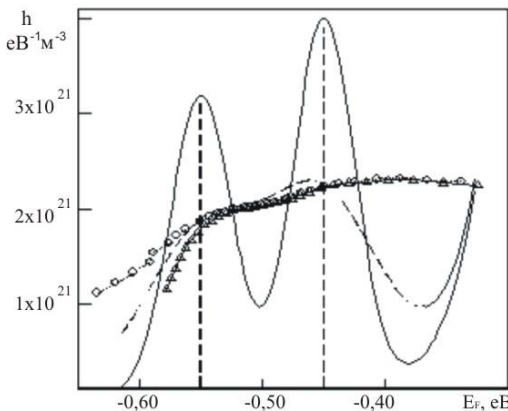


Рис.3.8. Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку двох гауссівських розподілів з параметрами:  $E_{l1} = -0,55$  eV,  $N_{l1} = 2 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>,  $E_{l2} = -0,45$  eV,  $N_{l2} = 2,5 \cdot 10^{19}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  eV,  $g = 2$ ,  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25}$  м<sup>-3</sup>,  $T = 300$  К:

Вхідний розподіл – суцільна лінія; розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  – пунктирна лінія; вихідний розподіл, розрахований з використанням  $E_d^*$  –  $\Delta$ ; вихідний розподіл, розрахований з використанням [73]  $E'_F$  –  $\circ$ .

вузьких розподілів пасток, характерних для моно- та полікристалічних. Таким чином, результати розрахунків свідчать про обмеженість підходу, запропонованого в [72-74], особливо коли температури вимірювання високі.

### 3.6. Високотемпературне наближення методу ІС

Як було показано раніше, використання низькотемпературного наближення призводить до значних похибок при реконструкції форми розподілів пасток методом ІС вже при температурі близької до кімнатної (рис. 3.3). В той же час більшість досліджень параметрів пасток як вже неодноразово вказувалося проводиться саме при кімнатних температурах  $U$  зв'язку з цим виникає необхідність розробки модифікації методу ІС, яка б дозволяла одержати невикривлені профілі розподілу ЛС за енергією при будь-якій температурі вимірювання ВАХ.

Для визначення енергетичного розподілу пасток нами використовувалися вирази (3.6) (3.9) та (3.18). При довільних температурах заміна функції Фермі-Дірака на функцію Хевісайда у співвідношенні (3.9) не є коректною в результаті задача реконструкції форми розподілів пасток зводиться до визначення функції  $h(E)$  із згортки (3.9) або (3.10) у випадку коли відома функція  $n_s$  чи  $dn_s/dE_F$ . Згортка (3.9) для розв'язання цієї задачі краща, оскільки, як встановлено раніше в результаті моделювання функція  $n_s$  виходить на насичення при енергіях  $E_F \approx E_t$ , а також не містить похідну третього порядку. Для розглянутого випадку ця проблема у теперішній час не вирішена, хоча подібні задачі виникають, наприклад, при розв'язанні зворотної задачі еліпсометрії, та деяких інших випадках [87].

Розглянемо, як можна визначити функцію енергетичного розподілу ЛС, використовуючи дані отримані в результаті застосування для обробки експериментальних ВАХ СОПЗ диференціальної методики. Об'єднуючи рівняння (3.9) і співвідношення (3.5), (3.6) одержимо

$$n_t + \int_{E_1}^{E_2} h(E)f(E - E_F)dE = \frac{\varepsilon\varepsilon_0}{eL^2} [\gamma' + (2 - \gamma)(1 - \gamma)]$$

$$\int_{E_1}^{E_2} h(E) f(E - E_F) dE = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{eL^2} [\gamma' + (2 - \gamma)(1 - \gamma)] - \frac{jL}{e\mu U} \frac{1}{(2 - \gamma)}. \quad (3.33)$$

Співвідношення (3.33) являє собою рівняння Фредгольма 1-го роду і у загальному вигляді може бути записане у формі

$$Ay \equiv \int_a^b K(x, s)y(s)ds = \varphi(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (3.34)$$

де  $K(x, s)$ ,  $\varphi(x)$ - відомі функції;  $y(s)$  - невідома функція, яку необхідно визначити.

Функція  $K(x, s)$  – дійсна і неперервна в області  $\{a \leq s \leq b; c \leq x \leq d\}$ . У нашому випадку  $K(x, s)$  – являє собою функцію Фермі-Дірака ( $f(E - E_F)$ ),  $y(s)$  – функція, що описує розподіл пасток за енергіями  $h(E)$ , а  $\varphi(x)$  – об'ємний заряд у зразку.

Співвідношення (3.34) зручно записати в операторній формі

$$Ay = \varphi, \quad y \in Y, \quad \varphi \in F, \quad (3.35)$$

де  $Y$  і  $F$  – деякі метричні простори;  $A$  – неперервний оператор, що переводить елементи  $y \in Y$  в елементи  $\varphi \in F$ .

Проаналізуємо можливість розв'язання цього рівняння. Згідно з [87] задача розв'язання рівняння (3.35) є коректною за Адамаром, якщо:

а) будь-якому  $\varphi \in F$  відповідає розв'язок  $y \in Y$  (умова існування розв'язку);

б) із  $Ay_1 = Ay_2$  випливає  $y_1 = y_2$  (умова однозначності розв'язку);

в) малим помилкам вихідних даних відповідають малі помилки розв'язання (умова стійкості розв'язку).

Функція  $\varphi(x)$  у нашому випадку задана із похибками, які зумовлені:

- експериментальними факторами, оскільки похибки виникають при вимірюванні залежностей струм – напруга (похибки приладів);

- обчислювальними факторами (похідні  $\gamma$ ,  $\gamma'$  обчислюються за допомогою диференціювання кубічних сплайнів, і, як наслідок, енергетична шкала та об'ємний заряд визначені з похибками);

- похибки теорії, які виникають через наближений опис явища монополярної інжекції (передбачається, що зразки гомогенні за товщиною та ін.).

Як наслідок, задача розв'язання рівняння (3.33) є некоректною, і навіть невеликі похибки правої частини  $\varphi(x)$  можуть призводити до досить великих похибок при його чисельному розв'язанні, у результаті замість істинного розв'язку утворюється так звана знакозмінна "пилка".

Задачу розв'язання рівняння (3.35) називаються умовно коректною, якщо

- апріорі відомо, що розв'язок існує і належить деякій безлічі коректності  $M$ ;
- розв'язок є єдиним в класі функцій, що належать  $M$ ;
- нескінченно малим варіаціям  $\varphi$ , що не виходять за клас  $M$  відповідають нескінченно малі варіації  $u$ .

У нашому випадку на розв'язок не можливо накласти жорсткі обмеження іншими словами клас можливих розв'язків не є компактом. Такі задачі називають істотно некоректними. Підхід який дає стійкі розв'язки суттєво некоректних задач розроблений А.М. Тихоновим [88-90]. У його основу покладено поняття регуляризувального оператора. Використаємо цей підхід для розв'язання рівняння (3.33).

Нехай  $\varphi(x) \in L_2$ ,  $y(x) \in W_2^1$ , і замість точного значення функції  $\varphi(x)$  відоме її наближення  $\bar{\varphi}(x)$  таке, що  $\|\varphi(x) - \bar{\varphi}(x)\| < \delta$ , де  $\delta$ -



верхня оцінка похибки правої частини рівняння.

Введемо згладжувальний функціонал

$$\Phi_{\alpha}[y, \bar{\phi}] = \int_c^d [Ay - \bar{\phi}(x)]^2 dx + \alpha \Omega[y],$$

де стабілізуючий функціонал  $\Omega$  дорівнює

$$\Omega[y] = \int_a^b \{y^2(s) + q[y'(s)]^2\} ds, \quad q \geq 0$$

де  $\alpha'$  – параметр регуляризації;  $q$  – порядок регуляризації.

З умови мінімуму функціонала слідує рівняння Тихонова [88]:

$$\alpha' [y_{\alpha}(t) - qy_{\alpha}''(t)] + \int_a^b R(t, s) y_{\alpha}(s) ds = F(t), \quad a \leq t \leq b, \text{ Де}$$

$$R(t, s) = R(s, t) = \int_a^b K(x, t) K(x, s) dx,$$

$$F(t) = \int_c^d K(x, t) \bar{\phi}(x) dx.$$

Тут крайові умови вибрані у вигляді:  $y'_{\alpha}(a) = y'_{\alpha}(b) = 0$ .

У цьому випадку замість некоректного рівняння першого роду отримуємо рівняння другого роду (інтегральне рівняння Фредгольма 2-го роду при  $q = 0$  або інтегродиференціальне при  $q \neq 0$ ). Значення величини  $q$  пов'язано з порядком регуляризації: якщо  $q = 0$ , то говорять про регуляризацію 0-го порядку, а якщо  $q \neq 0$ , - про регуляризацію 1-го порядку.

Існує декілька способів вибору параметра регуляризації  $\alpha$  [87, 89, 90]. Вони відрізняються кількістю та характером необхідної додаткової інформації. Одним із найбільш ефективних та

детально досліджених є спосіб нев'язки [89]. Відмітимо, що в якості додаткової інформації використовується значення верхньої оцінки похибки правої частини рівняння.

Спосіб нев'язки вибору  $\alpha$  полягає в тому, що в якості  $\alpha$  береться таке  $\alpha = \alpha_d$ , при якому

$$\beta(\alpha_d) - \delta^2 = 0,$$

$$\text{де } \beta(\alpha) = \left\| Ay - \bar{\phi} \right\|_F^2 = \int_c^d \left[ \int_a^b K(x, s) y_\alpha(s) ds - \bar{\phi}(x) \right]^2 dx.$$

Спосіб квазіоптимального значення  $\alpha$  не потребує додаткової інформації про похибку правої частини рівняння (3.37) і полягає в тому, що в якості  $\alpha$  вибирається найменше із значень  $\alpha > 0$   $\alpha = \alpha_{к.о.}$ , при яких реалізується локальний мінімум функції

$\Psi(\alpha) = \left\| \alpha \frac{dy_\alpha}{d\alpha} \right\|_y^2$ , де  $v_\alpha = \alpha dy_\alpha / d\alpha$  розв'язок рівняння  $\alpha v_\alpha - A v_\alpha = A y_\alpha - F$  [91].

Для співставлення переваг і недоліків розглянутих методів вибір параметру регуляризації  $\alpha'$  при розрахунках здійснювався як з використанням принципу нев'язки, так і способом визначення квазіоптимального значення параметра.

Розв'язання задачі ускладнювалося тим, що функція  $h(E)$ , яку необхідно було знайти, змінюється на 16-20 порядків на інтервалі енергій  $\Delta E \approx 0,2$  еВ. У зв'язку з цим проводилося нормування рівняння (3.33). У якості нормуючого множника обиралося значення  $n_{sm}$ , що відповідало найменшій за модулем енергії квазірівня Фермі  $E_{Fm}$  при якій функція  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  набувала локаль-

ного мінімуму. Цю величину ми обчислювали за допомогою рівнянь (3.6), (3.17) та (3.18) таким чином:

- розраховували значення функції  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ ;

- знаходили мінімуми цієї функції і визначали енергію квазі-рівня Фермі  $E_{Fm}$ ;

- обчислювали  $n_{sm}$  при  $E=E_{Fm}$ ;

- отримане значення  $n_{sm}$  використовували як нормуючий множник.

У результаті нормоване співвідношення (3.33) за допомогою чисельного алгоритму (див. додаток) зводилося до системи лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею. Отримана система розв'язувалась методом Халецького.

Перевірка коректності запропонованого методу [92-94] реконструкції розподілів пасток із ВАХ СОПЗ при довільних температурах проводилася шляхом співставлення вхідних розподілів глибоких ЛС і розподілів, одержаних в результаті послідовного розв'язання прямої, а потім зворотної задачі (вихідний розподіл).

Оскільки для розрахунку теоретичних ВАХ СОПЗ на практиці найчастіше використовуються наближені методи, визначалися також похибки, які вносяться при цьому під час вимірювання параметрів глибоких пасток. Для цього поряд із точним методом розрахунку залежностей струм–напруга використовувався наближений метод. Даний метод, як було з'ясовано раніше, дає похибки при побудові ВАХ, які не перевищують 5-10% для різних розподілів пасток.

Результати співставлення вхідних і вихідних розподілів пасток, які одержані з використанням високотемпературного наближення, наведені на рис. 3.9-3.11.

У разі використання точних співвідношень (1.10), (1.11) для розрахунку ВАХ СОПЗ, форма енергетичних розподілів ЛС запропонованим методом відтворюються майже точно навіть у випадку дуже вузьких розподілів, які описуються функцією Гаусса

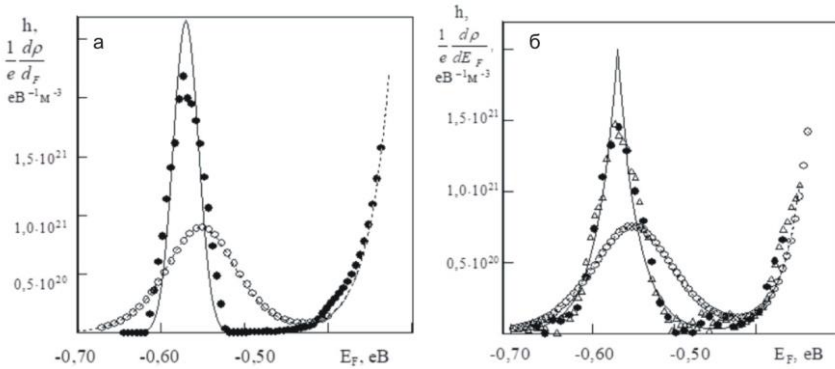


Рис.3.9. Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25}$  м<sup>-3</sup>,  $g = 2$ ,  $T = 300$  К: а – гауссівський розподіл з параметром:  $\sigma = 0,015$  eВ; б – подвійний експоненціальний розподіл з параметром  $kT_c = 0,025$  eВ. Вхідний розподіл  $h(E)$  – суцільна лінія; вихідний розподіл: о – розрахунок із використанням низькотемпературної методики; високотемпературне наближення методу ІС: • – метод квазіоптимального значення  $\alpha$ ;  $\Delta$  – метод нев’язки.

з  $\sigma = 0,015$  eВ. Похибка у визначенні концентрації пасток при цьому не перевищує 3-5%, тоді як енергія залягання глибоких рівнів (положення максимумів функції  $h(E)$ ) визначається точно. У випадку більш розмитих розподілів похибка відтворення їх форми значно зменшувалася (рис. 3.10) і не перевищувала 1-3%.

Для порівняння зазначимо, що у випадку використання низькотемпературного наближення моноенергетичні рівні відтворюються у вигляді дифузних кривих з півшириною  $\approx 3,5kT$  ( $\sigma = 0,091$  eВ при кімнатній температурі), у той час як інші розподіли реконструюються з розширенням  $\sim 2kT$  (рис. 3.3). У випадку подвійного експоненціального розподілу похибки реконструкції форми у точці  $E_F = E_t$  при використанні запропонованого методу обумовлені відсутністю першої похідної у точці злому кривої  $h(E)$  (рис. 3.2 б).

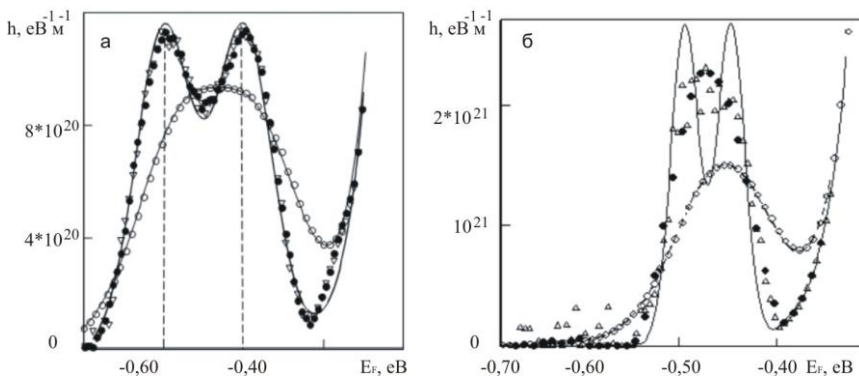


Рис. 3.10. Розподіл ЛС у ЗЗ матеріалу для випадку двох гауссівських розподілів з параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ К}$ : а –  $E_{t1} = -0,60 \text{ еВ}$ ,  $E_{t2} = -0,50 \text{ еВ}$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ еВ}$ ; б –  $E_{t1} = -0,50 \text{ еВ}$ ,  $E_{t2} = -0,45 \text{ еВ}$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,015 \text{ еВ}$ ; Вхідний розподіл – суцільна лінія; о – вихідний розподіл, розрахований за низькотемпературною методикою; вихідний розподіл, розрахований за високотемпературною модифікацією методу ІС: ● – метод квазіоптимального значення параметру  $\alpha$ ,  $\Delta$  – метод нев’язки.

Результати розрахунків вхідних розподілів ЛС у випадку, коли параметр регуляризації  $\alpha'$  знаходився з використанням принципу нев’язки та квазіоптимального значення параметра, відрізняються незначно (рис.3.9 б, 3.10). Але з точки зору практичного використання метод квазіоптимального значення більш прийнятний, оскільки не потребує знання похибок визначення функції  $n_s$  у співвідношенні (3.33), яку можна знайти при розв’язанні модельних задач, але можна задати тільки апіорі при обробці реальних ВАХ СОПЗ.

З рис. 3.11 також видно, що у випадку розрахунку ВАХ наближеними методами (використовувався найбільш точний з них) також вносяться похибки при реконструкції функції розподілу

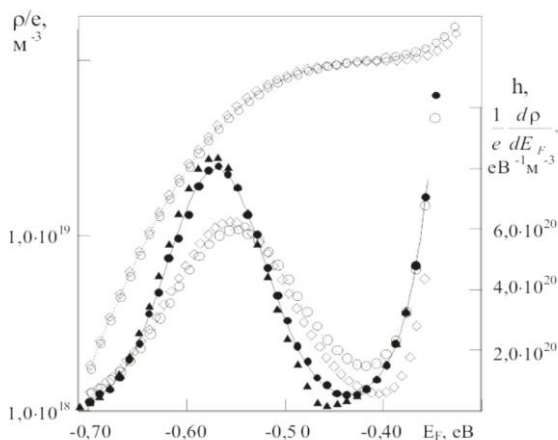


Рис.3.11. Густина об'ємного заряду та розподіл пасток у ЗЗ матеріалу, що описуються функцією Гаусса з параметрами:  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,05$  еВ,  $g = 2$ ,  $T = 300$  К: Вхідний розподіл  $h(E)$  – суцільна лінія; вихідний розподіл розрахунок із використанням низькотемпературної методики: о – ВАХ обчислені за інтегральними рівняннями; □ – за наближеними рівняннями; високотемпературне наближення методу ІС (метод квазіоптимального значення  $\alpha$ ): ● – ВАХ обчислені за інтегральними рівняннями; σ – за наближеними рівняннями.

носіїв заряду, локалізованих на глибоких пастках  $\frac{dn_s}{dE_F}$ , та функції розподілу пасток  $h(E)$ . Ці похибки досить значні і можуть і можуть сягати 15% у випадку монорівня. Похибки зростають при зменшенні глибини залягання ЛС у ЗЗ матеріалу. Таким чином, практика використання наближених методів розрахунків ВАХ закладає підґрунтя для одержання некоректних результатів при визначенні параметрів пасток.

Для визначення роздільної здатності високотемпературної модифікації методу ІС за енергіями проводилося моделювання

для випадку двох рівнів пасток, що розташовані на різній глибині у ЗЗ матеріалу. При обчисленнях змінювалася глибина залягання ЛС, енергетична відстань між ними, а також концентрація пасток (рис. 3.10, 3.11). Результати комп'ютерного моделювання свідчать, що роздільна здатність високотемпературного методу ІС залежить від співвідношення концентрацій глибоких станів, їх півширини та глибини залягання.

Встановлено, що для рівнів близьких до дискретних похибка визначення  $E_t$  становить  $\sim(2\div3)kT$  і зменшується при використанні більш розмитих розподілів. Якщо монорівні або вузькі гаусові розподіли розташовані за енергіями ближче, вони відтворюються як один розподіл (рис. 3.10 б). Встановлено, що роздільна здатність також збільшувалась при збільшенні концентрації пасток.

Слід відзначити, що розглянутим методом вдавалося виявити енергетичні рівні, які при використанні низькотемпературного наближення, як правило, реконструюються як один (рис. 3.10 а, 3.12 б).

Ще одним чинником, який знижує роздільну здатність методу, що розроблено, для мілких пасток є вплив концентрації вільних носіїв, які завжди присутні у реальних зразках. Ця концентрація крім того залежить від рівня інжекції носіїв з контакту. На рис. 3.13 наведені криві розподілу пасток, що розраховані з урахуванням і без урахування концентрації вільних носіїв у матеріалі. Зрозуміло, що дозаповнення пасток вільними носіями перш за все у випадку мілких ЛС може призводити до того, що методом ІС вони розрізнятися не будуть. Відповідний розрахунок наведено на рис. 3.13, де ЛС, що мають малу глибину залягання (або концентрацію), диференціальним методом не розрізняються. Нижня межа  $E_{min}$ , яка лімітує застосування методу, що розглядається, може бути визначена із співвідношення

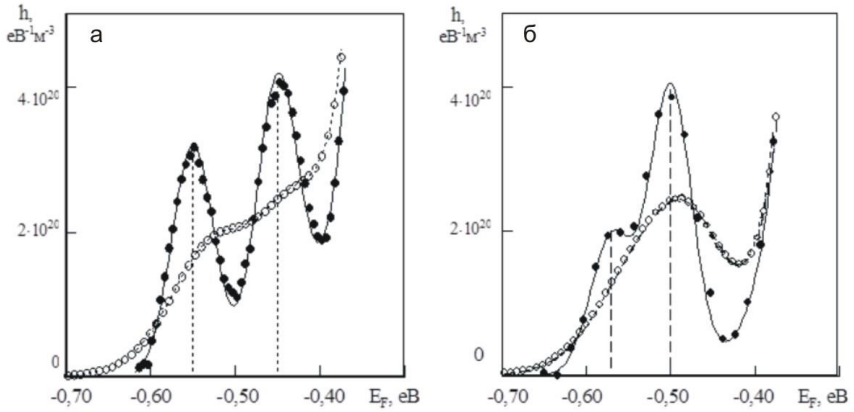


Рис.3.12. Розподіл ЛС у ZnO матеріалу для випадку двох гауссівських розподілів з параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ eV}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ K}$ : а –  $E_{i1} = -0,55 \text{ eV}$ ,  $N_{i1} = 2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{i2} = -0,45 \text{ eV}$ ,  $N_{i2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ; б –  $E_{i1} = -0,57 \text{ eV}$ ,  $N_{i1} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{i2} = -0,50 \text{ eV}$ ,  $N_{i2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . Вхідний розподіл – суцільна лінія; вихідний розподіл, розрахований за низькотемпературною методикою о; вихідний розподіл, розрахований за високотемпературною модифікацією методу ІС: • – метод квазіоптимального значення параметру  $\alpha$

$$\theta_{\max} = N_V / \int h(E) \exp(-E / kT) dE \leq 10^{-2}, \quad (3.36)$$

де  $\theta$  – фактор Ламперта.

Для параметрів пасток та фізичних констант матеріалу, що використані у дослідженнях, ця межа при кімнатній температурі становить  $\sim 0,30 \div 0,40 \text{ eV}$  і зменшується при зниженні температури вимірювань та збільшенні концентрації ЛС. Таким чином, розглянутий метод, як і традиційна методика ВАХ СОПЗ, може бути застосований для вивчення достатньо глибоких пасток.



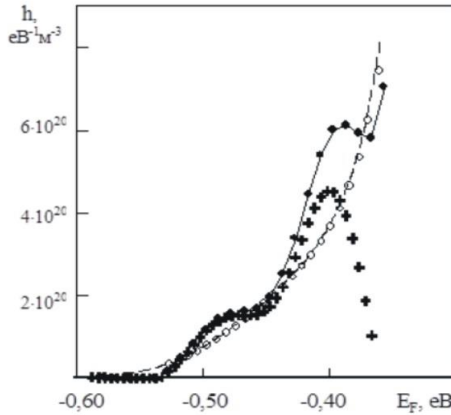


Рис. 3.13. Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку двох гауссівських розподілів з параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ eV}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ K}$ :  $E_{i1} = -0,47 \text{ eV}$ ,  $N_{i1} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{i2} = -0,40 \text{ eV}$ ,  $N_{i2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . Вхідний розподіл – суцільна лінія, о – вихідний розподіл, розрахований за низькотемпературною методикою; ● – вихідний розподіл, розрахований за високотемпературною модифікацією методу ІС з урахуванням вільних носіїв, + – без урахування вільних носіїв.

На закінчення відмітимо, що запропонований метод реконструкції функції  $h(E)$  відтворює моноенергетичні рівні як дуже вузькі ( $\sigma = 0,015 \text{ eV}$ ) розподіли, що описуються функцією Гаусса, оскільки при розв'язанні інтегрального рівняння (4.37) передбачається, що невідома функція безперервна.

Результати комп'ютерного моделювання свідчать про високу інформативність і точність диференціального методу ІС пасток у запропонованій модифікації. Цей метод може бути з успіхом застосований як для дослідження розподілів ЛС, близьких до моноенергетичних, так і для інших типів розподілів, які присутні у реальних полікристалічних та аморфних високоомних напівпровідниках або інших матеріалах.

## РОЗДІЛ 4

### ІНЖЕКЦІЯ НОСІЇВ В УМОВАХ НЕОДНОРІДНОГО ПРОСТОРОВОВОГО РОЗПОДІЛУ ЛС

#### 4.1. Основні підходи до визначення параметрів ЛС у напівпровідниках методом аналізу ВАХ СОПЗ

Метод, що заснований на аналізі ВАХ СОПЗ при різних температурах і освітленості, у теперішній час набув широкого використання для одержання інформації про параметри ЛС у високоомних органічних та неорганічних напівпровідникових матеріалах [17, 30, 95-103]. При цьому розроблено два основних підходи для аналізу ВАХ.

Підхід, що є загально визнаним, базується на розв'язанні так званої прямої задачі експерименту. У цьому випадку параметри ЛС із експериментальних ВАХ СОПЗ одержують шляхом їх порівняння з теоретичними кривими, розрахованими у припущенні, що у ЗЗ напівпровідника присутні деякі модельні розподіли пасток носіїв заряду [1, 17]. Як правило, задачу вдається розв'язати для найпростіших випадків – моноенергетичного [25], однорідного [42], експоненціального [44], подвійного експоненціального [104] та гауссівського [47, 48] розподілів пасток за енергіями в наближенні слабкого або сильного заповнення ЛС [1, 17]. Цей підхід має принципові недоліки, які докладно розглянуті у [93, 105]. Вони призводять до суттєвого зменшення інформативності прямого методу, а також деякої некоректності результатів, одержаних за його допомогою. Незважаючи на це, цей підхід продовжує використовуватися для дослідження ЛС і у наш час [100-103].

Принципово інший підхід, позбавлений недоліків загально відомого – це так званий метод ІС, для обробки ВАХ СОПЗ запропонований та розвинутий у роботах [65, 68-69, 73, 74, 93,

105-108]. Він базується на розв'язанні зворотної задачі експерименту. Метод ІС дозволяє знайти функцію  $h(E)$ , яка описує енергетичний розподіл ЛС у 33 досліджуваних зразків, безпосередньо з експериментальних ВАХ, шляхом їх диференціальної обробки. Відповідні вирази наведені нами вище та у роботах [68-69, 73, 74, 105-108]. В результаті виникає можливість одержання найбільш повної та коректної інформації про основні параметри ЛС у матеріалі такі, як їх глибина залягання ( $E_l$ ) та концентрація ( $N_l$ ). Можливості, межі застосування та роздільна здатність методу ІС докладно розглянуті у [93, 105].

Необхідно відмітити, що при обох підходах до аналізу ВАХ, як правило, вважається, що просторовий розподіл ЛС у зразках є однорідним [17, 21, 24, 42, 44, 46, 48, 63, 65, 67, 69, 73, 74, 93, 95-99, 101-108]. Це припущення є придатним у випадку монокристалічних об'ємних матеріалів, але навряд чи може бути використаним для полікристалічних або аморфних плівок, одержаних вакуумною конденсацією чи іншими методами. Добре відомо, що у цьому випадку поблизу підкладки формується перехідний шар з підвищеним вмістом дефектів, які можуть виступати пастками [110].

Додаткові ЛС також виникають на міжфазних поверхнях напівпровідник-метал або напівпровідник-напівпровідник [111], які є обов'язковим елементом приладових структур. Відповідно концентрація ЛС у зразках буде змінюватися за товщиною. Просторова неоднорідність матеріалу може суттєвим чином вплинути на вигляд ВАХ СОПЗ та привести до некоректності визначення параметрів ЛС у напівпровідникових шарах.

#### **4.2. Врахування впливу просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів ЛС**

Вплив просторової неоднорідності зразків на вигляд основних виразів, що описують ВАХ СОПЗ, теоретично проаналізо-

вано у роботі [17]. Автори вважали, що функцію, яка описує розподіл ЛС, можна розбити на дві частини, які залежать тільки від енергії та просторової координати  $h(E, x) = h(E) \cdot S(x)$ , де  $h(E)$  - функція, що описує енергетичний, а  $S(x)$  – просторовий розподіл пасток. Просторовий розподіл ЛС описувався експоненціальною функцією або функцією Гауса з максимумом на одному чи двох електродах. Ці функції мали вигляд:

$$S(x) = 1 + A \cdot \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right),$$

$$S(x) = 1 + B \cdot \left[ \exp\left(-\frac{x}{x_0}\right) + \exp\left(-\frac{(L-x)}{x_0}\right) \right], \quad (4.1)$$

$$S(x) = 1 + C_1 \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right), \quad S(x) = 1 + C_1 \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{x_0^2}\right) + C_2 \cdot \exp\left[-\left(\frac{(L-x)}{x_0}\right)^2\right], \quad (4.2)$$

де  $x$  – відстань від катоду;  $L$  – товщина зразка;  $A$ ,  $B$  і  $x_0$  – деякі константи, що характеризують просторовий розподіл пасток.

В результаті аналізу було показано, що врахування просторової неоднорідності зразків не приводить до зміни виду виразів, що описують ВАХ СОПЗ та напругу заповнення пасток  $U_{TFL}$ , однак реальну товщину зразків при цьому потрібно замінити деякою ефективною, яка визначається співвідношенням [17]

$$L_{ef} = \left[ \frac{(2m+1)}{(m+1)} \int_0^L \left( \int_0^z S(x) dx \right)^{m/(m+1)} dt \right]^{(m+1)/(2m+1)}, \quad (4.3)$$

де  $m = \left(1 + \frac{2\pi\sigma_i^2}{16k^2T^2}\right)^{1/2}$  - для випадку енергетичного розподілу

пасток, що описується функцією Гауса;  $m = l = \frac{T_c}{T} = \frac{d(\ln j)}{d(\ln U)} - 1$  -

для енергетичного розподілу, що описується експонентою.

Тут  $L_{ef}$  – ефективна товщина зразка;  $T_c$  – параметр енергетичного розподілу пасток;  $\sigma$  – півширина гауссівського розподілу.

У цьому випадку для довільного енергетичного розподілу ЛС може бути записаний закон подібності  $j/L(L/L_{ef}) = f[U/L^2 \cdot (L/L_{ef})^2]$ . У подальшому автори [17] провели розрахунок залежностей  $d_{ef}/d$  від  $d/x_0$ , для різних значень сталих  $A, B, C_1, C_2, x_0$ . Деякі з них наведені на рис. 4.1.

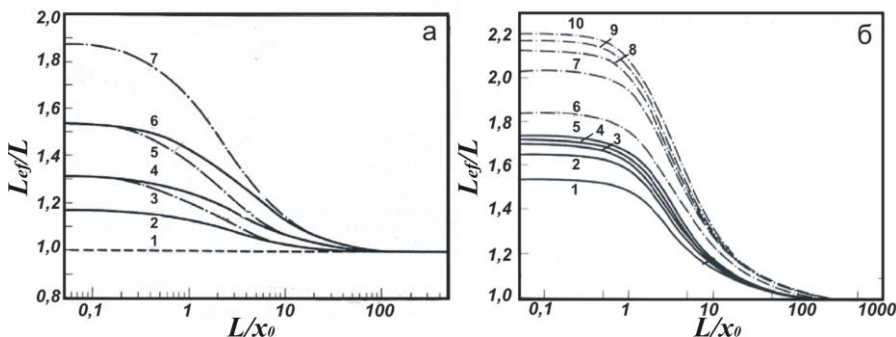


Рис. 4.1. Залежність  $L_{ef}/L$  від  $L/x_0$  для пасток з експонентним розподілом рівнів за енергією і у просторі (співвідношення 1.1), при  $l=2$  (а); гауссівським розподілом рівнів за енергією і у просторі (співвідношення 1.2) (б) [17]:  $S(x)=1$  (1);  $A=0,5$  (2);  $A=1$  (3);  $A=2$  (4);  $B=0,5$  (5);  $B=1$  (6);  $B=2$  (7); (а)  $C_1=1, C_2=1$ :  $m=1$  (1);  $m=2$  (2);  $m=3$  (3);  $m=4$  (4);  $m=5$  (5); (б)  $C_1=2, C_2=2$ :  $m=1$  (6);  $m=2$  (7);  $m=3$  (8);  $m=4$  (9);  $m=5$  (10); (б)

З графіків видно, що суттєве відхилення відношення  $L_{ef}/L$  від одиниці проявляється тільки в області, де товщина зразка  $L$  мала. Це означає, що вплив неоднорідності просторового розподілу ЛС найбільш сильно проявляється в зразках з малою товщиною, тобто в плівках. Тому для більш точного визначення параметрів пасток у тонких шарах напівпровідників обов'язково необхідно враховувати їх просторову неоднорідність.

Слід відмітити, що оскільки функції  $S(x)$  у виразах (4.1)-(4.2) не нормовані на одиницю, отримані авторами [17] залежності скоріше відображають зміну середньої концентрації ЛС

$$\langle S \rangle = \frac{1}{L} \int_0^L S(x) dx$$

від параметрів розподілів, ніж вплив неоднорідності просторового розподілу пасток на остаточні результати. ВАХ структур з об'ємними та приповерхневими ЛС з перших принципів для деяких часткових випадків розраховані в [112].

Експериментально, присутність пасток, розподілених у просторі, у плівках органічних напівпровідників, була підтверджена у [40]. Као і Хуанг вимірювали ВАХ конденсатів антрацену залежно від їх товщини. Плівки розміщували між двома срібними електродами, отриманими нанесенням на скляну підкладку у вакуумі при  $T = 333$  К. Аналіз ВАХ свідчить, що густина струму  $j$  через зразки була пропорційною  $U^3$ . Це вказує на експоненціальний розподіл пасток за енергією всередині ЗЗ матеріалу, при цьому параметр  $l$  виявився рівним 2. Оскільки залежність  $j$  від  $L$  виявилася нелінійною, автори пов'язують це з просторовою неоднорідністю зразків.

#### **4.3. Вплив просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів ЛС методом аналізу ВАХ СОПЗ**

Електричні властивості напівпровідникових матеріалів у значній мірі визначаються присутністю глибоких пасток, здат-

них захоплювати вільні носії заряду. Дослідження ЛС у ЗЗ цих речовин є актуальною науковою задачею, оскільки вони зумовлюють такі важливі параметри матеріалу, як час життя носіїв заряду, їх довжину вільного пробігу та інше, а отже, і експлуатаційні характеристики напівпровідникових приладів таких, наприклад, як сонячні елементи, фотодетектори створених на їх основі.

Як вказувалося, для дослідження ЛС у високоомних матеріалах в наш час широко використовується метод, заснований на аналізі ВАХ в режимі СОПЗ [97, 100, 103, 113]. Так ZnTe та CdS були одними з перших матеріалів, у яких спостерігалися інжекційні струми [1]. При цьому інформацію про параметри глибоких пасток одержують шляхом порівняння експериментальних ВАХ СОПЗ з кривими, розрахованими теоретично у припущенні, що в напівпровіднику присутні деякі модельні розподіли ЛС [1, 17]. При інтерпретації ВАХ СОПЗ також вважається, що зразки, які вивчаються, є просторово однорідними [1]. Це припущення є придатним у випадку монокристалічних об'ємних матеріалів, але не може бути використане для полікристалічних або аморфних плівок, одержаних вакуумною конденсацією або іншими методами. У цьому випадку біля підкладки формується перехідний шар з підвищеною кількістю дефектів, які можуть виступати пастками. Саме такий механізм росту, наприклад, є характерним для конденсації плівок сполук  $A_2B_6$  на неорієнтованих підкладках [114, 115].

До просторової неоднорідності зразків можуть також приводити операції, пов'язані з їх післяростовою обробкою, як то відпал, травлення та інше. Такі процедури є звичайними при одержанні сонячних елементів, фотодетекторів та інших приладів електроніки на основі гетеропереходів [116].

Нарешті, додаткові ЛС обов'язково виникають на міжфазних поверхнях напівпровідник-метал або напівпровідник-

напівпровідник, які є обов'язковим елементом приладових структур [126]. Наприклад, приповерхневі стани з концентрацією яка може досягати  $10^{11} - 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , виникають у гетеропереходах на основі сполук  $\text{A}_2\text{B}_6$  [126].

Таким чином, оскільки вимірювання параметрів пасток у напівпровідниковому матеріалі проводиться у багатошаровій структурі, нехтування приповерхневими станами, як це робиться у класичних роботах [1, 97, 100, 103, 113], є фізично неприпустимим. Напівпровідникові плівки, що досліджуються, майже завжди є просторово неоднорідними. Це може істотно змінити вигляд кривих струм-напруга і привести до некоректності у визначенні параметрів ЛС з ВАХ СОПЗ.

У зв'язку з цим, у даній главі нами аналізується вплив неоднорідності просторового розподілу пасток на вигляд ВАХ СОПЗ та надійність визначення параметрів ЛС з них у напівпровідникових шарах.

#### **4.4. ВАХ СОПЗ неоднорідних матеріалів**

Рівняння, що описують ВАХ СОПЗ плоско-паралельних напівпровідникових зразків з пастками та струмознімальними електродами, один з яких забезпечує інжекцію носіїв заряду в матеріал, можуть бути одержані шляхом сумісного розв'язку системи рівнянь (1.12) - (1.13) [1]:

В подальшому всіма доданками у співвідношенні (1.13), окрім тих, що містять  $n_t$ , будемо нехтувати, що виправдано в режимі СОПЗ, тоді  $n_s(x) \sim \sum_j n_{t_j}(x)$ .

У більшості досліджень [1, 97, 100, 103, 113] просторовий розподіл пасток у напівпровідниках вважається однорідним, тоді з рівнянь (1.12) та (1.13), у випадку, коли  $h(E, x) = h(E)$ , можна отримати наступні співвідношення для розрахунку ВАХ СОПЗ гомогенних зразків [117]:



$$n_f(L) = \frac{jL}{e\mu\alpha U}, \quad (4.4)$$

$$n_s^h(L) = \frac{\alpha\beta\varepsilon\varepsilon_0 U}{eL^2}, \quad (4.5)$$

де  $n_f^h(L)$  – концентрація вільних носіїв на аноді;  $n_s^h(L)$  – повна концентрація інжекттованих носіїв захоплених у матеріалі поблизу анода;  $\alpha$  – коефіцієнт, що враховує відмінність напруженості електричного поля поблизу анода від її середнього значення в зазорі між електродами;  $\beta$  – коефіцієнт, що враховує відмінність  $n_s^h(L)$  поблизу анода від середнього значення в зазорі між електродами.

Повна концентрація носіїв у матеріалі може бути визначена із співвідношення  $n_s^h(L) = \int_E n_s^h(E, L) dE$ . У подальшому будемо використовувати низькотемпературне наближення [74, 105], тоді функція Фермі – Дірака може бути замінена на функцію Хевісайда і  $n_s(E, L) \sim h(E, L)$ .

Як правило, при розрахунках ВАХ коефіцієнти  $\alpha$  та  $\beta$  у співвідношеннях (4.4) та (4.5) приймають сталими [65, 117], але більш точна теорія [118] свідчить, що вони є функціями густини струму та напруги

$$\alpha = 2 - \gamma, \quad (4.6)$$

$$\beta = \frac{(1 - \gamma)(2 - \gamma) + \gamma'}{(2 - \gamma)}, \quad (4.7)$$

У подальшому другою похідною  $\gamma'$ , яка є суттєво меншою ніж перша  $\gamma$  [105], будемо нехтувати, тоді  $\beta = 1 - \gamma$ . Оскільки похідна  $\gamma$  в режимі СОПЗ при збільшенні напруги зміщення  $U$ , прикладеної до зразка, змінюється від 0,5 до 0, легко побачити з

співвідношень (4.6) - (4.7), що ці параметри на квадратичній ділянці ВАХ набувають значень  $\alpha = 1,5$ ,  $\beta = 0,5$ , в той час як у матеріалі з повністю заповненими пастками  $\alpha \rightarrow 2$ ,  $\beta \rightarrow 1$ .

Для врахування просторової неоднорідності зразків будемо вважати, що функцію, яка описує розподіл пасток, можна розбити на дві частини, що залежать тільки від енергії та просторової координати  $h(E, x) = h(E) \cdot S(x)$ , де  $h(E)$  – функція, що описує енергетичний, а  $S(x)$  – просторовий розподіл пасток. У цьому випадку, як показано у [17], для довільного енергетичного розподілу ЛС може бути записаний закон подібності

$$\frac{j}{L} \left( \frac{L}{L_{ef}} \right) = f \left[ \frac{U}{L^2} \left( \frac{L}{L_{ef}} \right)^2 \right], \quad (4.8)$$

де  $L_{ef}$  – ефективна товщина зразка.

З співвідношення (4.8) випливає, що напівпровідник з неоднорідним просторовим розподілом пасток є еквівалентним матеріалу з однорідним розподілом ЛС, якщо дійсну товщину зразка замінити деякою ефективною.

Ефективна товщина для напівпровідника з пастками, розподіленими за енергією експоненціально, або на «хвостах» розподілів іншого виду, з використанням коефіцієнтів  $\alpha$  і  $\beta$  визначається наступним чином:

$$L_{ef} = \left[ (2 - \gamma) \int_0^L \left( \int_0^z S(x) dx \right)^{1-\gamma} dt \right]^{(2-\gamma)^{-1}} = \left[ \alpha \int_0^L \left( \int_0^z S(x) dx \right)^\beta dt \right]^{\alpha^{-1}} \quad (4.9)$$

Легко показати, що у випадку просторово однорідних матеріалів, коли  $S(x) = const = 1$ , їх ефективна товщина співпадає з дійсною

$$L_{ef} = \left[ \alpha \int_0^L \left( \int_0^z S(x) dx \right)^\beta dt \right]^{\alpha^{-1}} = L \quad (4.10)$$

Як нами було показано у [114], з урахуванням неоднорідності напівпровідника за об'ємом, у випадку експоненціальних енергетичних розподілів, або на «хвостах» розподілів іншого вигляду співвідношення (4.4) та (4.5) набудуть вигляду:

$$j = e \mu n_f^{inh}(L) \frac{\alpha U}{L} \frac{L}{L_{ef}} \langle S \rangle^\beta = e \mu n_f^{inh}(L) \frac{\alpha U}{L} \delta_1, \quad (4.11)$$

$$n_s^{inh}(L) = \frac{\alpha \beta \varepsilon \varepsilon_0 U}{e L^2} \left( \frac{L}{L_{ef}} \right)^2 \langle S \rangle^{\beta-1} = \frac{\alpha \beta \varepsilon \varepsilon_0 U}{e L^2} \delta_2, \quad (4.12)$$

де  $n_f^{inh}(L)$  – концентрація вільних носіїв на аноді у випадку неоднорідного матеріалу;  $n_s^{inh}(L)$  – повна концентрація вільних носіїв на аноді;  $\langle S \rangle = \int_0^d S(x) dx / L_{ef}$  – усереднене за товщиною шару значення функції просторового розподілу.

Можна побачити, що співвідношення (4.11) та (4.12) відрізняються від аналогічних виразів (4.4), (4.5), одержаних в припущенні просторової однорідності матеріалу, присутністю корегувальних коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$ .

Коефіцієнти  $\delta_1$  та  $\delta_2$  можуть бути розраховані із використанням наступних співвідношень

$$\delta_1 = \frac{L}{L_{ef}} \left( \frac{\int_0^L S(x) dx}{L_{ef}} \right)^\beta = \frac{L}{L_{ef}} \langle S \rangle^\beta, \quad (4.13)$$

$$\delta_2 = \left( \frac{L}{L_{ef}} \right)^2 \left( \frac{\int_0^L S(x) dx}{L_{ef}} \right)^{\beta-1} = \left( \frac{L}{L_{ef}} \right)^2 \langle S \rangle^{\beta-1}, \quad (4.14)$$

де  $\langle S \rangle$  – усереднена за товщиною зразка концентрація пасток.

При цьому для просторово однорідних зразків  $\delta_1 = \delta_2 = 1$ .

З використання виразів (1.9), (4.11) та (4.12), у низькотемпературному наближенні [74, 105], легко отримати основні співвідношення методу ІС для випадку негомогенних зразків

$$h^{inh}(E_F, L) \approx \frac{dn_i}{dE_F} = \delta_2 \left[ \frac{(2\gamma - 3)\gamma' + \gamma''}{(2 - \gamma)(1 - \gamma) + \gamma'} + \gamma \right] (2 - \gamma) \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{eL^2} U \approx \quad (4.15)$$

$$\approx \delta_2 (1 - \beta) \alpha \frac{1}{kT} \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{eL^2} U = \delta_2 h^h(E_F, L),$$

$$E_F^{inh}(L) = kT \ln \frac{jL}{\alpha e \mu N_{C(V)}} + kT \ln \frac{1}{\delta_1} = E_F^h(L) - kT \ln \delta_1, \quad (4.16)$$

де  $h^h(E_F, L)$ ,  $h^{inh}(E_F, L)$  та  $E_F^h(d)$ ,  $E_F^{inh}(d)$  – функції, що описують розподіл пасток за енергіями у випадку просторово однорідних та неоднорідних шарів.

Таким чином, задача врахування впливу існування розподілу ЛС за товщиною зразків зводиться до визначення параметрів  $\delta_1$  та  $\delta_2$  в залежності від вигляду функції  $S(x)$ .

#### 4.5. Врахування приповерхневих станів, розташованих поблизу однієї поверхні зразка

Нами проведений розрахунок ВАХ СОПЗ та корегувальних коефіцієнтів  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  для найбільш реалістичних енергетичних та просторових розподілів пасток у напівпровідникових сполук

$A_2B_6$  (ZnTe, CdTe, ZnS, ZnSe та ін.). Енергетичний розподіл ЛС у 33 матеріалу описувався експоненціальною або гауссівською функцією, оскільки саме такі розподіли, як правило, спостерігаються у полікристалічних та аморфних плівках напівпровідників, одержаних різними методами [1, 17, 42, 100]. Вважалося також, що матеріал є просторово неоднорідним та містить об'ємні пастки, концентрація яких є сталою за товщиною зразка, і приповерхневі пастки з максимумом густини на одному з електродів. Розподіл ЛС за товщиною тоді може бути описаний функцією виду

$$S(x) = S_0 + S_1 \exp(-x/r_1), \quad (4.17)$$

або

$$S(x) = S_0 + S_1 \exp((x-L)/r_2) \quad (4.18)$$

де  $S_0$  – описує вклад об'ємних;  $S_1$  – приповерхневих ЛС на інжектувальному (катоді) або колектувальному (аноді) електродах відповідно;  $r_1, r_2$  – параметри просторового розподілу приповерхневих станів.

Відповідні розподіли наведені на рис. 4.2. Нами розглянуті випадки: коли матеріал є однорідним зі сталою концентрацією об'ємних пасток (рис. 4.2. крива 1); ЛС присутні тільки на поверхні зразка, а об'ємні пастки відсутні (криві 2, 3); і нарешті найбільш загальний випадок, коли присутні як об'ємні так і приповерхневі ЛС (криві 4, 5).

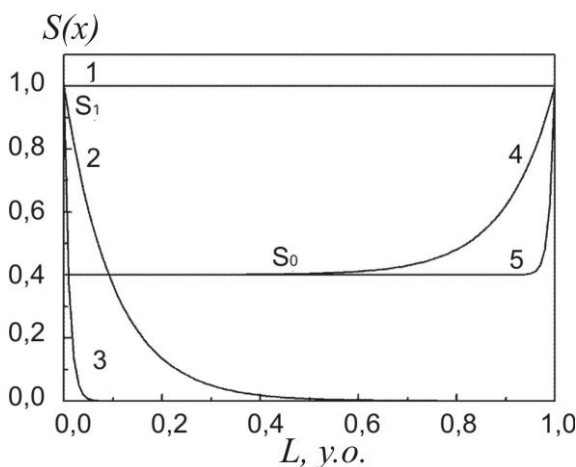


Рис. 4.2. Просторовий розподіл ЛС, що враховує присутність об'ємних ( $S_0$ ) та приповерхневих станів ( $S_l$ ) на катоді (2, 3) або аноді (4, 5). Наведені випадки: 1 –  $L/r \rightarrow 0$ , – матеріал є однорідним; 2 –  $L/r = 10$ ; 3 –  $L/r = 100$  – ЛС присутні тільки на поверхні зразка:  $S_0=0$  – об'ємні пастки відсутні; 4 –  $L/r = 10$ ; 5 –  $L/r = 100$  – ЛС присутні тільки на поверхні зразка:  $S_0 = 0,4$

У подальшому будемо вважати, що технологія обробки обох поверхонь зразка однакова, тому сталі  $r_1 = r_2 = r$  і не залежать від товщини шару напівпровідника. Такий опис просторового розподілу пасток дозволяє розглянути весь спектр фізично можливих ситуацій. Дійсно, у випадку, якщо  $L \ll r$ , глибокі пастки майже однорідно розподілені за товщиною матеріалу, таким чином він може вважатися однорідним (рис.4.2 крива 1). Якщо  $L \gg r$ , маємо ЛС, розташовані безпосередньо на поверхні напівпровідника (рис.4.2 криві 3, 5).

При розрахунках коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$  функція  $S(x)$  нормувалася нами на одиницю:  $S(x) = S_0 + S_l = 1$ . При цьому параметри  $S_0$  та  $S_l$  вибиралися із наступних міркувань. Звичайно концентрація об'ємних пасток у сполуках  $A_2B_6$  становить  $N_i = 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$  [1, 100, 103, 113]. Якщо вважати, що в поверхневому шарі мате-

ріалу товщиною 10 нм виникає одна пастка на  $10^4$ - $10^5$  атомів, отримуємо загальну концентрацію приповерхневих станів  $10^{16}$ - $10^{17}$   $\text{см}^{-3}$ . Таким чином, відношення концентрації приповерхневих пасток до концентрації об'ємних може досягати  $10^3 - 10^4$ . Моделювання проводилося для двох крайніх випадків  $\alpha = 1,5$ ,  $\beta = 0,5$  та  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$ , що відповідає зміні кута нахилу ВАХ СОПЗ в інтервалі  $0,5 \leq \gamma \leq 0$ . Це дозволило охопити весь спектр можливих енергетичних розподілів пасток у напівпровідниках – від моноенергетичних до однорідних. При моделюванні як і раніше були використані значення параметрів глибоких станів і фізичні константи, які є характерними для напівпровідників групи  $A_2B_6$  (ZnTe, CdTe, та ін.) [119]. Одночасно, для вибраних енергетичних та просторових розподілів пасток, за допомогою співвідношень (1.12), (1.13), (4.4)-(4.6) проводився розрахунок ВАХ СОПЗ. У цьому випадку енергетичний розподіл пасток задавався гауссівською функцією виду

$$h(E) = \frac{N_t}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{E - E_t}{\sqrt{2}\sigma}\right)^2, \text{ де } \sigma - \text{півширина розподілу. При}$$

моделюванні враховувалася зміна нахилу кривих струм-напруга в подвійних логарифмічних координатах і, відповідно, коефіцієнтів  $\alpha$  та  $\beta$  в процесі заповнення пасток розподілених за енергією. Для цього використовувалося наступне співвідношення [74]

$$d(\ln n_s^h(E, x)) / d(-(E_F(x)/kT)) = \gamma / (1 - \gamma). \quad (4.19)$$

Типові ВАХ СОПЗ, отримані для зразків з неоднорідним та однорідним розподілом пасток наведені на рис. 4.3.

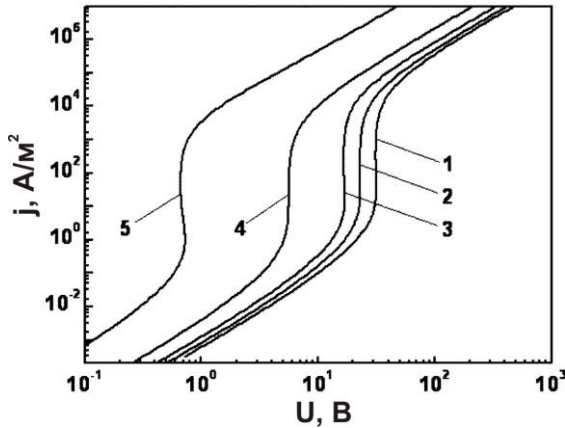


Рис. 4.3. Вольт-амперні характеристики, розраховані для однорідних та неоднорідних за товщиною плівок ZnTe: 1 – однорідний розподіл пасток; максимум концентрації поверхневих станів на катоді ( $2 - d/r=1$ ,  $4 - d/r=10$ ); на аноді (3 –  $d/r=1$ , 5 –  $d/r=10$ ). Наведені розрахунки для випадку  $S_1/S_0 = 10^3$ . Енергетичний розподіл пасток описується функцією Гауса  $h(E) = N_t / \sigma(2\pi)^{1/2} \cdot \exp(-(E - E_t) / \sqrt{2}\sigma)^2$ , де  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_t = -0,57 \text{ еВ}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ еВ}$ ,  $T = 300 \text{ К}$ .

Як свідчать розрахунки, неоднорідність розподілу пасток за товщиною зразка приводить до суттєвої зміни напруги повного заповнення пасток  $U_{TFL}$  і відповідно великих похибок у визначенні дійсної концентрації ЛС, оскільки  $N_t \sim U_{TFL}$ . Ці похибки зростають у випадку, коли максимум просторового розподілу пасток знаходиться поблизу анода. На величину стрибка струму на ВАХ СОПЗ просторовий градієнт концентрації ЛС впливає слабо. Відповідно, глибина залягання пасток визначається з невеликою похибкою.

Результати моделювання свідчать, що в деякому діапазоні напруги, струм через просторово неоднорідний зразок суттєво залежить від полярності напруги зміщення. Виникає ситуація, при якій у випадку симетричної структури метал-напівпровідник-метал можуть спостерігатися асиметричні ВАХ.



Подібні ВАХ СОПЗ спостерігалися у цілому ряді експериментальних досліджень [1, 17, 112], а також нами для структур Cr/ZnTe/Cr [120-122]. Проведені розрахунки свідчать, що ця асиметрія може бути обумовлена просторовою неоднорідністю зразків, пов'язаною з особливостями їх механізму росту, а також різними режимами одержання струмознімальних контактів до напівпровідника і відповідно, різною концентрацією пасток на міжфазній границі.

Різний вплив приповерхневих ЛС, розташованих поблизу катода та анода, на напругу заповнення пасток  $U_{TFL}$  і, відповідно, вигляд ВАХ СОПЗ може бути пояснений з використанням наступних міркувань. Зразок з приповерхневими пастками, в який здійснюється монополярна інжекція носіїв, може розглядатися як плоский конденсатор, що заряджається напругою зміщення. Ємність пристрою визначається просторовим розподілом пасток. Якщо пастки розташовані поблизу катода, ємність конденсатора мала, оскільки  $C \sim L^{-1}$ , відповідно зовнішня напруга, необхідна для заповнення цих пасток, є великою ( $U_{TFL} \sim C^{-1}$ ). Іншими словами, заряд не інjektується у об'єм зразка, поки прикладена напруга не приведе до заповнення всіх приповерхневих пасток, і ця напруга є великою (рис. 4.3, криві 2, 4).

Якщо приповерхневі ЛС розташовані поблизу анода, ємність конденсатора, що утворюється зарядженими пастками, навпаки, є великою, оскільки  $L \rightarrow 0$ . Відповідно заповнення цих пасток відбувається вже при малій напрузі зміщення (рис. 4.3, криві 3, 5). Зміна стану пасток при цьому слабо впливає на електростатику структури і не запобігає інжекції носіїв у об'єм матеріалу, тому провідність структури визначається монополярною інжекцією у об'єм напівпровідника. Різниця у заповненні пасток, розташованих біля різних електродів, безпосередньо пояснює асиметрію ВАХ СОПЗ неоднорідних зразків.

Більш повну картину впливу просторової неоднорідності матеріалу на надійність визначення параметрів пасток з ВАХ дають результати розрахунку коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$ , які наведені на рис.4.4 - 4.5.

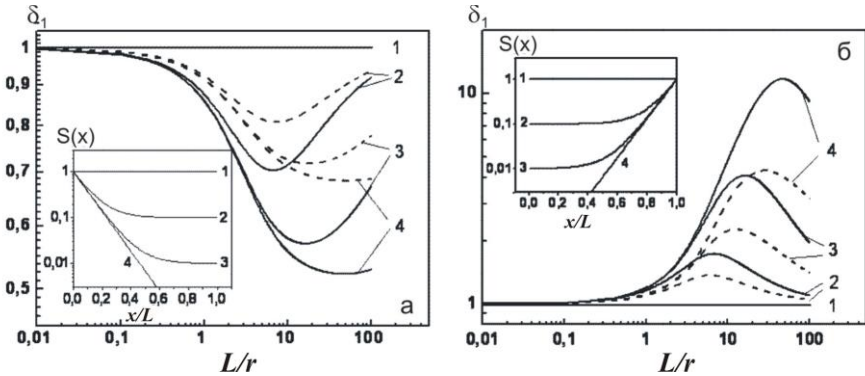


Рис. 4.4. Коефіцієнт  $\delta_1$  розрахований для різних відносних внесків об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а) та аноді (б): 1 –  $S_1/S_0 = 0$ ; 2 –  $S_1/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^2$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha = 1,5$ ,  $\beta = 0,5$ ; суцільні лінії  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$ . На вставці наведені просторові розподіли, для яких проведені розрахунки ( $L/r = 10$ )

Як ми бачимо, залежності  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  від  $L/r$  мають вигляд кривих з максимумом. Це пов'язано з тим, що при збільшенні відношення  $L/r$  розподіл пасток спочатку стає все більш неоднорідним за товщиною зразка, а потім знову наближається до однорідного, але вже при іншій концентрації пасток. Відповідно, корегуючи коефіцієнти  $\delta_1$  та  $\delta_2$  спочатку збільшуються, а потім зменшуються.

Коефіцієнт  $\delta_1$  дозволяє знайти похибку визначення глибини залягання ЛС  $\Delta E$  у ЗЗ напівпровідникового матеріалу.

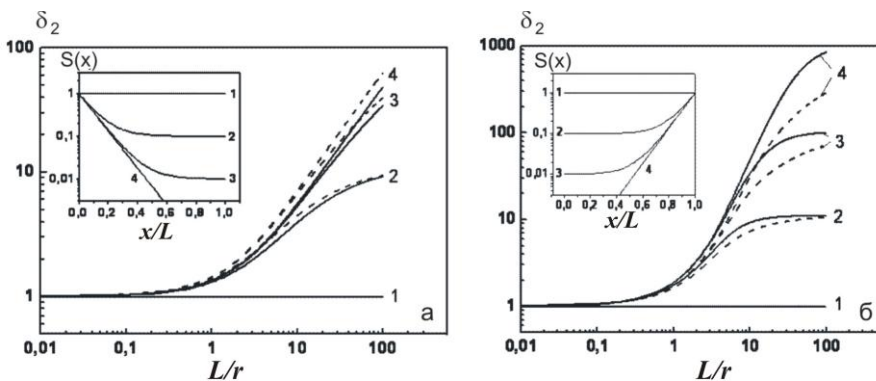


Рис. 4.5. Коефіцієнт  $\delta_2$ , розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а) та аноді (б): 1 –  $S_1/S_0=0$ ; 2 –  $S_1/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^2$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha=1,5$ ,  $\beta=0,5$ ; суцільні лінії  $\alpha=2$ ,  $\beta=1$ . На вставці наведені просторові розподіли, для яких проведено розрахунки ( $L/r=10$ )

Порівнявши співвідношення (4.4), (4.11) та використавши вираз (1.9) можна отримати

$$\Delta E = E_F^{inh} - E_F^h = kT \ln \delta_1. \quad (4.20)$$

Як видно з рис.4.4, якщо просторовий розподіл пасток не враховується, виникає систематичне зміщення енергетичного положення пасток. При кімнатній температурі і  $S_1/S_0 = 10^3$  це зміщення може сягати 0,01-0,015 еВ у випадку, якщо максимум концентрації поверхневих ЛС знаходиться на катоді, та 0,04-0,06 еВ, коли цей максимум знаходиться на аноді (для порівняння  $kT \sim 0,026$  еВ). Відповідно енергія залягання енергетичного рівня може бути дещо завищеною або заниженою. Похибки вимірювання положення  $E_i$  суттєво знижуються при зменшенні відношення  $S_1/S_0$  та температури дослідження ВАХ. Величина зміщення енергії залягання пасток також залежить від виду їх енергетичного розподілу і збільшується у випадку “вузьких” за енер-

гією розподілів близьких до моноенергетичних (рис.4.4). Дійсно, у цьому випадку  $\gamma \rightarrow 0$  і, відповідно,  $\alpha \rightarrow 2$ ,  $\beta \rightarrow 1$ .

Як впливає з співвідношень (4.5) та (4.12), у низькотемпературному наближенні коефіцієнт  $\delta_2$  є відношенням точного значення повної концентрації пасток на аноді до теоретично визначеної без урахування можливої неоднорідності зразків, що досліджуються,  $-h^{inh}(L)/h^h(L) \sim n_s^{inh}(L)/n_s^h(L) = \delta_2$ . Це відношення може сягати  $10^2$ - $10^3$ , відповідно таких же значень можуть досягати і похибки у визначенні  $N_t$  (рис. 4.5). Вплив просторової неоднорідності є більш вираженим, коли максимум концентрації приповерхневих станів знаходиться на аноді, а розподіл пасток є близьким до моноенергетичного.

#### 4.6. Врахування приповерхневих станів, розташованих поблизу обох поверхонь зразка

У попередньому розділі нами розглянуто випадок, коли приповерхневі ЛС розташовані лише біля однієї поверхні напівпровідникового зразка. Такий стан плівки є реальним, але може бути отриманий лише шляхом спеціальної обробки (пасивації) однієї поверхні зразка. Найбільш розповсюдженим все ж є випадок, при якому приповерхневі стани присутні біля обох поверхонь напівпровідникового матеріалу. Розподіл ЛС за товщиною тоді може бути описаний функцією виду

$$S(x) = S_0 + S_1 \exp\left(-\frac{x}{r}\right) + S_2 \exp\left(\frac{x-L}{r}\right), \quad (4.21)$$

де  $S_1$ ,  $S_2$  – приповерхневі ЛС на електродах, що інjektують та колектують носії, відповідно.

При подальших розрахунках приймалися ті ж припущення, що і раніше.

У випадку, якщо  $L \ll r_1, L \ll r_2$  та  $S_1 = S_2$ , глибокі пастки майже однорідно розподілені за товщиною зразка, таким чином він може розглядатися як просторово однорідний. Якщо  $L \gg r_1, L \gg r_2$  маємо ЛС, розташовані безпосередньо на поверхні напівпровідника. Як і раніше будемо вважати, що  $r_1=r_2=r$ . Розподіли пасток з різним відношенням  $L/r$  наведені на рис.4.6.

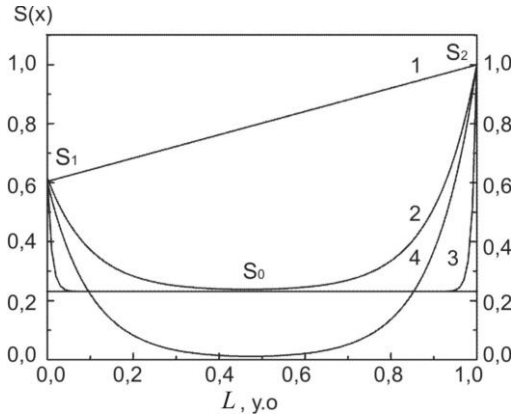


Рис. 4.6. Просторовий розподіл пасток, що враховує присутність об'ємних ( $S_0$ ) та приповерхневих станів на катоді ( $S_1$ ) та аноді ( $S_2$ ). Наведені випадки 1 -  $L \ll r$ ; 2 -  $L/r = 10, S_0 \neq 0$ ; 3 -  $L/r=100, S_0 \neq 0$  - ЛС присутні тільки на поверхні зразка; 4 -  $L/r=10, S_0=0$  - об'ємні пастки відсутні

При розрахунках розглянуті основні фізично можливі випадки: коли концентрація ЛС змінюється лінійно на міжелектродній відстані (рис. 4.6. крива 1); ЛС присутні тільки біля поверхонь зразка, а об'ємні пастки відсутні (крива 4); і нарешті найбільш загальний випадок, коли присутні як об'ємні, так і приповерхневі ЛС біля обох поверхонь зразка (криві 2, 3).

При розрахунках коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$  функція  $S(x)$  нормувалася нами на одиницю  $S(x)=S_0+S_1+S_2=1$ . Знову, як і раніше розрахунки проводилися для двох крайніх випадків  $\alpha = 1,5, \beta = 0,5$  та  $\alpha = 2, \beta = 1$ , які відповідають моноенергетичним та рівномір-

но розподіленим за енергією пасткам. Типові ВАХ СОПЗ зразків з неоднорідним та однорідним просторовим розподілом пасток наведені на рис. 4.7 [115].

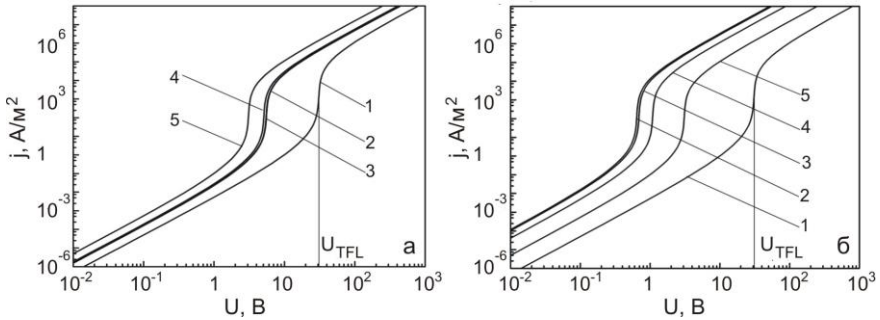


Рис. 4.7. ВАХ, розраховані для однорідних (1) та неоднорідних ( $d/r=10$ ) за товщиною плівок ZnTe: максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а): 2 –  $S_2/S_0 = 0$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 3 –  $S_2/S_0 = 10$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 4 –  $S_2/S_0 = 10^2$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 5 –  $S_2/S_0 = 10^3$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; максимум концентрації приповерхневих станів на аноді (б): 2 –  $S_1/S_0=0$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10$ ,  $S_2/S_0 = 10^3$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^2$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 5 –  $S_1/S_0=10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10^3$ . Енергетичний розподіл пасток описується функцією Гауса з параметрами:  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_t = -0,57 \text{ eV}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ eV}$ ,  $T = 300 \text{ K}$

З співвідношень (4.11), (4.12) випливає, що похибки визначення параметрів пасток в просторово неоднорідних зразках визначаються величиною, усередненої за товщиною зразка густиною ЛС. Тому нами проводився розрахунок цих величин в залежності від різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. Відповідні залежності наведені на рис. 4.8. та 4.9.

Все ж найбільш повну картину впливу неоднорідності матеріалу на надійність визначення параметрів пасток дають результати розрахунку коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$ , що наведені на рис. 4.10,

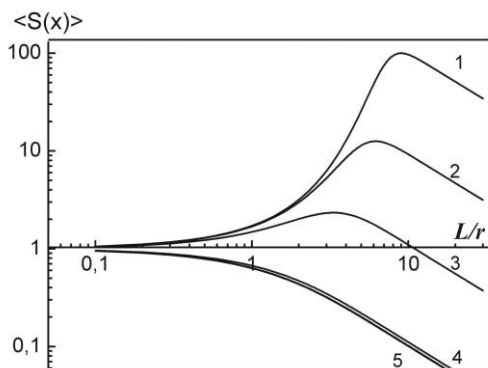


Рис. 4.8. Усреднена за товщиною зразка густина ЛС, що розрахована для різних відносних вкладів приповерхневих станів на інжектувальному та колектувальному контактах. При розрахунках вважалося, що об'ємні пастки відсутні:  $S_0 = 0$ . 1 –  $S_1/S_2 = 10^3$ , 2 –  $S_1/S_2 = 10^2$ ; 3 –  $S_1/S_2 = 10$ ; 4 –  $S_2/S_1 = 10$ ; 5 –  $S_2/S_1 = 10^3$

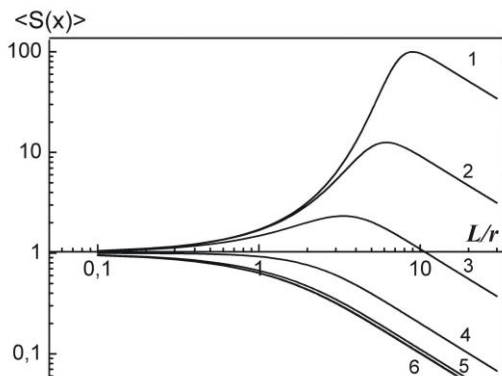


Рис. 4.9. Усреднена за товщиною зразка густина глибоких пасток, що розрахована для різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. 1 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2 = 0$  (приповерхневі стани тільки на інжектувальному електроді); 2 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10^2$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10^3$ ; 5 –  $S_2/S_0 = 10^3$ ,  $S_1/S_0 = 10^2$ ; 6 –  $S_2/S_0 = 10^3$ ,  $S_1 = 0$  (приповерхневі стани тільки на колектувальному електроді)

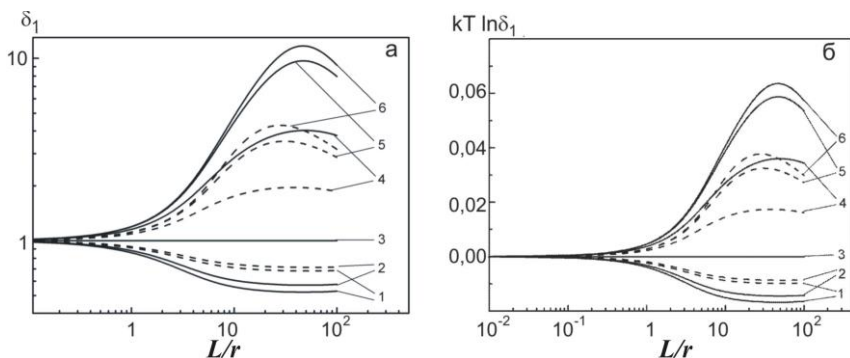


Рис. 4.10. Коефіцієнт  $\delta_1$  та  $\Delta E = kT \ln \delta_1$ , розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації станів на катоді (а): 1 –  $S_2/S_0=0$ ,  $S_1/S_0=10^3$ ; 2 –  $S_2/S_0=10^2$ ,  $S_1/S_0=10^3$ ; 3 –  $S_2/S_0=10^3$ ;  $S_1/S_0=10^3$  та аноді (б): 4 –  $S_1/S_0=10^2$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 5 –  $S_1/S_0=10$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 6 –  $S_1/S_0=0$ ;  $S_2/S_0=10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha=1,5$ ;  $\beta=0,5$ ; суцільні лінії  $\alpha=2$ ,  $\beta=1$

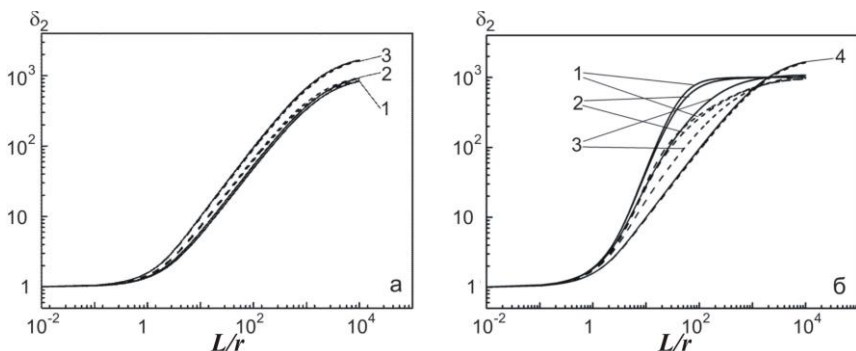


Рис. 4.11. Коефіцієнт  $\delta_2$ , розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації станів на катоді (а): 1 –  $S_1/S_0=0$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 2 –  $S_1/S_0=10$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 3 –  $S_1/S_0=10^2$ ,  $S_2/S_0=10^3$ ; 4 –  $S_1/S_0=10^3$ ,  $S_2/S_0=10^3$  та аноді (б): 1 –  $S_2/S_0=0$ ,  $S_1/S_0=10^3$ ; 2 –  $S_2/S_0=10$ ,  $S_1/S_0=10^3$ ; 3 –  $S_1/S_0=10^2$ ,  $S_1/S_0=10^3$ ; 4 –  $S_2/S_0=10^3$ ,  $S_1/S_0=10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha=1,5$ ;  $\beta=0,5$ ; суцільні лінії  $\alpha=2$ ,  $\beta=1$



4.11. Розрахунки зміщення положення ЛС у ЗЗ матеріалу при кімнатній температурі наведені на рис. 4.10 б.

Як свідчить аналіз отриманих результатів, присутність приповерхневих станів біля обох поверхонь зразка приводить до ефектів, подібних розглянутим раніше, коли ЛС були присутні лише поблизу однієї поверхні, але є і деякі відмінності. Так з рис 4.10 видно, що відбувається ефект своєрідної компенсації впливу приповерхневих ЛС, розташованих поблизу аноду та катоду. У міру наближення концентрації пасток на аноді до концентрації на катоді, коефіцієнт  $\delta_1$  зменшується, відповідно зменшується похибка у визначенні енергетичного положення пасток. Для симетричної структури, де концентрації пасток на обох поверхнях однакові, ця похибка відсутня. Аналогічний ефект спостерігається і для коефіцієнта  $\delta_2$ .

## ГЛАВА 5

### КЛАСИФІКАЦІЯ МЕХАНІЗМІВ ЗАРЯДОПЕРЕНЕСЕННЯ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

#### 5.1 Ідентифікація механізму зарядоперенесення в досліджуваних структурах

Одним з основних факторів, який ускладнює одержання достовірної інформації про параметри ЛС у 3З напівпровідників методом ВАХ СОПЗ, є присутність цілого ряду конкуруючих і супутніх монополярній інжекції механізмів зарядоперенесення (подвійна інжекція, бар'єрна електропровідність, польова іонізація рівнів, джоулів розігрів і т. інше), які приводять до якісно ідентичних залежностей струм – напруга: степеневі за напругою ділянки, які розділяються стрибками струму ( $I \sim U^\eta$ , де  $\eta \geq 2$ ). Більш того монополярна інжекція носіїв із контакту може відбуватися у інтервалі напруженості полів ( $E_e = 10^4 - 10^6$ ) В/м де проявляється цілий ряд високопольових процесів (ефект Френкеля, Пула, Шоткі та інше), які маскують або змінюють особливості експериментальних ВАХ. Наряду з об'ємними механізмами зарядоперенесення струм у зразках можуть визначати також контактні явища на границі розділу метал – напівпровідник, оскільки досліджувані об'єкти є багат шаровими. В результаті коректна інформація про енергетичну структуру напівпровідників під час аналізу ВАХ з використанням математичного апарату теорії ІС може бути одержана тільки при однозначному визначенні механізму зарядоперенесення у досліджуваних структурах як СОПЗ. Така ідентифікація у загальному випадку є досить трудомісткою і, як правило, при обробці ВАХ СОПЗ не проводиться.

У ряді робіт визначення механізму зарядоперенесення, який обумовлює протікання наскрізного струму через зразки на осно-

ві плівок сполук  $A_2B_6$  (CdTe) здійснювалося як шляхом дослідження залежності густини струму і координат характерних точок ВАХ від міжелектродної відстані [17] так і за допомогою методу ІС, розробленого у межах узагальненої теорії інжекційно-контактних явищ у напівпровідниках [24, 53-60], і ідей запропонованих у роботах [123, 124]. Метод спектроскопії дозволяє шляхом сумісного аналізу  $j-U$ ,  $\eta-U$  і  $\frac{d \lg \eta}{d \lg U} - U$  залежностей

розрізняти супутні і конкуруючі механізми зарядоперенесення у структурах, а також виділяти серед них високопольові.

При експериментальному дослідженні та ідентифікації високопольових процесів у напівпровідниках у теперішній час вироблені деякі стандартні методи аналізу результатів, які полягають у тому, що обробка даних проводиться у наперед обраному масштабі ( $\lg j - \sqrt{U}$ ,  $\lg j - U$ ,  $\lg j - \frac{1}{U}$  та ін.) [125]. Це дозволяє лінеаризувати одержані ВАХ для апріорно очікуваного механізму зарядоперенесення у зразках, що і свідчить про реалізацію саме даного механізму. Але фактично така лінеаризація залежностей струм – напруга у будь якому з відмічених масштабів може являти собою результат розкладання у ряд Тейлора функції на вузькому інтервалі зміни аргументу, що може призвести до помилкових висновків. Ще одним з недоліків такого аналізу є те, що цілий ряд високопольових механізмів проявляється практично при одних і тих самих значеннях напруженості електричного поля, що потребує наведення експериментальних даних одразу у декількох масштабах. Це ще більше ускладнює аналіз ВАХ з використанням стандартних прийомів.

Принципово інший спосіб ідентифікації високопольових процесів за експериментальними ВАХ запропоновано у роботі [123]. Для випадку дрейфового наближення і реалізації монопо-

лярної провідності авторами показано, що залежності струм – напруга для широкого класу високопольових процесів (див. таблицю 5.1) можна навести у вигляді:

$$j(U) = \begin{cases} F(\eta_0) \frac{U^{\eta_0}}{L^{\eta_0-l}} \exp\left[\frac{l}{|l|} \left(\frac{U}{U_0}\right)^l\right], & U \rightarrow 0 \\ G \frac{U^{\eta_0-l}}{L^{\eta_0-l+1}} \exp\left[\frac{l}{|l|} \left(\frac{U}{U_\infty}\right)^l\right], & U \rightarrow \infty \end{cases} \quad (5.1)$$

$$\text{Де } \eta_0 = 2 + q - t; \quad F(\eta_0) = \frac{(\eta_0 + 1)^{\eta_0}}{\eta_0^{\eta_0+1}} \frac{\varepsilon \varepsilon_0 a_{m0}}{N_m} E_1^{-q} E_3^t;$$

$$U_0 = \frac{\eta_0}{\eta_0 + 1} E_2 L; \quad G = \frac{\varepsilon \mu a_{m0}}{|l| N_m E_1^q E_2^l E_3^t}; \quad U_\infty = E_2 L = \frac{\eta_0 + 1}{\eta_0} U_0;$$

$a_{m0}$  – фактор генерації носіїв в  $c$ -зону з рівня  $m$  при  $E \rightarrow 0$ ;  $q, l, E_1, E_2, E_3$  – параметри характерні для відповідних високопольових процесів.

Розглядаючи апроксимацію залежності  $j(U)$  для випадку високої напруженості поля, легко одержати для цієї області ступінь ВАХ у подвійному логарифмічному масштабі у вигляді

$$\eta(U) = 2 + q - (t + l) + |l| \left(\frac{U}{U_\infty}\right)^l. \quad (5.2)$$

При цьому обробка будь-якої із розглянутих авторами [123] ВАХ у масштабі  $\lg \eta - \lg U$  дає для області  $\eta(U) > |2 + q - (t + l)|$  асимптотичну залежність

$$\lg\left(\frac{\eta}{|l|}\right) \approx l \lg\left(\frac{U}{U_\infty}\right). \quad (5.3)$$

Таблиця 5.1. Особливості ВАХ у випадку високопольових процесів [123]

Назва високопольового процесу	Характер ВАХ $J(U)$	Параметри апроксимації		
		$t$	$q$	$l$
Залежність перетину захвату від поля	$U^2 e^{-\beta U^2}$	0	0	+2
	$U e^{-\beta U^2}$	1	0	+2
Ефект Френкеля	$U^2 e^{\sqrt{\beta U}}$	0	-1/2	+1/2
Надбар'єрна емісія Пекара	$e^{\beta U}$	1	0	1
Ефект Шоткі	$U^{3/4} e^{\sqrt{\beta U}}$	0	-3/4	+1/2
Зміна рухливості полем	$U^2$	0	0	0
	$U$	1	0	0
Тунелювання за участю фононів	$U e^{\beta U^2}$	0	1	2
	$e^{\beta U^2}$	1	1	2
Ефект Пула (Хилла)	$e^{\beta U}$	1	0	1
Тунелювання бар'єру, автоелектронна емісія	$U^2 e^{-\beta/U}$	1	0	-1
Тунелювання зона-зона (за Маккафі)	$U^4 e^{-\beta/U}$	0	1	-1
	$U^3 e^{-\beta/U}$	1	1	-1
Тунелювання зона-зона (за Келдишем)	$U^5 e^{-\beta/U}$	0	2	-1
	$U^4 e^{-\beta/U}$	1	2	-1

Із цього виразу витікає вимірювальна формула для високовольтової асимптотики  $\eta$ :

$$l = \frac{d \lg \eta}{d \lg U} \Big|_{\eta \rightarrow \infty}, \quad U = U(\eta = |l|). \quad (5.4)$$

Фактично це означає, що у координатах  $\lg \eta - \lg U$  усі високопольові механізми будуть апроксимуватися лінійною залежністю зі значеннями  $l$  наведеними у таблиці 5.1. Виникає можливість ідентифікувати відповідні високовольтові механізми серед інших, а в деяких випадках одночасно визначити тип високопольового механізму.

Для подальшого уточнення домінуючого механізму, що визначає струм у досліджуваних структурах нами розраховувався коефіцієнт  $Q$  [24], який представляє собою відношення концентрації ефективного об'ємного заряду у зразку ( $\rho_a$ ) до ефективної концентрації носіїв ( $n_a$ ) поблизу анода. Співвідношення для визначення коефіцієнта  $Q$  одержано нами з використанням рівнянь (4.3) (4.4) і має вигляд:

$$Q = \frac{1}{\Theta} = \frac{\mu \varepsilon_0 U^2}{jL^3} \frac{(2\eta - 1)^2 (\eta - 1)(1 + B)}{\eta^3}, \quad (5.5)$$

де  $\theta$  – параметр Ламперта.

Цей вираз, на відміну від запропонованого у [24], може бути застосований для розрахунку  $Q$  у довільній точці ВАХ.

У точках екстремумів ( $\eta_{ext}$ ) на залежності  $\eta - \lg U$  це співвідношення спрощується і приймає вигляд, наведений у [24]

$$Q_{ext} = \frac{\mu \varepsilon_0 U^2}{jL^3} \frac{(2\eta - 1)^2 (\eta - 1)}{\eta^3}. \quad (5.6)$$

Необхідно відзначити, що коефіцієнт  $Q_{ext}$  введено із використанням безмодельних, співвідношень, які можуть бути застосовані для широкого класу об'ємних механізмів зарядоперенесення. Аналогічні теоретичні коефіцієнти  $Q_{ext}$ , були розраховані авторами [24] для цілого ряду найбільш важливих механізмів зарядоперенесення, які можуть реалізовуватися у реальних зразках таких як подвійна інжекція, бар'єрна електропровідність, і інші з використанням найбільш загальних моделей розподілу пасток у 33 напівпровідника. В результаті було встановлено, що коефіцієнт суттєвим чином залежить від механізму зарядоперенесення в структурі і змінюється від значень  $10^{-5}$  (для чисто плазмового режиму проходження струму) до  $10^3$  і вище для режиму СОПЗ.

На рис.5.1 наведена якісна діаграма розрахованих теоретично значень  $Q_{ext}$  для різних механізмів об'ємної електропровідності [24]. Зіставлення експериментально визначених по області екстремуму ступеня на залежності  $\eta - \lg U$  значень  $Q_{ext}$  із діаграмою, поданою на рисунку, дозволяє безпосередньо при аналізі ВАХ виключати деякі механізми зарядоперенесення в досліджуваних структурах. Оскільки коефіцієнт  $Q_{ext}$  дорівнює одиниці для лінії, що визначає граничний (безпастковий) струм монополярної інжекції при заданій геометрії структури і відомих значеннях  $\epsilon\mu$ , то всі стрибки струму, які спостерігаються на ВАХ і знаходяться нижче цієї лінії, дають значення  $Q_{ext} > 1$ , вище - дробні значення коефіцієнта дискримінації. У зв'язку з тим, що для досліджуваних систем із шаром CdTe значення струму на ділянках його швидкого зростання були менші ніж максимально можливий безпастковий струм, для уточнення механізму зарядоперенесення перевірялося виконання критеріїв реалізації механізмів ПІ і БЕ [24]:

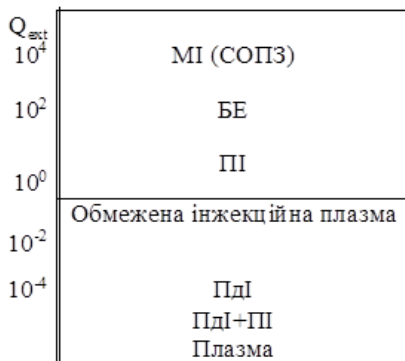


Рис. 5.1. Якісна діаграма значень коефіцієнта дискримінації у залежності від домінуючого механізму зарядоперенесення у структурі. МІ – монополярна інжекція; БЕ – бар’єрна електропровідність; ПІ – польова інжекція; ПдІ – подвійна інжекція; ПдІ + ПІ – польова іонізація при подвійній інжекції носіїв.

$$(Q_{ext})_{BE} \ll \frac{128 \eta_{ext}^{5/2} e^{\eta_{ext}/2} kT}{3 e U_{ext}^3}, \quad (5.7)$$

$$(Q_{ext})_{PI} \ll \frac{\mu \epsilon \epsilon_0 U^2}{L^3 j_{ext}} \quad (5.8)$$

Диференціальні криві  $\eta - \lg U$ , які використовувались нами разом із залежностями струм – напруга для ідентифікації механізму зарядоперенесення в структурах, були отримані нами шляхом чисельного диференціювання ВАХ у кожній експериментальній точці за допомогою ЕОМ. У програмі також було передбачене обчислення коефіцієнта дискримінації  $Q_{ext}$  у точках екстремуму залежності  $\eta - \lg U$  у відповідності до співвідношення (5.6).

## 5.2. Ідентифікація СОПЗ серед інжекційних процесів

Використання теоретичних уявлень, розвинутих у [24], дозволило нам поряд із ідентифікацією інжекційних процесів се-



ред подібних по проявам на ВАХ, провести більш тонку ідентифікацію механізму зарядоперенесення серед можливих інжекційних механізмів.

Як впливає з [24, 60], усі теоретично досліджувані авторами режими інжекції характеризуються наявністю характерних екстремумів ступеня на залежностях  $\eta - \lg U$ , а також специфічною асимптотик  $\eta(U)$  в області більш низької і більш високої напруги. Побудована в [24] діаграма, з використанням якої в роботі здійснювалася ідентифікація різних бездифузійних режимів інжекції на експериментальних ВАХ наведена на рис. 5.2.

Фіксація екстремумів ступеня ВАХ, отриманих при дослідженні плівок CdTe, а також конкретизація режиму інжекції в структурах дозволили для режимів постійного поля, значної і граничної інжекції, що були у ряді випадків реалізовані експериментально, визначити ряд об'ємних і контактних параметрів напівпровідників у відповідності з методиками описаними у [24].

При реалізації в досліджуваних зразках режиму значної інжекції в роботі визначена густина об'ємного заряду ( $\rho_a$ ) і концентрація вільних носіїв заряду ( $n_a$ ) на аноді при різних напругах. Розраховані параметри пасткових центрів, відповідальних за стрибки струму на ВАХ, проведена дискримінація вузьких і широких енергетичних розподілів у 33 напівпровідника, як за допомогою безмодельної методики (метод ІС) так і з використанням співвідношень наведених у [24]. Для точок екстремуму  $\eta$  у [24] одержані наступні рівняння, які дозволяють знайти відповідні величини:

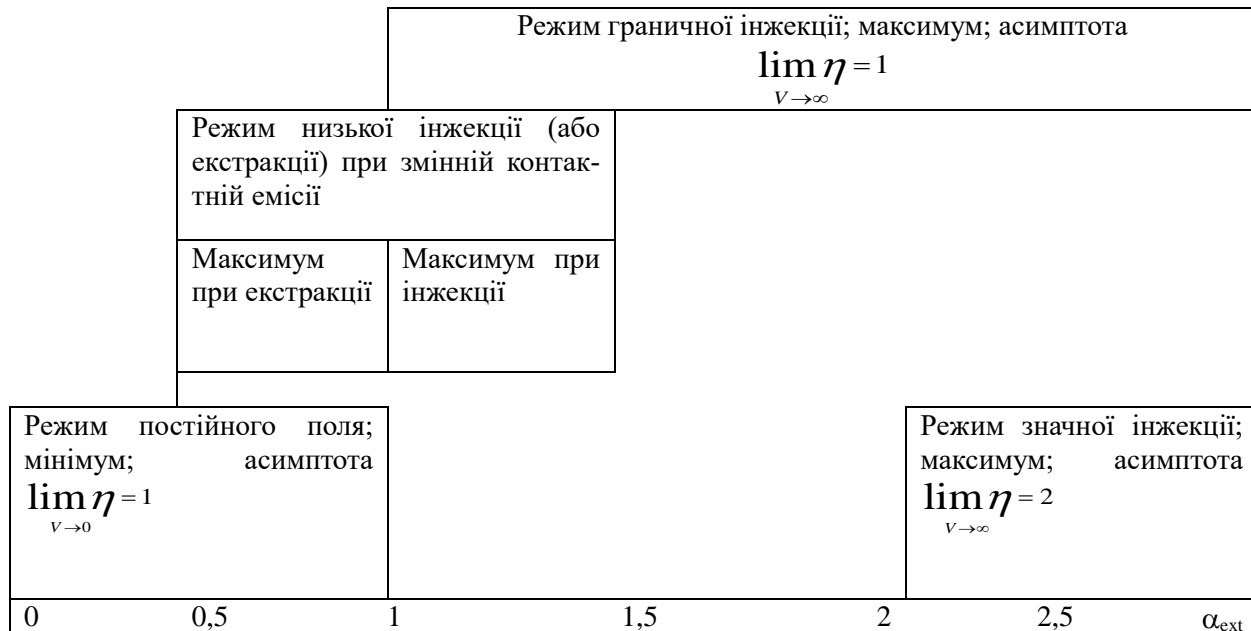


Рис.5.2. Екстремуми та асимптоти ВАХ для різних бездифузійних режимів зарядоперенесення у структурах [24].

$$n_{aext} = \frac{\eta_{ext}}{2\eta_{ext} - 1} \frac{Lj_{ext}}{e\mu SU_{ext}}, \quad (5.9)$$

$$\frac{|\rho_{aext}|}{e} = \frac{(2\eta_{ext} - 1)(\eta_{ext} - 1) \varepsilon\varepsilon_0 U_{ext}}{\eta_{ext}^2 eL^2}, \quad (5.10)$$

$$h(E) = \frac{1}{kT} \frac{a_{ext} b_{ext}}{1 - a_{ext} b_{ext} \lg a_{ext}} \frac{|\rho_{aext}|}{e}, \quad (5.11)$$

$$\Delta m = A_{ext} n_{aext}, \quad (5.12)$$

$$E_t = kT \lg \frac{N_v}{\Delta m}, \quad (5.13)$$

$$N_t^* = \frac{A_{ext} b_{ext} (1 + A_{ext})}{1 + A_{ext} (1 + B_{ext})} \frac{|\rho_{aext}|}{e}, \quad (5.14)$$

$$n_{o\bar{o}} = a_{ext} n_{aext}, \quad (5.15)$$

де  $a_{ext}$ ,  $b_{ext}$ ,  $A_{ext}$ ,  $B_{ext}$  – константи, що залежать від  $\eta_{ext}$ , розраховані в [24].

Згідно з [24] у випадку, коли величини  $n_{o\bar{o}}$ , отримані із співвідношення (5.15) і за значеннями  $\sigma$  на омичній ділянці ВАХ структур є близькими, слід вважати виявлені розподіли ЛС у зразку широкими у порівнянні з  $kT$ . При розбіжності цих величин, розподіли пасток за енергіями є досить вузькими і можуть моделюватися дельта-функціями. У цьому випадку можна ввести поправку до величини концентрації пасткових рівнів з урахуванням їхнього дозаповнення вільними носіями:

$$N_t = N_t^* \frac{1}{1 + \frac{n_{o\bar{o}}}{\Delta m}}. \quad (5.16)$$

Більш докладно методика визначення параметрів пасток з використанням співвідношень (5.9-5.15) описана у [24].

Необхідно відзначити, що методика, запропонована в [24, 57, 60] для обробки ВАХ у режимі СОПЗ при деталізації спект-

ра ЛС використовує додаткові модельні уявлення про характер розподілу пасток за енергіями, що суттєво знижує інформативність і надійність методу у даній модифікації.

Цього не відбувається при використанні методу ІС, який є безмодельним і дозволяє визначити форму розподілу пасток за енергіями безпосередньо із експериментальних ВАХ.

Для співставлення з результатами одержаними з використанням методу ІС проводилась також обробка ВАХ СОПЗ за допомогою модельних уявлень розвинутих у [17]. При цьому вважалось, що розподіл пасток є моноенергетичним або описується експоненціальною функцією. Ця методика є добре відомою і докладно описана, наприклад у [1, 17]. При розрахунках параметрів пасток використовувались наступні значення сталих речовини  $\varepsilon = 10,6$ ;  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ;  $N_C = 7,93 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Враховувалась також температурна залежність  $N_V$ ,  $N_C$

$$N_{V(C)}(T) = N_{V(C)} \sqrt{(T / 300)^3} . \quad (5.17)$$

Рухливість носіїв заряду визначалась на модельних моноенергетичних зразках методом Холла і складала  $\mu \approx 30 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

Ідентифікація контактних механізмів зарядопереносу у зразках проводилась шляхом перебудови відповідних ВАХ у масштабі  $\lg I - U$  з послідуєчим визначенням коефіцієнта ідеальності характеристики у відповідності з методикою, описаною у [126].

## ГЛАВА 6

### ДОСЛІДЖЕННЯ ТД У ПЛІВКАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ У РАМКАХ КВАЗІХІМІЧНОГО ФОРМАЛІЗМУ

#### 6.1. Класифікація дефектів у плівках сполук $A_2B_6$

Важливим фактором який визначає структурнозалежні властивості сполук  $A_2B_6$  є присутність дефектів структури різного типу, які у більшості випадків є зарядженими. Дефекти кристалічної структури звичайно поділяють на точкові, одно-, дво- та тривимірні [127]. До першого типу відносяться вакансії ( $V_A$ ,  $V_B$ ), міжвузлові атоми ( $A_i$ ,  $B_i$ ), антиструктурні дефекти ( $A_B$ ,  $B_A$ ) та домішкові атоми у вузлах ( $C_A$ ,  $C_B$ ) та міжвузлах ( $C_i$ ) кристалічної ґратки. Проте, для широкозонних матеріалах (окрім CdTe) антиструктурні дефекти не типові, і виникають головним чином під дією іонізуючого випромінювання [128]. Точкові дефекти (ТД) у халькогенних сполуках можуть бути одно та двох зарядженими. Кожний заряджений власний дефект створює у ЗЗ напівпровідника ЛС з енергією  $\Delta E_i$ , який може знаходитися як поблизу зони провідності (валентної зони) і тоді дефект є донором (акцептором), так і у її глибині і тоді він є пасткою для носіїв заряду або рекомбінаційним центром. В умовах мінімізації кількості протяжних дефектів, структурно залежні властивості халькогенідних сполук в основному визначаються їх власними ТД. Вплив пасток та рекомбінаційних центрів на електричні характеристики напівпровідникових матеріалів розглянуто у [5, 128-131]. Слід відзначити, що не зважаючи на велику кількість досліджень ТД у халькогенідах цинку та кадмію єдиної думки відносно природи електрично-активних дефектів як для області високих тисків пари металу так і халькогену не існує до нашого часу [5, 128].

До другого типу дефектів кристалічної структури відносять гвинтові та красві дислокації, які можуть знаходитися як у

об'ємі кристалітів так і утворювати малокутові границі областей когерентного розсіювання (ОКР). Третій тип включає ДП, двійники, границі зерен та поверхню кристалів та плівок. Нарешті до четвертого типу відносять пори та включення сторонньої фази (преципітати). Всі ці дефекти структури здійснюють значний вплив на фізичні характеристики реальних кристалів та плівок сполук  $A_2B_6$  створюючи у ЗЗ матеріалу наряду з ТД велику кількість ЛС з різними енергіями залягання [5].

## **6.2. Розрахунок ансамблю ТД у CdTe у рамках квазіхімічного формалізму**

### **6.2.1. Розрахунок ансамблю ТД у монокристалах CdTe**

В умовах мінімізації кількості протяжних дефектів електрофізичні та оптичні властивості плівок халькогенідів, а отже експлуатаційні характеристики приладів електроніки на їх основі, визначаються ансамблем ТД. Особливо важливою є оптимізація спектру ЛС в шарах, які використовуються як матеріал детекторів жорсткого випромінювання, фотоприймачі та сонячні елементи [5, 128].

Необхідність цілеспрямованого керування електрофізичними властивостями кристалів та плівок халькогенідів цинку та кадмію для приладового використання обумовила значний інтерес до вивчення дефектної структури цих матеріалів залежно від технологічних умов їх одержання і наступної термообробки [4, 5, 131]. Однак необхідно констатувати, що у наш час механізми дефектоутворення та спектр енергетичних рівнів ТД у ЗЗ бінарних сполук вивчені не достатньо, а ідентифікація більшості ЛС є спірною [4, 5, 128, 129, 132-134]. Особливо не визначеною є ситуація з вивченням процесів дефектоутворення у CdTe, оскільки на відміну від інших сполук цієї групи, на ряду з дефектами Шоткі та Френеля за підґратками металу і халькогена, тут можуть виникати

антиструктурні дефекти [5, 133-135]. Саме тому CdTe був основним об'єктом наших досліджень.

Розвиток уявлень про дефектну структуру сполук  $A_2B_6$  відбувається шляхом моделювання ансамблю ТД у матеріалі та порівняння отриманих результатів з експериментальними даними. Стан високотемпературної рівноваги дефектів, при цьому зазвичай, визначається на основі аналізу залежностей концентрації вільних носіїв у халькогеніді від температури відпалу зразків  $T_p$ , тиску пари компонентів сполуки при відпалі ( $P_{Cd}$ ,  $P_{Te_2}$ ), чи активності домішки (у легованому матеріалі). Розрахунок ансамблю ТД у матеріалах, як вже вказувалося, проводиться з використанням квазіхімічного формалізму.

Для дослідження рівноважного стану ансамблю ТД монокристалів CdTe при їх термічному відпалі у парах кадмію нами застосовані моделі, які на сьогоднішній день є найбільш обґрунтованими та такими, що досить добре описують експериментальні результати [4, 5, 133, 136].

Перша модель, яка використовувалась при моделюванні, відповідає традиційним уявленням про дефектну структуру CdTe [136] та включає наступні види дефектів у підґратці металу ( $Cd_i^0$ ,  $Cd_i^+$ ,  $Cd_i^{2+}$ ,  $V_{Cd}^0$ ,  $V_{Cd}^-$ ,  $V_{Cd}^{2-}$ ). Константи квазіхімічних рівнянь, що використовувались при розрахунках ансамблю ТД згідно цієї моделі взяті з [137].

Друга модель враховує можливість утворення власних дефектів як у підґратці кадмію так і телуру ( $Cd_i^{2+}$ ,  $V_{Cd}^-$ ,  $V_{Cd}^{2-}$ ,  $V_{Te}^{2+}$ ,  $Te_i^-$ ) [136, 138]. Вона запропонована Черном, а в подальшому розвинена та широко використовується при моделюванні Фочуком, Фреїком і рядом інших авторів [139-145]. Константи квазіхімічних реакцій відповідають наведеним у роботах [139, 140]. Звернемо увагу, що у цій моделі нехтують антиструктурним дефектом  $Te_{Cd}$ , хоча за даними робіт [5, 133,

135] саме цей донорний дефект ( $Te_{Cd}^+$  чи  $Te_{Cd}^{2+}$ ) є центром, який компенсує власні акцептори  $Te_i^-$  (або еквівалентні центри  $V_{Cd}^-$ ) в області високих надлишкових тисків телуру, утримуючи концентрацію дірок сталою.

Нами запропонований підхід, який дозволяє перенести акцент з вибору моделі власних дефектів в CdTe на правильне визначення їх ентальпій утворення та іонізації [146-148]. При такому підході враховуються всі можливі дефекти, які можуть існувати у матеріалі. Якщо, при цьому, константи квазіхімічних реакцій розраховані правильно, відповідна система рівнянь адекватно опише експериментальні дані. Фактично цей підхід є модельно незалежним і може бути використаний для опису стану дефектів в монокристалах та плівках CdTe, ZnTe або інших сполук  $A_2B_6$ . Раніше такий підхід не міг бути використаний у зв'язку з обмеженими можливостями комп'ютерної техніки.

Таким чином, при моделюванні дефектоутворення у CdTe в останньому випадку нами враховувався найбільш повний спектр власних ТД. Передбачалась можливість утворення дефектів з різними зарядовими станами як за аніонною так і катіонною підґратками, також враховувалося існування антиструктурного дефекту  $Te_{Cd}$  у різних зарядових станах. Єдиний дефект який не приймався до уваги -  $Cd_{Te}$ , оскільки його існування у матеріалі мало ймовірно [5, 133, 135]. Відповідно при моделюванні вважалося, що виникають такі дефекти ( $Cd_i^0, Cd_i^{2+}, V_{Te}^0, V_{Te}^+, V_{Te}^{2+}, V_{Cd}^0, V_{Cd}^-, V_{Cd}^{2-}, Te_i^0, Te_i^-, Te_{Cd}^{2+}$ ).

Легко побачити, що на відміну від робіт [139, 140] нами враховувалися крім заряджених, нейтральні дефекти і відповідно розраховувалася їх концентрація. Це дає додаткові можливості порівняння результатів моделювання з експериментом, наприклад, зробити оцінку області гомогенності телуриду



кадмію, розрахувати деякі структурні характеристики дефектного матеріалу та ін.

Порівняння результатів моделювання проведеного у більшості робіт [4, 5, 131, 136-140] з експериментальними даними ускладнюється у зв'язку з тим, що, як правило, реакції дефектоутворення записують для випадків рівноваги ТД з газовою фазою, у той час як значна кількість фізичних методів дозволяє визначити глибину залягання рівнів ТД у ЗЗ охолодженого напівпровідникового матеріалу. Тому нами квазіхімічні реакції записувалися таким чином, щоб можна було використати роботи в яких визначалися енергії залягання рівнів заряджених дефектів. Це дає можливість об'єднати дві області дослідження ТД у матеріалі: квазіхімічну теорію та ІС глибоких ЛС. Тобто можна використати інформацію отриману нами про енергії залягання власних дефектів у ЗЗ халькогенідних матеріалів.

Умовно найбільш загальний варіант дефектоутворення у матеріалі, що використовувався для розрахунків концентрації ТД у подальшому будемо називати третьою моделлю, хоча реально підхід є безмоделним та, як вже вказувалося, враховує всі можливі види дефектів у сполуці.

У ряді випадків нами використовувалися і інші моделі дефектоутворення у CdTe. Вони узагальнені нами у [148]. Моделювання проводилося в інтервалі тиску пари кадмію і температур відпалу, які є типовими при обробці реальних монокристалів. Квазіхімічні реакції, що описують вибрані для розрахунків моделі, зведені у табл. 6.1.

При використанні моделі власних дефектів запропонованої у роботах [4, 137], система квазіхімічних рівнянь має вигляд, наведений у верхній частині таблиці (рядки (1)-(8)). Моделі Черна [136, 138] у цій таблиці відповідають рядки (9)-(15). Третій моделі, що описує найбільш повний спектр дефектів

відповідають рядки (16)-(30). У цій же таблиці наведені значення термодинамічних параметрів, які використовувалися при розрахунках констант квазіхімічних реакцій.

У системі рівнянь, що застосовані для розрахунку ансамблю ТД у телуриді кадмію, співвідношення у рядках (1), (9)-(13), (16)-(19) описують рівновагу пари кадмію - власні дефекти; реакції (2)-(6), (20)-(28) рівновагу власних структурних дефектів; (7), (14), (29) - збудження власної провідності матеріалу; (8), (15), (30) - повне рівняння електронейтральності напівпровідника. У цих виразах індекс  $G$  - відповідає атомам у газовій фазі;  $V_{Te}$ ,  $V_{Cd}$  - вакансії телуру і кадмію відповідно;  $Te_i$ ,  $Cd_i$  - міжвузлові атоми;  $Te_{Cd}$  - антиструктурний дефект (телур у вузлі кадмію);  $e^-$ ,  $h^+$  - електрони і дірки;  $n$ ,  $p$  - їх концентрація;  $T_p$  - температура відпалу монокристала.

При розрахунках використано два різних набори значень енергії залягання ЛС ТД у ЗЗ матеріалу згідно [145] та [133, 134]. Відсутні у літературних джерелах константи квазіхімічних реакцій, розраховані за методикою, описаною в [149], при цьому вважалося, що ефективна маса електронів складає  $m_n^* = 0,11 \cdot m_0$ , а маса дірок  $m_p^* = 0,83 \cdot m_0$  [149]. Враховувалася також залежність ширини ЗЗ матеріалу від температури  $E_g = 1,605 - 4,9 \cdot 10^{-4} T$  еВ.

Сумісний розв'язок систем рівнянь наведених у рядках (1)-(8), (9)-(15) та (9)-(23) для трьох різних моделей відповідно, дає можливість визначити концентрацію ансамблю ТД у матеріалі для випадку їх повної рівноваги через константи квазіхімічних рівнянь  $K$  та парціальний тиск пари кадмію  $P_{Cd}$  або температуру відпалу зразків  $T_p$ . Розрахунки проведені як чисельними методами, так і аналітично. У результаті розв'язку систем рівнянь нами в аналітичному вигляді одержані вирази для визначення концентрації електронів у монокристалах, які

наведені у [146-148].

Більшість вимірювань провідності та концентрації носіїв заряду у зразках CdTe проводяться при температурах близьких до кімнатної, хоча самі монокристали вирощують при високих температурах. У результаті реальний стан ансамблю ТД у напівпровіднику буде відповідати їх частковій рівновазі при деякій проміжній температурі. Це, ще в більшій мірі стосується плівкових зразків, швидкості охолодження яких є набагато більшою ніж у монокристалів. У цьому випадку зіставлення розрахункових та експериментальних результатів буде більш адекватним, якщо стан ансамблю ТД у матеріалі описувати моделлю їх часткової рівноваги або гартування [4, 150]. На момент початку досліджень подібні роботи були відсутні.

При розрахунках концентрації власних ТД у загартованому матеріалі до систем рівнянь, що описують рівноважний стан дефектів додавалися нові рівняння. Для першої моделі дефектоутворення ці додаткові рівняння будуть мати вигляд:

$$[Cd_i^+] + [Cd_i^{2+}] + [Cd_i^0] = [Cd_i]_{tot} = f(T_p), \quad (6.1)$$

$$[V_{Cd}^-] + [V_{Cd}^{2-}] + [V_{Cd}^0] = [V_{Cd}]_{tot} = f(T_p), \quad (6.2)$$

де  $[Cd_i]_{tot}$ ,  $[V_{Cd}]_{tot}$  - сумарні концентрації відповідних дефектів у зразках у випадку повної рівноваги.

У випадку системи квазіхімічних реакцій, що відповідають другій моделі описати процеси гартування неможливо, оскільки рівняння у (9)-(15) таблиці 6.1 визначають лише рівноважні процеси між твердою фазою та насиченою парою при відпалюванні монокристалу. Відповідно розрахунок дефектного стану матеріалу у випадку його гартування не проводився.

Таблиця 6.1. Квазіхімічні реакції дефектоутворення та їх термодинамічні параметри  $K = K_0 \cdot \exp(-\Delta H/kT)$  або  $K = K_0 \cdot \exp(-\Delta E/kT)$

№	Рівняння реакції	Константа рівноваги	Термодинамічні параметри		
			$K_0$ (Па <sup>-1</sup> , Па, см <sup>-3</sup> , см <sup>-6</sup> )	$\Delta H$ , $\Delta E$ , eВ	[55, 188] [21]
Модель дефектів за роботою [18, 36]					
1	$Cd^G + V_i^0 \leftrightarrow Cd_i^+ + e^-$	$K_r \cdot P_{Cd} = R = n \cdot [Cd_i^+] [V_i^0]^{-1}$	$10^{25}$	-0,81	-0,81
2	$Cd_{Cd}^0 \leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd_i^+$	$K_F = [V_{Cd}^-] \cdot [Cd_i^+]$	$7,6 \cdot 10^{36}$	1,37	1,37
3	$Cd_i^0 \leftrightarrow Cd_i^+ + e^-$	$K_1 = [Cd_i^+] \cdot n \cdot [Cd_i^0]^{-1}$	$3,5 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2}$	0,02	0,02
4	$Cd_i^+ \leftrightarrow Cd_i^{2+} + e^-$	$K_2 = [Cd_i^{2+}] \cdot n \cdot [Cd_i^+]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,21	0,20
5	$V_{Cd}^0 \leftrightarrow V_{Cd}^- + h^+$	$K_3 = [V_{Cd}^-] \cdot p \cdot [V_{Cd}^0]^{-1}$	$2,44 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,05	0,20
6	$V_{Cd}^{2-} \leftrightarrow V_{Cd}^- + e^-$	$K_4 = [V_{Cd}^-] \cdot n \cdot [V_{Cd}^{2-}]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,70	0,80
7	$0 \leftrightarrow e^- + h^+$	$n \cdot p = K_i = f(T_p)$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50	1,50
8	$n + [V_{Cd}^-] + 2 \cdot [V_{Cd}^{2-}] = p + [Cd_i^+] + 2 \cdot [Cd_i^{2+}]$				
Модель дефектів за роботою [41, 42, 47-51]					
9	$Cd_{Cd}^0 + e^- \leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd^G$	$K_{11} = [V_{Cd}^-] \cdot n^{-1} \cdot P_{Cd}$	$8 \cdot 10^{11}$	2,08	2,08
10	$Cd_{Cd}^0 + 2e^- \leftrightarrow V_{Cd}^{2-} + Cd^G$	$K_{10} = [V_{Cd}^{2-}] \cdot n^{-2} \cdot P_{Cd}$	$8 \cdot 10^{19}$	1,14	-
11	$Cd^G \leftrightarrow Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K_9 = [Cd_i^{2+}] \cdot n^2 \cdot P_{Cd}^{-1}$	$8 \cdot 10^{55}$	2,09	2,09
12	$Cd^G \leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K_8 = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 \cdot P_{Cd}^{-1}$	$3 \cdot 10^{52}$	1,47	1,47
13	$Te_i^- + Cd^G \leftrightarrow CdTe + e^-$	$K_{12} = [Te_i^-] \cdot n^{-1} \cdot P_{Cd}$	$4 \cdot 10^7$	1,19	1,19
14	$0 \leftrightarrow e^- + h^+$	$n \cdot p = K_i = f(T_p)$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50	1,50
15	$n + [V_{Cd}^-] + 2 \cdot [V_{Cd}^{2-}] + [Te_i^-] = p + 2 \cdot [Cd_i^{2+}] + 2 \cdot [V_{Te}^{2+}]$				
Модель дефектів за роботою [187]					
16	$Cd^G \leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K_8 = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 \cdot P_{Cd}^{-1}$	$3 \cdot 10^{52}$	1,47	1,47
17	$Cd^G \leftrightarrow Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K_9 = [Cd_i^{2+}] \cdot n^2 \cdot P_{Cd}^{-1}$	$8 \cdot 10^{55}$	2,09	2,09
18	$Cd_{Cd}^0 + e^- \leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd^G$	$K_{11} = [V_{Cd}^-] \cdot n^{-1} \cdot P_{Cd}$	$8 \cdot 10^{11}$	2,08	2,08
19	$Te_i^- + Cd^G \leftrightarrow CdTe + e^-$	$K_{12} = [Te_i^-] \cdot n^{-1} \cdot P_{Cd}$	$4 \cdot 10^7$	1,19	1,19
20	$Cd_i^0 \leftrightarrow Cd_i^+ + e^-$	$K_1 = [Cd_i^+] \cdot n \cdot [Cd_i^0]^{-1}$	$3,5 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2}$	0,02	0,02
21	$Cd_i^+ \leftrightarrow Cd_i^{2+} + e^-$	$K_2 = [Cd_i^{2+}] \cdot n \cdot [Cd_i^+]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,21	0,20
22	$V_{Cd}^0 \leftrightarrow V_{Cd}^- + h^+$	$K_3 = [V_{Cd}^-] \cdot p \cdot [V_{Cd}^0]^{-1}$	$2,44 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,05	0,20
23	$V_{Cd}^{2-} \leftrightarrow V_{Cd}^- + e^-$	$K_4 = [V_{Cd}^-] \cdot n \cdot [V_{Cd}^{2-}]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,70	0,80
24	$V_{Te}^0 \leftrightarrow V_{Te}^{2+} + e^-$	$K_{15} = [V_{Te}^{2+}] \cdot n \cdot [V_{Te}^0]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,50	0,50
25	$V_{Te}^0 \leftrightarrow V_{Te}^+ + e^-$	$K_{16} = [V_{Te}^+] \cdot n \cdot [V_{Te}^0]^{-1}$	$3,5 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2}$	0,40	0,40
26	$Te_i^0 \leftrightarrow Te_i^- + h^+$	$K_{17} = [Te_i^-] \cdot p \cdot [Te_i^0]^{-1}$	$2,44 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,80	0,80
27	$Te_i^- + V_{Cd}^{2-} \leftrightarrow Te_{Cd}^{2+} + 5e^-$	$K_{14} = [Te_{Cd}^{2+}] \cdot n^5 \cdot [Te_i^-]^{-1} \cdot [V_{Cd}^{2-}]^{-1}$	$2,5 \cdot 10^{82}$	3,76	3,76
28	$Te_{Cd}^0 \leftrightarrow Te_i^{2+} + 2e^-$	$K_{16} = [Te_{Cd}^{2+}] \cdot n^2 \cdot [Te_{Cd}^0]^{-1}$	$8,75 \cdot 10^{13} \cdot T^{3/2}$	0,40	0,40
29	$0 \leftrightarrow e^- + h^+$	$n \cdot p = K_i = f(T_p)$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50	1,50
30	$n + [V_{Cd}^-] + 2 \cdot [V_{Cd}^{2-}] + [Te_i^-] = p + 2 \cdot [Cd_i^{2+}] + [Cd_i^+] + 2 \cdot [V_{Te}^{2+}] + [V_{Te}^+] + 2 \cdot [Te_{Cd}^{2+}]$				

Для опису ансамблю ТД у рамках третьої моделі дефектоутворення до рівнянь (6.1) і (6.2) необхідно долучити наступні співвідношення:

$$[Te_i^-] + [Te_i^0] = [Te_i]_{tot} = f(T_p), \quad (6.3)$$

$$[V_{Te}^+] + [V_{Te}^{2+}] + [V_{Te}^0] = [V_{Te}]_{tot} = f(T_p), \quad (6.4)$$

$$[Te_{Cd}^{2+}] + [Te_{Cd}^0] = [Te_{Cd}]_{tot} = f(T_p), \quad (6.5)$$

Розв'язок розширених таким чином систем рівнянь дозволяє розрахувати концентрацію ТД у загартованих зразках залежно від технологічних параметрів вирощування та відпалювання монокристалів, а також температури їх наступного дослідження.

Як і для випадку повної рівноваги крім чисельних розрахунків, нами у [146, 147] одержані аналітичні вирази, які визначають концентрації вільних носіїв заряду у швидко охолодженому матеріалі через константи квазіхімічних рівнянь. Результати чисельного розрахунку концентрації ТД та носіїв заряду у телуриді кадмію залежно від  $P_{Cd}$  для випадку повної рівноваги та гартування з використанням першої - третьої моделі наведені у [146-147].

На рис.6.1 представлені залежності концентрації власних ТД від температури відпалу ( $N \cdot 10^3 / T$ ) кристалів CdTe для трьох різних моделей при  $P_{Cd} = 600$  Па. Зміна концентрації вільних електронів  $n$  від температури відпалювання зразків (модель 2) при різних тисках пари кадмію наведена у [151], там же представлені експериментальні результати визначення концентрації носіїв заряду у матеріалі згідно роботи [152].

Оскільки основним параметром телуриду кадмію, який визначається експериментально і може бути порівняним з результатами моделювання є його холівська концентрація носіїв заряду, у роботі з використанням співвідношення  $n_H = n - p$ , де

$p = K_i/n$ , був проведений розрахунок цієї величини залежно від тиску пари кадмію при відпалі матеріалу. Відповідні залежності холівської концентрації зарядносіїв від  $P_{Cd}$  для різних моделей дефектоутворення та швидкості охолодження зразків наведені на рис.6.2.

Крім того, згідно результатів моделювання були побудовані тривимірні залежності  $n_H$  від тиску металу та температури у процесі відпалювання (рис. 6.3). Це в свою чергу дозволило встановити технологічні параметри, які відповідають зміні типу провідності монокристалу при термообробці.

Результати розрахунків ансамблю ТД у CdTe за першою моделлю дозволили встановити, що в області досліджених надлишкових тисків кадмію переважаючими дефектами у матеріалі є міжвузлові атоми кадмію -  $Cd_i^{2+}$ . При подальшому збільшенні  $P_{Cd}$  домінуючими стають однозаряджені дефекти  $Cd_i^+$ . Разом з тим концентрація незаряджених дефектів цього типу є значно нижчою ніж заряджених.

В області низьких тисків кадмію структурночутливі властивості напівпровідника визначаються вакансіями  $V_{Cd}^-$  та  $V_{Cd}^0$ . Оскільки заряджені міжвузлові атоми кадмію є донорами, а заряджені вакансії – акцепторами, при зменшенні  $P_{Cd}$  у процесі відпалювання халькогеніду відбувається зниження концентрації електронів з подальшою інверсією типу провідності матеріалу з  $n$  на  $p$ . В області малих тисків кадмію при зменшенні  $P_{Cd}$  провідність CdTe зростає внаслідок збільшення у матеріалі концентрації дірок. Гартування зразків приводить до суттєвої зміни стану ансамблю ТД у матеріалі, як результат, у деякому діапазоні тисків кадмію його опір збільшується майже на вісім порядків. Значення відповідних тисків та ширина цього діапазону визначаються температурою відпалювання CdTe.

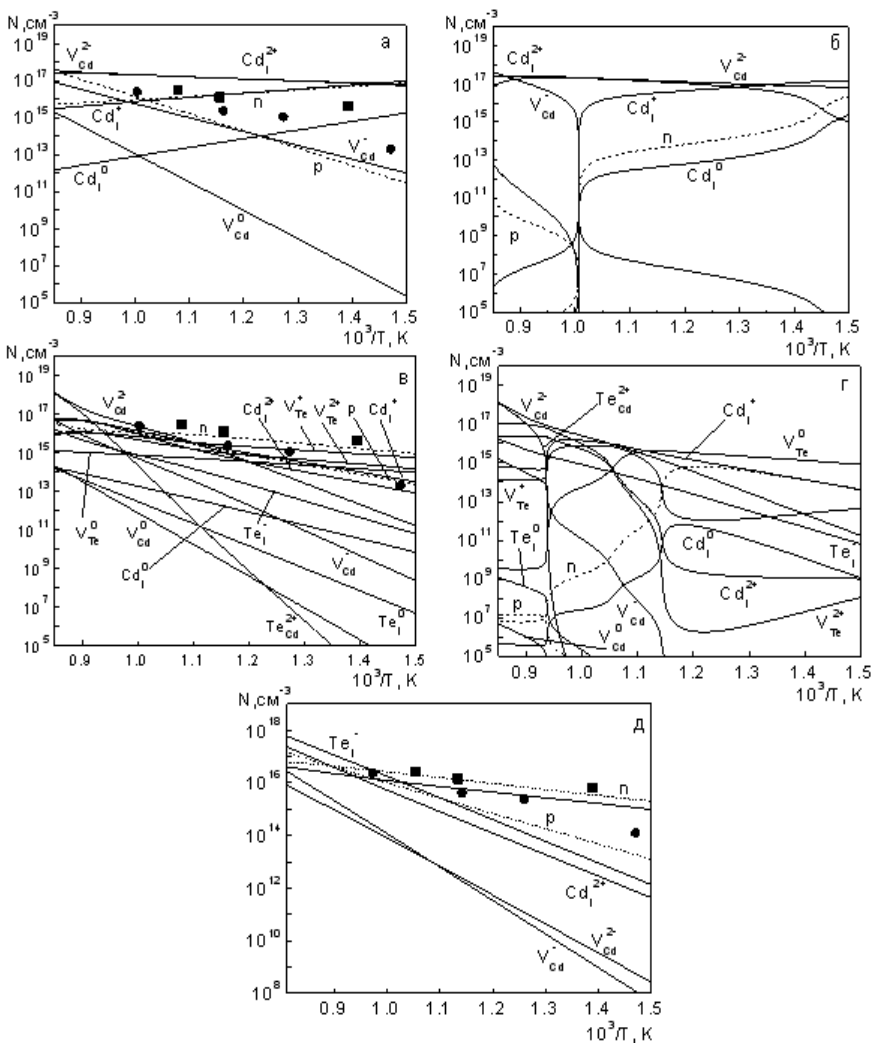


Рис. 6.1. Залежність концентрації власних ТД та носіїв струму від температури відпалу кристалів CdTe при  $P_{Cd} = 600$  Па. Перша модель дефектів: повна рівновага (а); гартування (б). Третя модель дефектів: повна рівновага (в); гартування (г). Друга модель дефектів: повна рівновага (д); експериментальні дані з концентрації дірок ■ - [153], ● - [154]

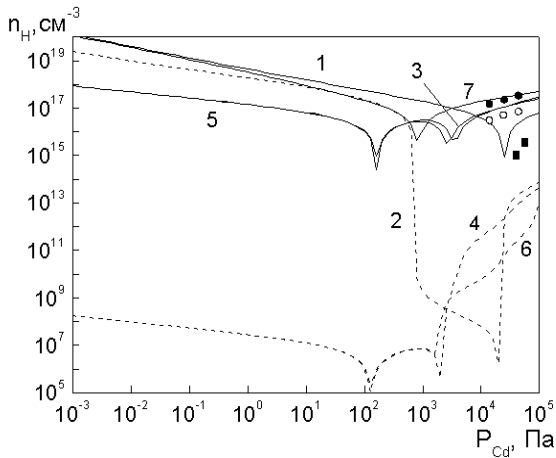


Рис. 6.2. Порівняння результатів розрахунків  $n_H$  з експериментальними даними: 1 - повна рівновага, 2 - гартування: модель дефектів [144]; 3, 4, 5, 6 - модель дефектів [133, 135], 3,4 набір констант [145], 5, 6 - набір констант [139]; 7 - друга модель повна рівновага.  $T_p = 1173$  К. Експериментальні дані про концентрацію електронів ■ - [137], ○ - [153], ● - [154].

При зменшенні  $T_p$  зразків інтервал тисків кадмію де халькогенід стає напівізолюючим розширюється та зміщується в область менших  $P_{Cd}$ . Крім цього, на залежності  $n_H - P_{Cd}$  спостерігається область тисків, де концентрація носіїв зменшується не так значно (у 2-3 рази порівняно з матеріалом у рівноважному стані), а сам матеріал має проміжну провідність.

Для другої моделі дефектоутворення характерним є домінування дефектів за підграткою телуру -  $Te_i^-$  ( $P_{Cd} < 10^3 - 10^4$  Па) та  $V_{Te}^{2+}$  ( $P_{Cd} > 10^3 - 10^4$  Па). Лише при високих температурах відпалу ( $T_p > 1073$  К) та високих тисках кадмію ( $P_{Cd} > 10^4$  Па) переважальним дефектом стає міжвузловий  $Cd_i^{2+}$ . Слід зазначити, що отримані нами результати добре корелюють з



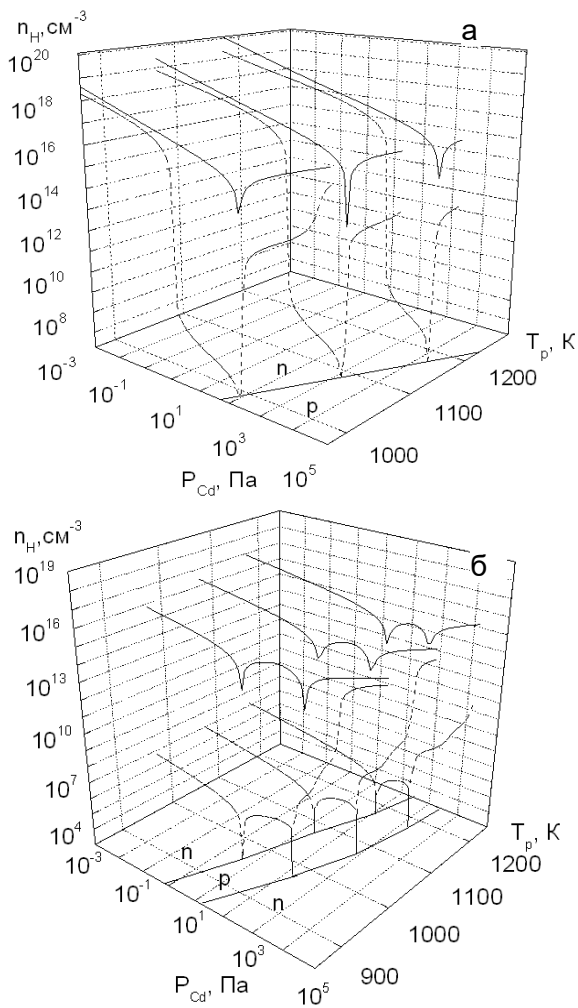


Рис. 6.3. Залежність холівської концентрації носіїв заряду від тиску пари кадмію та температури відпалу при повній рівновазі дефектів та гартуванні: перша модель дефектів (а), третя модель - (б). На рисунку відмічені області, що відповідають різним типам провідності матеріалу

даними моделювання наведеними у роботах [139, 140, 143].

Розрахунки ансамблю ТД згідно третьої моделі показали [146-148], що в області високих тисків кадмію структурночутливі властивості матеріалу визначаються міжвузловими атомами  $Cd_i^{2+}$  (у невеликому інтервалі технологічних параметрів -  $Cd_i^+$ ), у той час як при малих  $P_{Cd}$  дефектами, що домінують є  $V_{Cd}^{2-}$  та  $Te_{Cd}^{2+}$ . При цьому концентрація останніх дефектів при зменшенні  $P_{Cd}$  збільшується дуже швидко виходячи за межі області гомогенності матеріалу, яка у дослідженому діапазоні температур складає  $10^{19}$ - $10^{20}$  см<sup>-3</sup>. Це свідчить про можливість утворення у телуриді кадмію, одержаному при  $P_{Cd} < (10^{-1} - 10^2)$  Па (залежно від  $T_p$ ), преципітатів телуру. Одночасно концентрації  $V_{Cd}^{2-}$  та  $Te_{Cd}^{2+}$  у широкому інтервалі технологічних параметрів є практично однаковими, що повинно приводити до компенсації їх електричних властивостей і як наслідок незалежності концентрації вільних носіїв від тиску кадмію. Цей висновок протирічить результатам роботи [139, 140], але повністю співпадає з висновками авторів [5, 133, 135].

Гартування зразків приводить до різкого (9-10 порядків) зменшення концентрації вільних носіїв у матеріалі при  $P_{Cd} < (10^3-10^4)$  Па [146-147]. При цьому, провідність халькогеніду виявляється нижчою ніж це передбачає перша модель. Такий напівізолюючий матеріал може бути використаний як базовий для високоефективних датчиків  $\gamma$  та X-випромінювання.

Слід відмітити, що третя модель, як перша і друга, передбачає зміну провідності матеріалу з  $n$  на  $p$  при зменшенні  $P_{Cd}$ . Відповідні значення критичних тисків кадмію збільшуються при зростанні температури відпалювання матеріалу. При цьому тиски при яких відбувається інверсія провідності напівпровідника передбачені двома моделями є досить

близькими. Це ж стосується провідності CdTe в області великих  $P_{Cd}$  (рис.6.3).

Характерною особливістю поведінки матеріалу при використанні третьої моделі дефектоутворення є додаткова зміна його типу провідності з  $p$  на  $n$  в області відпалу телуриду кадмію під надлишковим тиском телуру (рис.6.3). Утворення матеріалу  $n$ -типу провідності у цій області обумовлено зміщенням міжвузлових атомів  $Te_i$  на місце  $V_{Cd}$  з утворенням антиструктурних дефектів  $Te_{Cd}^{2+}$ , які є донорами. Це можливо внаслідок того, що ентальпія утворення цього дефекту ( $\Delta H_{Te_{Cd}} = 3,76$  еВ) є меншою ніж ентальпія утворення вакансії кадмію ( $\Delta H_{V_{Cd}} = 4,75$  еВ) [133-135].

Відзначимо, що утворення CdTe  $n$ -типу провідності при відпалі у парах телуру спостерігалось експериментально у роботі [155] але автори досліджували матеріал легований хлором. Зміну типу провідності монокристалу при низьких тисках пари кадмію вони пояснюють саме утворенням антиструктурного дефекту  $Te_{Cd}^{2+}$ . Наші розрахунки однак свідчать, що у багатьох випадках, концентрація цих дефектів що необхідна для зміни типу провідності халькогеніду з  $p$  на  $n$ , лежить за межами гомогенності напівпровідника.

З рис. 6.3. видно, що при використанні відмінних одна від одної моделей дефектоутворення та наборів констант квазіхімічних рівнянь запропонованих авторами [4, 5, 133, 135], при високих тисках парів кадмію спостерігається досить добра кореляція між результатами моделювання та експериментальними значеннями  $n$ . Це цілком зрозуміло, оскільки відповідні константи квазіхімічних рівнянь були одержані в результаті оптимізації розв'язку багатофакторної задачі саме у області високих значень  $P_{Cd}$ . В матеріалі

збагаченому телуrom між даними розрахованими за різними моделями помітні великі розбіжності, що дозволяє зробити вибір найбільш достовірних з них.

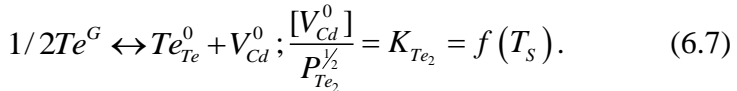
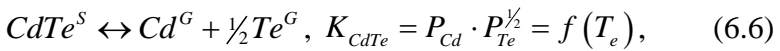
### **6.2.2. Квазіхімічний опис ансамблю ТД у плівках CdTe для випадків повної рівноваги та гартування**

При дослідженні процесів дефектоутворення у монокристалах CdTe, було виявлено, що використані нами моделі дефектоутворення з відповідними наборами констант квазіхімічних рівнянь досить добре описують експериментальні дані [136, 137, 153, 154, 156]. Але умови одержання та післяростової обробки монокристалів суттєво відрізняються від технологічних умов одержання плівок. Тому виникла необхідність застосування найреалістичніших моделей дефектоутворення для розрахунку концентрації ТД у плівках CdTe. Крім того, існує потреба адаптування методики розрахунку рівноваги ансамблю ТД у монокристалах при їх відпалюванні при надлишковому тиску пари компонентів сполуки для випадку дефектоутворення у плівках, одержаних методом КЗО в умовах близьких до термодинамічно рівноважних. Нагадаємо, що в такому стані відбувається інтенсивний обмін речовиною між газовою фазою та матеріалом плівки [157], що приводить до встановлення рівноваги між дефектами.

Таке адаптування можна здійснити за рахунок виявлення зв'язку між температурою випарника  $T_e$  та тисками пари кадмію і телуру, утворених у результаті дисоціації халькогеніду при його випаровуванні. У подальшому необхідно розглянути перенесення пари від випарника до підкладки (у цьому розділі цей процес не враховується) та рівновагу пари компонентів сполуки з ТД у твердій фазі при температурі підкладки  $T_s$ .

Тоді для опису стану повної рівноваги власних дефектів у

плівках CdTe можуть бути використані системи квазіхімічних рівнянь, наведені у таблиці 6.1, однак їх необхідно доповнити двома додатковими співвідношеннями. Перше з них описує випаровування сполуки при температурі випарника  $T_e$  і враховує її дисоціацію при переході із твердої фази у пару. Друге рівняння характеризує рівновагу пара телуру - конденсат з утворенням власних дефектів у плівці CdTe при температурі осадження (підкладки)  $T_s$ .



Необхідно відзначити, що ці рівняння можуть бути записані з використанням значень рівноважних тисків як металу  $P_{Cd}$  так і халькогену  $P_{Te}$ . При цьому перехід від значень парціальних тисків кадмію до тисків телуру та навпаки у реакціях (6.11-6.12) можна здійснити відповідною зміною константи квазіхімічних рівнянь [4, 148].

Розв'язання нових систем квазіхімічних рівнянь проводилося за методикою використаною для монокристалів. Результати моделювання ансамблю ТД у плівках CdTe залежно від температури випарника  $T_e$ , при різних температурах підкладки  $T_s$  для різних моделей дефектоутворення представлені у наших роботах [146-147]. Стан власних дефектів у плівках виявився подібним до отриманого у випадку монокристалів, але при цьому проявилися і деякі особливості його поведінки, обумовлені іншим діапазоном температур та тисків пари при конденсації тонких шарів.

Зокрема результати моделювання у типовому для конденсації плівок методом КЗО діапазоні температур випарника (873-

1173 K), показують, що при збільшенні  $T_e$  відбувається насичення плівки металом, при цьому у ролі домінуючого дефекту донорного типу залежно від вибору моделі виступає  $Cd_i^{2+}$  (перша модель) або вакансії телуру  $V_{Te}^{2+}$  (друга модель),  $V_{Te}^+$  (3-тя модель). У результаті напівпровідник при  $T_e > (950-1000)$  К має  $n$ -тип провідності.

В той же час, спостерігається досить вузький інтервал температур випарника ( $T_e = 950-1000$  К) де відбувається зміна типу носіїв заряду у зразках і виникає можливість одержання плівкового матеріалу з  $p$ - та  $n$  типом провідності.

Зменшення температури випарника до значень  $T_e < 950$  К приводить до збіднення плівки металом та збільшенням концентрації вакансій кадмію  $V_{Cd}^{2-}$  (перша модель) чи міжвузлового телуру  $Te_i^-$  (друга та третя моделі). Це приводить до зміни типу провідності плівок з електронного на дірковий.

Концентрація нейтральних дефектів у плівках CdTe виявилася суттєво нижчою концентрації заряджених і нею у більшості випадків можна знехтувати. Зниження  $T_s$  в умовах їх повної рівноваги веде до зменшення концентрації власних дефектів та вільних зарядоносіїв у шарах.

У випадку швидкого охолодження конденсатів CdTe ансамбль ТД у них досить суттєво змінюється. Згідно з першою моделлю домінуючими у матеріалі стають [151-153]: у області високих температур випарника - двох та одно (у вузькому інтервалі температур) заряджені міжвузлові атоми кадмію ( $Cd_i^{2+}$ ,  $Cd_i^+$ ); у області низьких температур – однозаряджені вакансії кадмію ( $V_{Cd}^-$ ).

У випадку використанням другої моделі отримані результати близькі до наведених вище: при високих температурах випарника основними дефектами у CdTe є двозаряджені

міжвузлові атоми кадмію ( $Cd_i^{2+}$ ), в той час як при низьких  $T_e$  – однозаряджені вакансії кадмію ( $V_{Cd}^-$ ) при  $T_s > 730 K$  та однозаряджені міжвузлові атоми телуру ( $Te_i^-$ ) при  $T_s < 730 K$ .

Міжвузлові атоми телуру є домінуючими в області малих тисків кадмію і при розрахунках за третьою моделлю. При підвищенні температури випарника і відповідно тиску кадмію основними дефектами стають двозаряджені міжвузлові атоми кадмію ( $Cd_i^{2+}$ ) при низьких температурах підкладки ( $T_s < 700 K$ ) та однозаряджені при високій.

Залежності концентрації вільних носіїв від технологічних параметрів отримання плівок – температури випарника і підкладки, розраховані з використанням різних моделей наведені на рис. 6.4.

Всі три моделі передбачають, що плівки CdTe, отримані при температурах випарника більших ніж  $T_e = (900-970) K$ , незалежно від температури підкладки, завжди мають  $n$ -тип провідності. У випадку повільного охолодження такі плівки повинні бути достатньо високоомними, оскільки концентрація носіїв в них, в основному, не перевищує  $10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Лише при нижчих температурах  $T_e$  можна отримати плівки  $p$ -типу (рис. 6.4). При цьому температура, що відповідає області зміни провідності, знижується при зменшенні  $T_s$ . Це обумовило вибір діапазону  $T_e$  (873-1023 K), що використовувався нами при нанесенні плівок CdTe у КЗО, оскільки при таких умовах можуть бути отримані плівки, як  $n$  так і  $p$ -типу провідності.

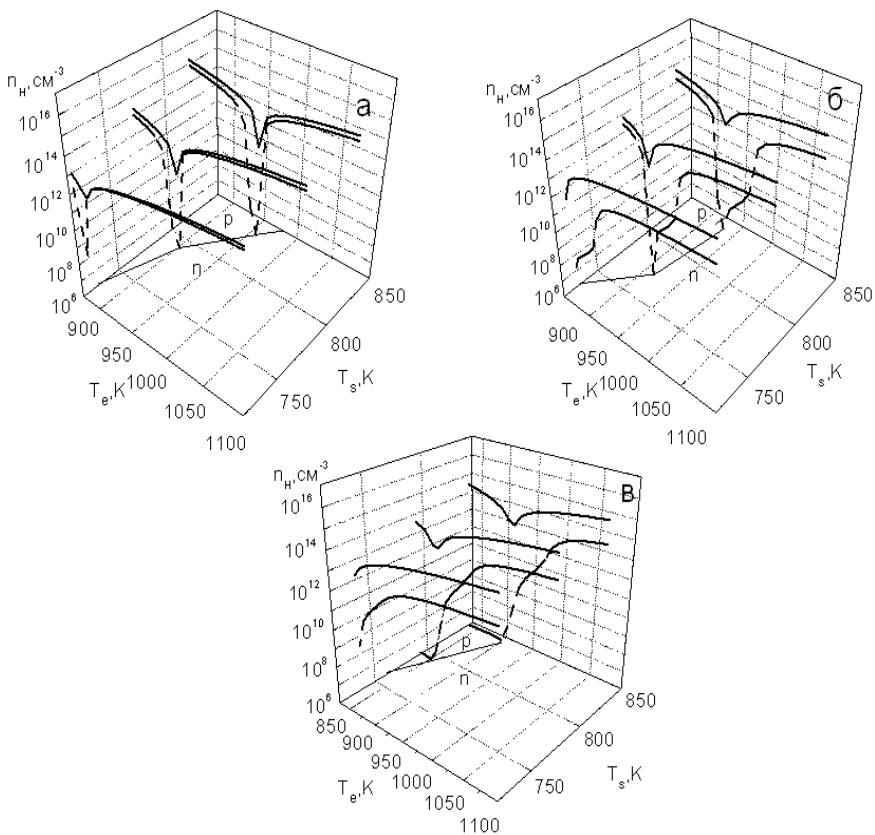


Рис. 6.4. Залежність холівської концентрації вільних носіїв заряду в плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  та підкладки  $T_s$ . перша модель дефектів (а), друга модель (б), третя модель (в). Суцільна лінія – випадок повної рівноваги дефектів; штрихова – їх гартування

Гартування плівок приводить до збільшення їх опору від двох (перша модель) до десяти і більше разів (друга та третя моделі). При цьому, згідно розрахунків з використанням новітніх моделей, існує широка область технологічних параметрів, де такі плівки стають напівізолюючими. Концентрація носіїв у них не перевищує  $n = (10^9-10^{10}) \text{ см}^{-3}$ , відповідно вони можуть бути використані як детекторний матеріал.



Одночасно, як свідчать перша та друга моделі, гартування не суттєво впливає на концентрацію вільних носіїв у плівках  $p$ -типу провідності, хоча вона те ж дещо знижується. Згідно третьої моделі такі плівки повинні бути дуже високоомними. Як ми бачимо, є деяка різниця у передбаченні властивостей плівок, що дають різні моделі дефектоутворення, ці відмінності можуть бути зареєстровані експериментально, що дозволить перевірити їх адекватність експериментальній ситуації.

### 6.2.3. Моделювання ансамблю точкових дефектів у плівках CdTe з використанням параметрів дефектоутворення розрахованих «*ab initio*»

Останнім часом спостерігається тенденція до розрахунків концентрації власних та домішкових дефектів у різних матеріалах з “перших принципів” -«*ab initio*» [132-135, 159-161]. Це забезпечує більш правильний, порівняно з класичним, підхід до опису ансамблю ТД у матеріалі: спочатку розраховується концентрація впроваджених з газової фази нейтральних дефектів, а потім розглядаються процеси їх іонізації у твердому тілі в залежності від положення рівня Фермі, який визначається як власними дефектами так і легуючими та неконтрольованими домішками.

Для випадку повної рівноваги, концентрацію будь-якого ТД можна виразити через термодинамічні потенціали процесу дефектоутворення наступним чином [5]:

$$n \cdot p = K_i = f(T), \quad (6.8)$$

$$N(A_i^0) = \frac{n_0 P_A \sqrt{T}}{K} \exp\left(\frac{S_{A_i^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{A_i^0} + U_{A_i^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.9)$$

$$N(V_A^0) = \frac{n_0}{P_A \sqrt{T}} K \exp\left(\frac{S_{V_A^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{V_A^0} + U_{V_A^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.10)$$

$$N(B_i^0) = \frac{n_0}{P_A \sqrt{T}} K \exp\left(\frac{S_{B_i^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{B_i^0} + U_{B_i^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.11)$$

$$N(V_B^0) = \frac{n_0 P_A \sqrt{T}}{K} \exp\left(\frac{S_{V_B^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{V_B^0} + U_{V_B^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.12)$$

$$N(B_A^0) = \frac{n_0}{P_A^2 T} K^2 \exp\left(\frac{S_{B_A^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{B_A^0} + U_{B_A^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.13)$$

$$N(A_B^0) = \frac{n_0 P_A^2 T}{K^2} \exp\left(\frac{S_{A_B^0}^{vib}}{k}\right) \exp\left(-\frac{E_{A_B^0} + U_{A_B^0}^{vib}}{kT}\right), \quad (6.14)$$

де  $N(X^0)$  – концентрація відповідного нейтрального дефекту;  $K = kT^3 (2\pi m_{Cd} k/h^2)^{3/2}$ ;  $m_{Cd}$  – маса атома кадмію;  $n_0 = 1,469 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$  – концентрація атомів у вузлах ґратки;  $E_X$  – енергія утворення дефекту;  $U_X^{vib}$  – коливна енергія дефекту;  $S_X^{vib}$  – коливна ентропія дефекту;  $A$  – Cd,  $B$  – Te.

Розрахунок значень  $E$ ,  $U^{vib}$ ,  $S^{vib}$  у цих рівняннях зводиться до моделювання взаємодії дефектів з кристалічною ґраткою матеріалу методом “*ab initio*”, тобто виходячи лише з квантово-механічних та термодинамічних параметрів атомів Cd та Te [158]. Порівняння та аналіз констант наведених різними дослідниками проведене нами у [151, 161].

Якщо відомі концентрації нейтральних дефектів  $N(X^0)$ , концентрації заряджених ТД (донорних та акцепторних), власних носіїв легко знайти з використанням статистики Фермі-Дірака та рівняння електронейтральності

$$n = \frac{N_c}{\exp\left[\frac{(E_g - E_{F0})}{kT}\right] + 1}, \quad (6.15)$$

$$p = \frac{N_v}{\exp(E_{F0}/kT) + 1}, \quad (6.16)$$

$$N(X_{di}^{z+}) = \frac{N(X_{di}^0)}{g_d \exp\left[-\frac{(E_g - E_{di} - E_{F0})}{kT}\right] + 1}, \quad (6.17)$$

$$N(X_{ai}^{z-}) = \frac{N(X_{ai}^0)}{g_d \exp\left[\frac{(E_{ai} - E_{F0})}{kT}\right] + 1}, \quad (6.18)$$

$$n + N(V_{cd}^-) + 2N(V_{cd}^{2-}) + N(Te_i^-) + 2N(Te_i^{2-}) = p + N(Cd_i^+) + 2N(Cd_i^{2+}) + N(V_{te}^+) + 2N(V_{te}^{2+}) + N(Te_{cd}^+) + 2N(Te_{cd}^{2+}), \quad (6.19)$$

де  $E_{F0}$  - енергія Фермі у напівпровіднику;  $z$  - ступінь іонізації дефектів;  $g$  - їх фактор виродження;  $E_a, E_d$  - енергії іонізації відповідно акцепторних та донорних центрів;  $N(X_{di}^{z+}), N(X_{ai}^{z-})$  - концентрація донорів та акцепторів, відповідно.

Енергію іонізації акцепторів, як і рівня Фермі при подальшому моделюванні будемо відраховувати від верху валентної зони, а донорів від дна зони провідності. Фактори спінового виродження рівнів приймемо рівними  $g = 2$  для однозаряджених донорних дефектів та  $g = 1/2$  для акцепторних, для двозаряджених центрів у відповідності з [2, 3, 5].

Для визначення найбільш адекватних наборів термодинамічних параметрів дефектоутворення та апробації запропонованого математичного алгоритму, нами спочатку проводився розрахунок ансамблю ТД у монокристалах CdTe та здійснювалося порівняння отриманих результатів моделювання з наявними розрахунковими та експериментальними даними [136-145, 152-155].

Моделювання стану ТД з використанням підходу, що

базується на використанні параметрів дефектоутворення знайдених «*ab initio*», зводиться до розрахунку концентрацій нейтральних дефектів згідно співвідношень (6.8) - (6.13) з використанням термодинамічних параметрів наведених у табл. 6.2.

Таблиця. 6.2 Параметри дефектоутворення

Вид дефектів	$E + U^{vib}, \Delta H,$	$S^{vib} / k_b$	Посилання
$Cd_i^0$	1,65	-16,35	[5, 132-134, 151]
$V_{Cd}^0$	3,55	-5,6	
$Te_i^0$	1,967	-38,54	
$V_{Te}^0$	1,41	33,83	
$Te_{Cd}^0$	4,72	-17	

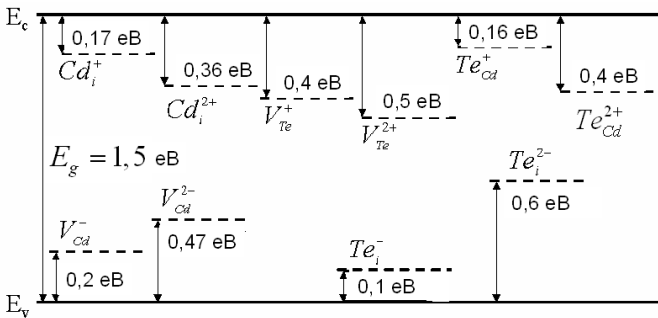


Рис. 6.5. Положення енергетичних рівнів власних ТД у 33 CdTe, що використані при моделюванні

Подальшим етапом моделювання було розв'язання системи рівнянь (6.14)-(6.18) відносно енергії Фермі  $E_{F0} = f(T, P_{Cd})$  з урахуванням положення ЛС ТД у 33 матеріалу (рис. 6.6). У результаті, одержані залежності концентрації ТД та холівської концентрації вільних носіїв струму у монокристалах CdTe від

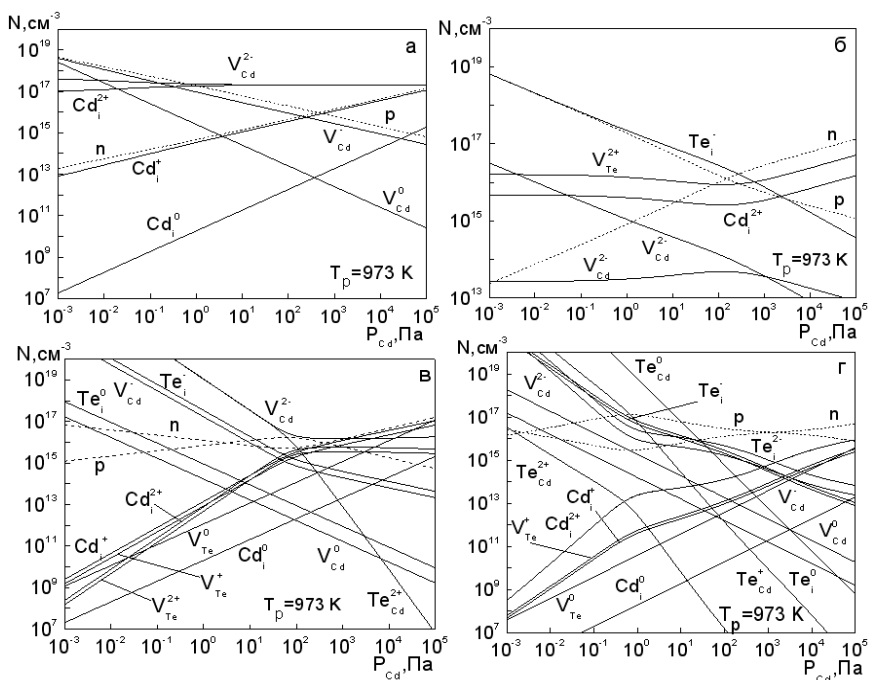


Рис. 6.6. Залежність концентрації ТД в монокристалах CdTe від  $P_{Cd}$  у випадку повної рівноваги дефектів: розрахунки згідно традиційного підходу - модель дефектів та константи квазіхімічних рівнянь [4, 137] (а); модель дефектів та константи квазіхімічних рівнянь [139] (б); повний спектр дефектів [151] (в); розрахунки з використанням даних одержаних «*ab initio*» [5, 133, 145] (г)

тиску пари металу (рис. 6.7, 6.8). На цих рисунках для порівняння також наведені результати моделювання, при тих же технологічних умовах, ансамблю ТД з використанням традиційного підходу для трьох розглянутих раніше моделей.

Результати моделювання, проведені на основі термодинамічних параметрів одержаних «*ab initio*», свідчать (рис. 6.7 г), що основними ТД дефектами, у різних інтервалах тисків кадмію є  $Cd_i^{2+}$ ,  $Te_i^{2-}$ ,  $Te_i^-$  та  $Te_{Cd}^+$ . Серед незаряджених

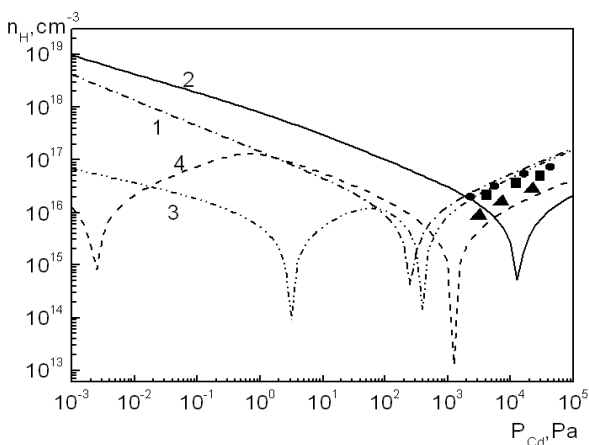


Рис. 6.7. Залежність холівської концентрації носіїв в монокристалах CdTe від  $P_{Cd}$ ,  $T_p = 973$  К: розрахунки згідно традиційного підходу 1 – модель дефектів та квазіхімічні рівняння [4], 2 – модель дефектів та квазіхімічні рівняння [139], 3 – повний спектр ТД [151], 4 – розрахунки з «*ab initio*» [133, 135]. Експериментальні дані: ● - [136], ▲ - [5], ■ - [153]

дефектів тільки  $Te_{Cd}^0$  в області високих тисків телуру має значну концентрацію, іншими нейтральними ТД можна знехтувати. Як видно з рис.6.7 існує досить суттєва різниця між результатами моделювання ансамблю ТД з використанням традиційного підходу та з використанням даних одержаних «*ab initio*».

Необхідно відмітити, що наші розрахунки при використанні відповідних параметрів і в тих же технологічних умовах повністю співпадають, наприклад, з проведеними у [5]. Це свідчить про те, що розроблені алгоритми та програми працюють правильно.

Розрахунок концентрації вільних носіїв у матеріалі (рис. 6.8) свідчить, що в області високих тисків кадмію  $P_{Cd} > 10^3$  Па існує досить добра кореляція між розрахунковими і

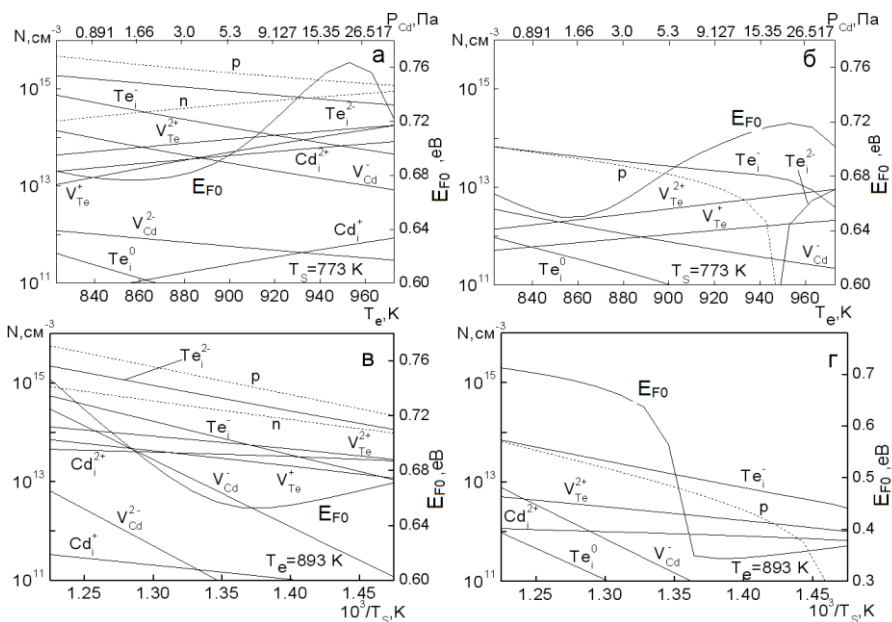


Рис. 6.8. Залежність концентрації ТД у плівках CdTe від  $T_e$  ( $P_{\text{Cd}}$ ): повна рівновага (а), гартування (б) та  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г). Розрахунки проведені згідно даних Фочука [139, 140] про глибини залягання рівнів ТД у ЗЗ матеріала

експериментальними даними. В області високих тисків телуру, нажаль, експериментальних результатів практично не існує. Однак, саме у цій області між розрахунками виконаними за різними моделями помітні великі розбіжності, що дозволяє робити вибір найбільш достовірних з них. Моделювання показало, що остаточний результат, у значній мірі, визначається вибраними термодинамічними параметрами утворення відповідних дефектів та глибиною залягання їх енергетичних рівнів у ЗЗ матеріалу. Однак, у наш час, ці параметри, визначені різними авторами методом «*ab initio*», суттєво відрізняються один від одного [151]. Це пов'язано з тим, що автори при розрахунках використовують різні підходи та наближення, а сам

метод у наш час не дає абсолютно точні результати.

Після апробації на монокристалах, метод заснований на використанні термодинамічних параметрів дефектоутворення розрахованих «*ab initio*» був застосований нами для моделювання стану ТД у плівках CdTe. При цьому, згідно співвідношень (6.6) та (6.7) враховувалась дисоціація CdTe при його випаровуванні у КЗО при температурі випарника.

При розрахунках використані термодинамічні параметри утворення нейтральних ТД розраховані «*ab initio*» у [133, 135], які знайшли достатнє експериментальне підтвердження у роботах [5].

Для моделювання спектру заряджених ТД використовувались декілька наборів значень енергій залягання ЛС у ЗЗ матеріалу: взяті дані Фочука [139, 140]; результати дослідження ТД методом ЕПР [128, 162, 163]; набір параметрів, якій складений за результатами розрахунків енергій іонізації ТД «*ab initio*» Веєм [160, 164]. Такий вибір був обумовлений наступним. Результати Фочука базуються на великій кількості експериментальних даних і перевірені шляхом моделювання процесів дефектоутворення у монокристалах CdTe. Однак, як і у більшості інших робіт ідентифікація дефектних станів у [139, 140] не проводилася, а відповідна глибина залягання енергетичного рівня присвоювалася тому чи іншому дефекту апріорно.

Звернемо увагу, що метод ЕПР у наш час єдиний метод, який дозволяє провести пряму ідентифікацію рівнів дефектів у CdTe та визначити глибину залягання їх ЛС у ЗЗ матеріалу [128, 162, 163], хоча деяку корисну інформацію можна також отримати методом позитронної анігіляції [165]. Саме тому, при моделюванні використовувалися ці дані.

Нарешті при моделюванні ансамблю ТД був використаний набір енергій іонізації ТД розрахованих Веєм [160, 164], як



такий, що є найбільш достовірним серед теоретичних результатів. Рівні залягання, що використовувались при моделювання зведені у табл. 6.3.

Результати моделювання ансамблю власних ТД у плівках CdTe залежно від зміни температури конденсації та випарника наведені на рис. 6.9-6.10 та у [151]. Вони свідчать, що використання різних значень  $\Delta E_i$  приводить до суттєвої різниці у кінцевій концентрації власних дефектів у плівках. Так, при використанні глибин залягання ЛС ТД за Фочуком (рис. 6.9) домінуючими дефектами, як у свіжесконденсованих так і у загартованих плівках CdTe є  $Te_i^{2-}$ . При цьому, таке домінування спостерігається у широких інтервалах зміни температури випарника і підкладки.

Міжвузлові атоми телуру є дефектами акцепторного типу, тому плівки халькогеніду повинні мати  $p$ -тип провідності у всьому інтервалі розглянутої нами зміни технологічних параметрів. Плівки, крім цього, повинні бути високоомними з концентрацією носіїв заряду, що не перевищує  $n=(10^{15}-10^{16})\text{ см}^{-3}$  у свіжесконденсованих плівках та  $(10^{13}-10^{14})\text{ см}^{-3}$  у загартованих. Ці концентрації вільних носіїв відповідають залягання рівня Фермі поблизу середини ЗЗ матеріалу. Використання при моделюванні ансамблю ТД глибин залягання ЛС одержаних методом ЕПР, приводить до кардинальних відмінностей у кінцевій картині.

Таблиця 6.3. Енергії залягання ЛС власних ТД, що використані при моделюванні

$E, \text{eV}$										Посилан ня
$E_{\nu^+}$				$E_{e^-}$						
$V_{Cd}^-$	$V_{Cd}^{2-}$	$Te_i^-$	$Te_i^{2-}$	$Cd_i^+$	$Cd_i^{2+}$	$V_{Te}^+$	$V_{Te}^{2+}$	$Te_{Cd}^+$	$Te_{Cd}^{2+}$	
0,05	0,80	0,15	0,57	0,02	0,17	0,01	0,34	-	-	[140]
0,13	0,21	0,67	0,74	0,46	0,56	-	0,71	0,34	0,59	[160, 164]
0	0,47	-	-	-	-	$E_{\nu^+}0,20$	0	0	0,20	[128]
0,20	0,60	0,67	0,74	0,02	0,17	0,01	0,34	0,16	0,40	Дана робота

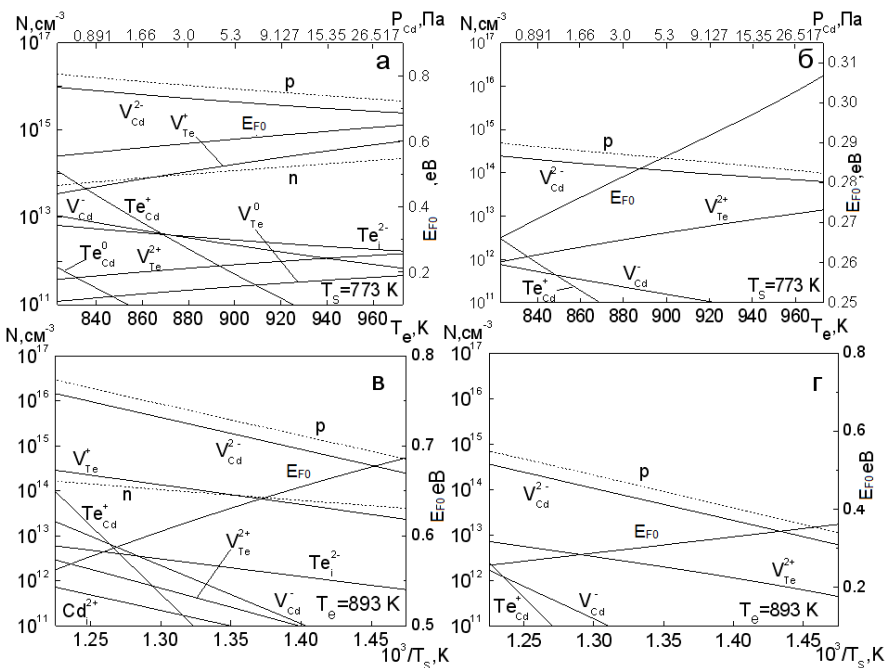


Рис. 6.9. Залежність концентрації ТД в плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  ( $P_{Cd}$ ): повна рівновага (а), гартування (б) та температури підкладки  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г). Розрахунки проведені з використанням енергій іонізації власних дефектів отриманих Веем [160, 164]

У ролі домінуючих дефектів в плівках при  $T_e < 853$  К тут виступають вакансії кадмію  $V_{Cd}^{2-}$ , які є акцепторами, а при більш високих температурах -  $V_{Te}^{2+}$ , які є донорами. Навпаки при  $T_s > 780$  К основними дефектами стають  $V_{Cd}^{2-}$ , а при зниженні цієї температури -  $V_{Te}^{2+}$ . Відповідно, домінування акцепторного або донорного ТД забезпечує  $n$  або  $p$  тип провідності плівок. Гартування зразків приводить до встановлення у них  $n$ - типу провідності у всьому вивченому інтервалі режимів конденсації.

Результати розрахунків проведених з використанням енергій залягання ЛС власних дефектів одержаних Веєм [160, 164] приведені на рис. 6.10. Ці розрахунки демонструють яскраво виражене домінування акцептора  $V_{Cd}^{2-}$  в усьому дослідженому інтервалі  $T_e$  і  $T_s$ . Відповідно незалежно від режимів конденсації плівки повинні мати  $p$ - тип провідності.

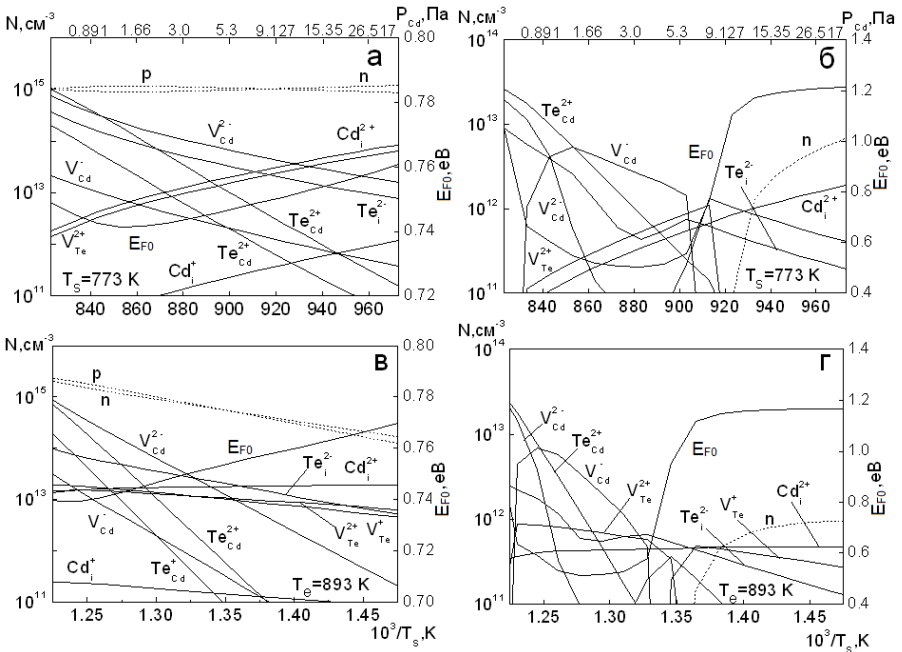


Рис. 6.10. Залежність концентрації ТД в плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  ( $P_{Cd}$ ): повна рівновага (а), гартування (б) та температури підкладки  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г). Розрахунки проведені з використанням набору енергій іонізації який розроблений у даній роботі.

Експериментальні дослідження показують, що плівки CdTe у більшості випадків є високоомними з концентрацією носіїв заряду, яка не перевищує ( $10^8$ - $10^{12}$ )  $см^{-3}$ . Вони в основному мають  $p$ -тип провідності, але можуть бути отримані і конденсати

з електронною провідністю. Ці концентрації вільних носіїв відповідають положенню рівноважного рівня Фермі поблизу середини ЗЗ матеріалу ( $E_{F0} = (0,57-0,62)$  eВ). Але, як видно з рис. 6.9-6.10, використання при моделюванні даних про глибину залягання ЛС ТД авторів [5, 133, 135, 160, 164] забезпечує низьку концентрацію вільних носіїв струму, яка є характерною для плівок CdTe, тільки у вузьких інтервалах режимів конденсації шарів. Таким чином, використання при моделюванні рівнів залягання власних дефектів, отриманих згідно методу ЕПР [128, 162, 163] розрахованих теоретично у [133-138, 164], або взятих з літературних джерел, як це зроблено у [5, 139, 140], не забезпечує збігу результатів розрахунків з експериментальними даними. Тому виникає необхідність застосування іншого набору енергій залягання ЛС власних ТД. Такий набір параметрів був розроблений нами на основі експериментальних досліджень проведених у даній роботі та результатів отриманих іншими авторами (табл. 6.3).

Проведені розрахунки свідчать, що домінуючими дефектами при високих температурах підкладки є  $V_{Cd}^{2-}$  та  $Te_{Cd}^{2+}$   $T_s > 770$  К тоді як при більш низьких температурах  $Cd_i^{2+}$ . Домінування залежно від температури підкладки донорних або акцепторних дефектів забезпечує зміну типу провідності плівок при  $T_s \sim 740$  К. Крім того розрахунки свідчать про наявність досить низької концентрації вільних носіїв струму ( $10^7-10^{12}$ )  $см^{-3}$  у швидко охолоджених плівках, що відповідає експериментальним результатам.

Таким чином, у цьому розділі були визначені умови отримання низькоомних та напівізольюючих плівок CdTe різного типу провідності, придатних для використання як базові шари СЕ та фотодетекторів (низькоомні плівки) або детекторів жорсткого випромінювання (напівізольюючі матеріали).

### 6.3. Розрахунок ансамблю ТД у сульфіді цинку в рамках квазіхімічного формалізму

#### 6.3.1. Розрахунок ансамблю ТД у монокристалах ZnS з використанням параметрів дефектоутворення розрахованих «*ab initio*»

Процеси дефектоутворення у монокристалах ZnS досліджені слабо, а роботи присвячені вивченню цих процесів у плівках нам не відомі зовсім.

Для дослідження стану ансамблю ТД у кристалах та плівках ZnS нами використані підходи описані вище. При моделюванні застосовувалася модель дефектоутворення запропонована Морозовою [130]. У цій моделі передбачається утворення нейтральних та заряджених дефектів, як за механізмом Шоткі, так і Френкеля:  $V_S^0$ ,  $V_S^+$ ,  $V_S^{2+}$ ,  $V_{Zn}^0$ ,  $V_{Zn}^-$ ,  $V_{Zn}^{2-}$ ,  $Zn_i^0$ ,  $Zn_i^+$ ,  $Zn_i^{2+}$ . Таким чином, система рівнянь, що буде описувати рівновагу дефектів у ZnS є більш простою ніж використана для опису дефектів у CdTe, оскільки не включає міжвузлові атоми за підґраткою халькогеніда та антиструктурні дефекти.

На першому етапі, з метою вибору найбільш адекватних констант квазіхімічних рівнянь шляхом порівняння результатів розрахунку за даними експериментальних робіт, нами був проведений розрахунок ансамблю ТД у монокристалічних зразках ZnS. У випадку повної рівноваги концентрація нейтральних дефектів у матеріалі може бути визначена з використанням співвідношень (6.8)-(6.10), (6.12), де  $A$  - Zn,  $B$  - S. Для розрахунку рівноваги заряджених ТД використовувалися рівняння (6.15)-(6.19), де співвідношення (6.19) повинно враховувати тільки вакансії та міжвузлові атоми цинку та вакансії сірки.

$$n + [V_{Zn}^-] + 2[V_{Zn}^{2-}] = p + [V_S^+] + 2[V_S^{2+}] + [Zn_i^+] + 2[Zn_i^{2+}], \quad (6.20)$$

При моделюванні також враховувалася температурна залежність ширини 33 зони ZnS у вигляді  $E_g(T) = E_g(0) - 5,263 \cdot 10^{-4} \cdot T$  [1, 150, 166, 167].

Енергія іонізації всіх заряджених дефектів, як і енергія рівня Фермі при подальших розрахунках відраховувалися від дна зони провідності. Фактори спінового виродження рівнів приймалися такими ж як і для дефектів у CdTe.

Як енергії іонізації заряджених ТД при моделюванні, нами були використані дані четвертої моделі Морозової (IV у таблиці 6.4).

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

$$[Zn_i^0] + [Zn_i^+] + [Zn_i^{2+}] = [Zn_i]_{tot} = f(T), \quad (6.21)$$

$$[V_S^0] + [V_S^+] + [V_S^{2+}] = [V_S]_{tot} = f(T) \quad (6.22)$$

$$[V_{Zn}^0] + [V_{Zn}^-] + [V_{Zn}^{2-}] = [V_{Zn}]_{tot} = f(T), \quad (6.23)$$

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

Результати чисельного розрахунку концентрації ТД, носіїв заряду та положення рівня Фермі у монокристалах ZnS залежно від  $P_{Zn}$  для випадків повної рівноваги дефектів та їх гартування наведені у [168].

Аналіз отриманих даних свідчить про достатньо добре узгодження наших результатів з результатами моделювання

Таблиця 6.4. Енергетичні рівні власних ТД у ZnS ( $E_C$  – енергія відкладена від зони провідності,  $E_V$  – від валентної зони)

Тип дефекту							Поси- лання
$V_{Zn}^-$	$V_{Zn}^{2-}$	$S_i^-$	$Zn_i^+$	$Zn_i^{2+}$	$V_S^+$	$V_S^{2+}$	
$E_C-3,17$ $E_V+0,35$	$E_C-1,88$ $E_V+1,64$	-	$E_C-$ 0,10	$E_C-$ 0,20	$E_C-1,60$	$E_C-2,00$ $E_V+1,52$	I-[130]
$E_C-2,92$ $E_V+0,60$	$E_C-0,75$	-	$E_C-$ 0,10	$E_C-$ 0,20	$E_C-1,60$	$E_C-2,00$ $E_V+1,52$	II- [130]
$E_C-2,95$ $E_V+0,57$	$E_C-2,42$ $E_V+1,10$	-	$E_C-$ 0,10	$E_C-$ 0,20	$E_C-1,60$	$E_C-2,00$ $E_V+1,52$	III- [130]
$E_C-3,00$ $E_V+0,52$	$E_C-1,62$	-	$E_C-$ 0,10	$E_C-$ 0,20	$E_C-1,56$	$E_C-2,00$ $E_V+1,52$	IV- [130]
$E_C-3,2$ $E_V+0,60$	$E_C-2,7$ $E_V+1,1$	-	-	-	$E_C-1,80$ $E_V+2,00$	$E_C-2,30$ $E_V+1,50$	[168]
$E_C-3,6$ $E_V+0,20$	$E_C-2,76$ $E_V+1,04$	-	-	-	-	-	[168]
$E_C-2,67$ $E_V+1,00$	$E_C-2,20$ $E_V+1,50$	-	-	-	$E_C-1,36$ $E_V+1,34$	$E_C-2,36$ $E_V+1,34$	[169]
$E_C-2,82$	-	$E_C-$ 2,96	-	$E_C-$ 2,93	-	$E_C-2,87$	[170]
$E_V+1,8$	$E_V+1,1$	-	-	-	$E_C-1,6$	$E_C-1,9$	[171]
$E_C-3,18$	-	$E_C-$ 2,97	-	$E_C-$ 2,93	-	$E_C-2,89$	[168]

Морозової [130]. Більш того, ці результати узгоджуються з експериментальними даними визначення концентрації вільних носіїв заряду в матеріалі. Це підтверджує реалістичність вибраної моделі дефектоутворення, констант квазіхімічних реакцій, а також енергій іонізації дефектів.

### 6.3.2. Розрахунок ансамблю ТД у плівках ZnS для випадків повної рівноваги та гартування

При дослідженні процесів дефектоутворення у монокристалах ZnS, було виявлено, що використана нами модель дефектоутворення з відповідними наборами констант квазіхімічних рівнянь досить добре описує експериментальні



дані [130]. Це дозволяє застосувати її для розрахунку ансамблю ТД в плівках ZnS нанесених у квазірівноважних умовах. При цьому, методика розрахунку ансамблю власних дефектів, застосована для вивчення монокристалів була, як і у випадку CdTe, адаптована для плівок.

До квазіхімічних рівнянь (6.8)-(6.10), (6.12) додавалися співвідношення виду:

$$ZnS^S \leftrightarrow Zn^G + \frac{1}{2}S_2^G, K_{ZnS} = P_{Zn} \cdot P_{S_2}^{1/2} = f(T_e) \quad (6.24)$$

$$\frac{1}{2}S_2^G \leftrightarrow S_S^0 + V_{Zn}^0, \frac{[V_{Zn}^0]}{P_{S_2}^{1/2}} = K_{S_2} = f(T_s). \quad (6.25)$$

При моделюванні ансамблю ТД у плівках, як і для монокристалів, розглядалися два крайніх випадки: повної рівноваги і гартування дефектів.

Розв'язання модернізованої системи квазіхімічних рівнянь проводився нами за методикою застосованою у випадку вивчення процесів дефектоутворення у монокристалах. Однак при розрахунках ансамблю ТД у плівках використовувалися уточнені з використанням методів фотолюмінесценції, вимірювання ВАХ СОПЗ та  $\sigma$ - $T$  залежностей значення енергій активації дефектів. Відповідні значення глибин залягання енергетичних рівнів власних дефектів ( $\Delta E_n$ ) наведені у таблиці 6.4. Результати розрахунку ансамблю ТД у плівках ZnS залежно від температури випарника  $T_e$ , при різних сталих температурах підкладки  $T_s$  наведені на рис. 6.11. На рис. 6.12 представлені результати моделювання рівноваги дефектів залежно від температури підкладки  $T_s$  при різних сталих температурах випарника  $T_e$ . Інтервали температур  $T_e$ ,  $T_s$  використаних при моделюванні відповідали реалізованим експериментально.

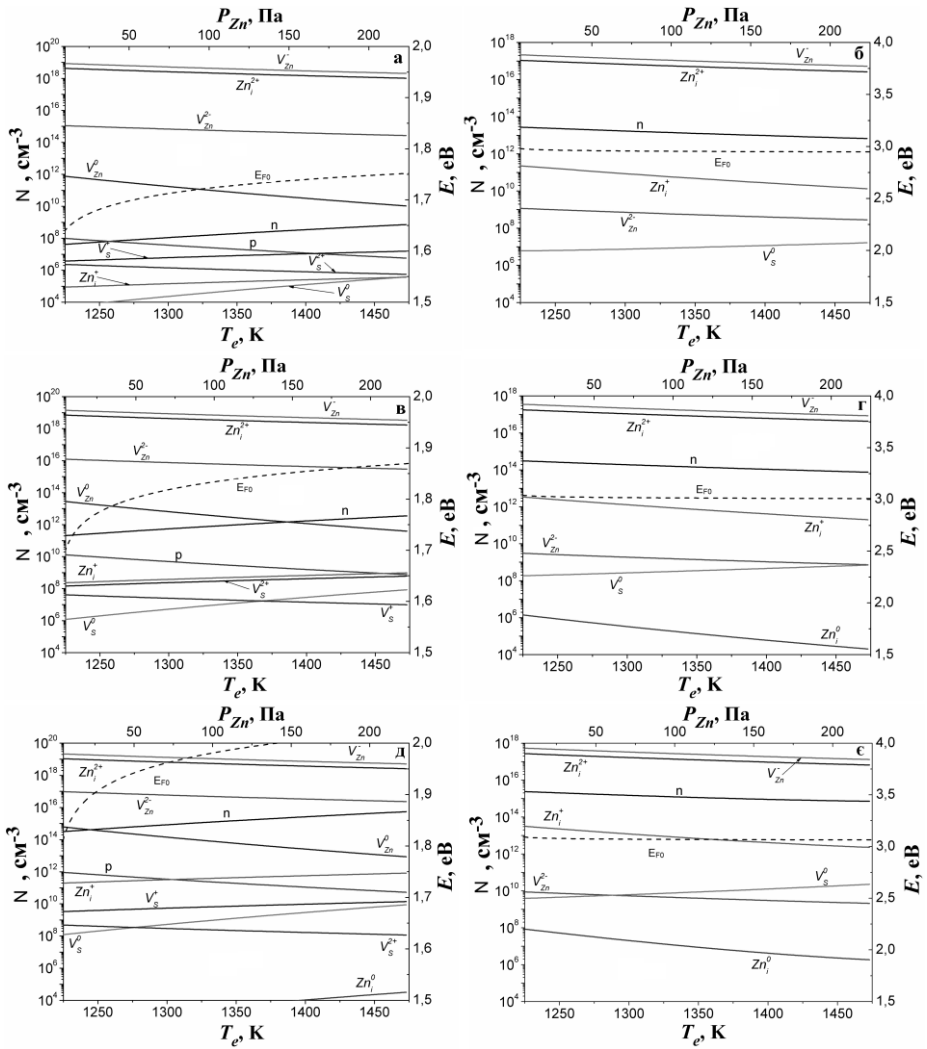


Рис. 6.11. Залежність концентрації власних ТД, носіїв струму та енергії Фермі в плівках ZnS від температури випарника  $T_e$  при різних температурах підкладки  $T_s$  (623 К (а, б); 773 К (в, г); 973 К (д, е)): повна рівновага (а, в, д); гартування до  $T = 293$  К (б, г, е)

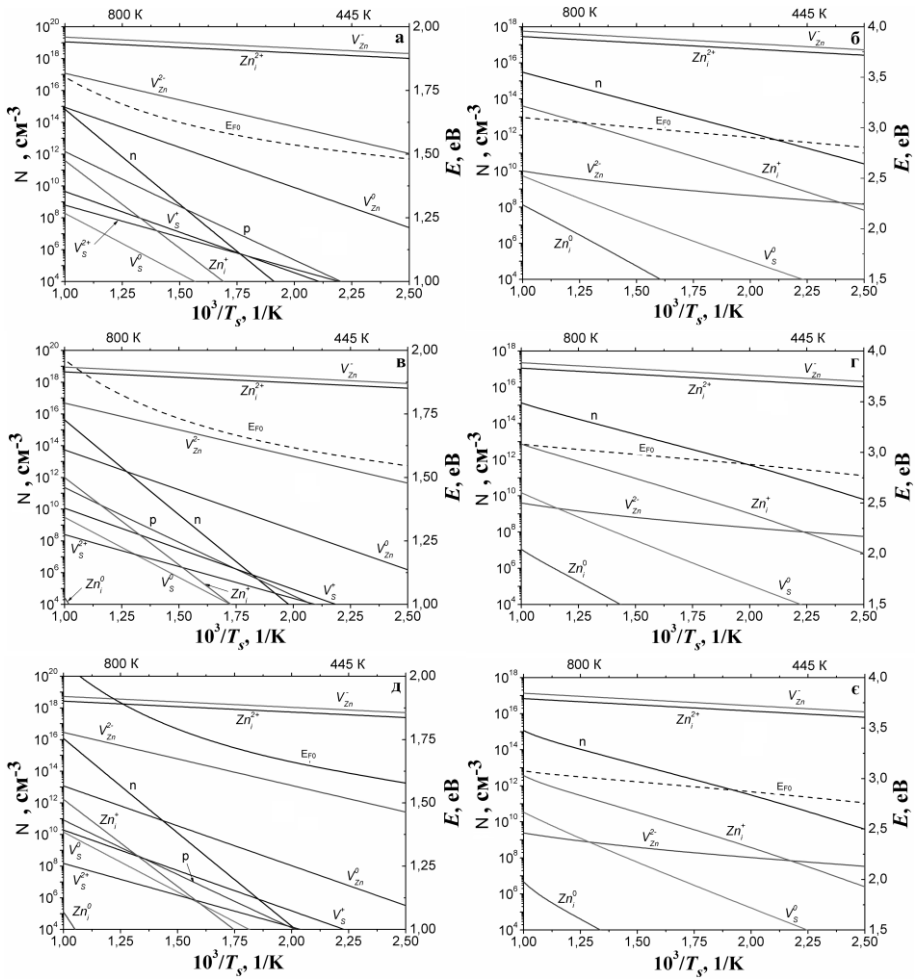


Рис. 6.12. Залежність концентрації ТД в плівках ZnS від зворотної температури підкладки  $10^3/T_s$ , при різних температурах випарника  $T_e$  (1223 К (а, б); 1373 К (в, г); 1473 К (д, е)): повна рівновага (а, в, д); гартування до  $T = 293$  К (б, г, е)

Як видно з рисунків, концентрація вільних носіїв заряду, ТД та положення рівня Фермі в плівках суттєво залежать від їх умов нанесення. У всьому дослідженому діапазоні фізико-технологічних умов конденсації домінуючими ТД дефектами у

шарах, як не загартованих, так і загартованих є  $V_{Zn}^-$  та  $Zn_i^{2+}$ .

Крім цього у помітній концентрації у повільно охолоджених плівках присутні двозаряджені вакансії цинку  $V_{Zn}^{2-}$ , в той час як у загартованих шарах спостерігаються міжвузлові однозаряджені атоми цинку  $Zn_i^+$ . Усі нейтральні ТД мають концентрацію суттєво нижчу ніж заряджені і їх наявністю у сполуці можна знехтувати.

Як свідчать результати розрахунків, практично у всьому інтервалі температур конденсації плівки ZnS мають електронний тип провідності. Лише у вузькому інтервалі температур підкладки при  $T_s < (600-550) ^\circ\text{C}$  та при встановленні рівноважного стану дефектів можуть бути отримані плівки  $p$ -типу провідності. Але реально ці фізико-технологічні умови реалізувати практично неможливо. Таким чином, результати моделювання добре збігаються з експериментальними, які свідчать, що монокристали та плівки нелегованого сульфиду цинку завжди мають електронний тип провідності.

Як видно з рис. 6.11 та 6.12 при збільшенні температури випарника та підкладки збільшується провідність плівок, однак концентрація власних носіїв заряду при цьому не перевищує  $n = (10^{15}-10^{16}) \text{ см}^{-3}$ , а у багатьох випадках становить  $n = (10^8-10^{10}) \text{ см}^{-3}$ . Гартування шарів приводить до деякого збільшення їх провідності порівняно зі зразками охолодженими повільно. Таким чином, результати моделювання свідчать про те, що плівки ZnS у широкому діапазоні температур конденсації залишаються високоомними. Ці висновки теж непогано корелюють з даними отриманими при вимірюванні провідності плівок ZnS як нами так і іншими авторами [172-176].

Результати моделювання ансамблю ТД у плівках ZnTe та ZnSe наведені нами у роботах [121, 177]. Використані моделі дефектоутворення запропоновані у [4, 130]. Як вже відмічалось, вони є значно простішими ніж використані для вивчення процесів дефектоутворення у телуриді кадмію, тому для розрахунків нами був використаний програмний комплекс який застосовувався для плівок CdTe.

## ГЛАВА 7

### ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЛС У НАПІВІЗОЛЮЮЧИХ СПОЛУКАХ $A_2B_6$

#### 7.1. Загальна характеристика ВАХ та $\sigma$ – $T$ залежностей плівок халькогенідів

##### 7.1.1. ВАХ багат шарових структур на основі плівок ZnTe

Використання плівок халькогенідів у ряді приладових структур потребує вивчення їх електрофізичних характеристик, як то питомого опору, концентрації та енергії залягання пасток та глибоких рекомбінаційних центрів, тощо.

Методика отримання та результати дослідження структурних характеристик плівок халькогенідів кадмію і цинку, ансамбль дефектів яких вивчався у подальшому, наведені у [151, 168]. Для вивчення електричних властивостей та визначення параметрів глибоких ЛС у 33 матеріалів вимірювалися темнові ВАХ сандвіч-структур – струмопровідна підкладка – плівка – верхній струмознімальний контакт при різних температурах вимірювання. Крім цього, досліджувалися залежності провідність - температура на омичній, а у ряді випадків квадратичній ділянках ВАХ. Енергії залягання донорних (акцепторних) центрів у плівках знаходились із залежностей  $\lg \sigma = f(10^3/T)$ , враховуючи той факт, що вони описуються рівнянням Арреніуса.

Для дослідження енергетичного спектру ЛС ТД у плівках сполук нами також був застосований метод, що базується на аналізі ВАХ у режимі СОПЗ. Відомо [1, 17-21], що нелінійності і стрибки струму на ВАХ дозволяють визначити такі важливі характеристики пасток як їх енергія залягання у 33 напівпровідника ( $E_i$ ) та концентрація ( $N_i$ ). Для отримання

інформації про параметри ЛС, нами, наряду з традиційним модельним підходом, використовувався метод ІС глибоких пасток розвинутий раніше. Метод аналізу ВАХ СОПЗ був вибраний для дослідження ЛС у плівках, завдяки своїй високій чутливості до їх низьких концентрацій ( $N_t < 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ) та можливості застосування до напівізолюючих матеріалів, якими, внаслідок свого високого опору, є тонкі шари сполук  $A_2B_6$ .

Типові ВАХ, виміряні при різних температурах, багат шарових структур, де плівки  $ZnTe$  були отримані при різних фізико-технологічних умовах конденсації, побудовані у подвійних логарифмічних координатах, наведені на рис 7.1. На цьому рисунку також представлені  $\sigma-T$  залежності, зняті на омічній ділянці кривих струм – напруга.

Як видно з рисунку, залежності провідність-температура низькотемпературних конденсатів являють собою дві-три лінійні ділянки, кут нахилу яких до осі  $T$  (рис. 7.1 а) зменшується при зменшенні температури вимірювання. Такі особливості  $\sigma-T$  залежності є характерними для матеріалу, який містить декілька видів акцепторних домішок з різною енергією активації. У випадку  $ZnTe$ , який має  $p$ -тип провідності, вигляд  $\sigma-T$  залежностей визначається саме акцепторними домішками. Деяко інший вигляд мають залежності виськотемпературних конденсатів (рис. 7.1 в, г). Тут ми бачимо лінійні ділянки, кут нахилу яких до осі  $T$  збільшується при зменшенні температури вимірювання. Це є характерним для скомпенсованих матеріалів [2, 3]. Вплив компенсації починає проявлятися при достатньо низьких температурах вимірювання, коли концентрація електронів стає близькою до концентрації акцепторних центрів. При цьому, кут нахилу прямих до осі  $T$  зростає від значення  $\Delta E_a/2k$  до значення  $\Delta E_a/k$ , звідки можна визначити енергію активації акцепторних станів.

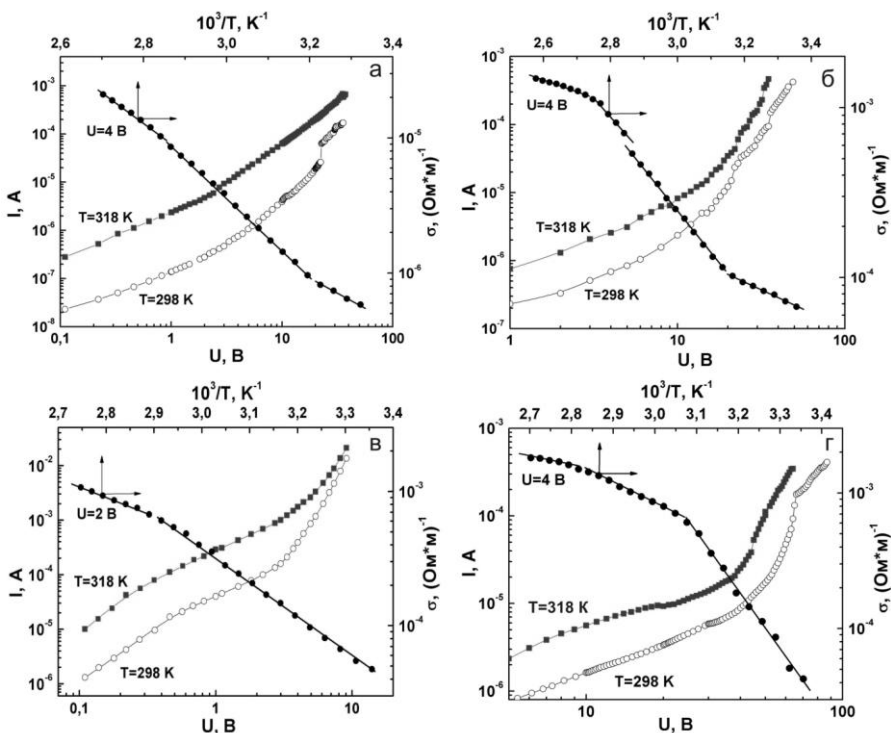


Рис. 7.1. Типові ВАХ структур Cr/ZnTe/Ag, виміряні при різних температурах, та залежності  $\lg \sigma - 1/T$ , одержані на омичній ділянці ВАХ. Плівки отримані при  $T_e = 973$  К та  $T_s$ : 673 К (а), 773 К (б), 823 К (в), 873 К (г)

Більш докладну інформацію про параметри ЛС в напівпровідникових плівках ZnTe можна отримати, знімаючи температурні залежності провідності на омичній та квадратичній ділянках ВАХ [1, 9, 23]. Кут нахилу прямих до осі  $T$  на квадратичній ділянці дозволяє безпосередньо знайти енергію залягання пасток, при цьому виявляються більш мілкі рівні, оскільки глибокі заповнені носіями заряду, інжекттованими у матеріал з контакту.

На рисунку 7.2 наведено ряд ВАХ, знятих при різних

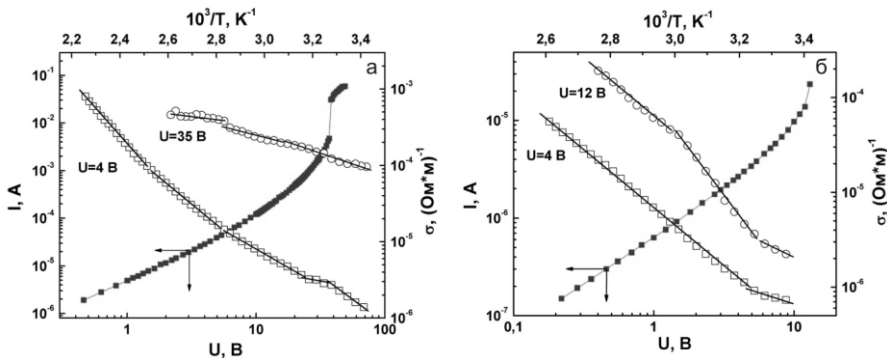


Рис. 7.2. Типові ВАХ структур Cr/ZnTe/Cr, виміряні при кімнатній температурі та залежності  $\log \sigma - 1/T$ , одержані на омічній та квадратичній ділянках ВАХ. Плівки ZnTe отримані при  $T_e = 973$  К та  $T_s$ : 623 К (а); 723 К (б)

температурах вимірювання та залежність провідність-температура зняту на їх омічній ділянці. З рисунку видно, що провідність зразків при збільшенні  $T$  зростає, одночасно напруга повного заповнення пасток  $U_{TFL}$ , після якої відбувається різке збільшення провідності плівки, слабо залежить від температури.

Як показали дослідження, вигляд ВАХ багаточарових структур метал-напівпровідник-метал визначається умовами конденсації плівок халькогеніду, їх кристалічною структурою, матеріалом верхнього і нижнього струмознімальних контактів. Встановлено, що у випадку структур Cr/ZnTe/Ag, при різній полярності напруги зміщення, їх ВАХ були несиметричними. При цьому коефіцієнт випрямлення при  $U \sim 0,5$  найчастіше складав 3-5. Прямому напрямку відповідала негативна полярність на верхньому струмознімальному контакті. Такі особливості ВАХ свідчать про утворення в структурі потенціального бар'єру на межі метал-напівпровідник. Найбільш



цікавим було те, що асиметрію проявляли ВАХ симетричних структур Cr/ZnTe/Cr (рис. 7.3). Така асиметрія спостерігалася як в області малих, так і в області великих напруг зміщення, коли вигляд ВАХ визначався протіканням СОПЗ. Цей ефект є нетривіальним і потребує пояснення. Раніше, в результаті моделювання, нами було показано, що асиметрія ВАХ, при великих напругах зміщення, може бути обумовлена просторовою неоднорідністю зразків, пов'язаною з присутністю приповерхневих ЛС або розподілом пасток за товщиною зразків.

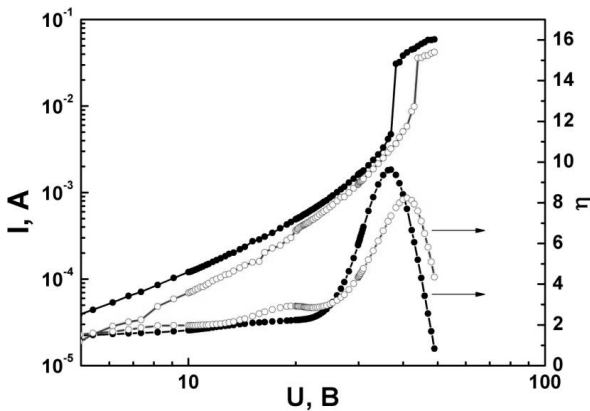


Рис. 7.3. Типова ВАХ СОПЗ багат шарової структури Cr/ZnTe/Cr у подвійних логарифмічних координатах при прямій (·) та оберненій (–) полярності напруги зміщення та результати її диференціювання. Плівка ZnTe отримана при  $T_e = 973$  К та  $T_s = 623$  К

На ВАХ високотемпературних конденсатів ZnTe, в області високих напруженостей поля, спостерігалось декілька лінійних ділянок з різним нахилом до осі напруги. Як правило, виділялись ділянки з залежністю струму від напруги виду:  $I - U$ ,  $I - U^2$ ,  $I - U^{3-5}$ ,  $I - U^{8-10}$ . У ряді випадків після суперлінійних ділянок спостерігалась квадратична залежність  $I$  від  $U$ , яка потім

знову переходила у суперлінійну з дуже великим нахилом  $\eta$  ( $\eta \sim 13-25$ ). Після цього відбувався стрибок струму, і зразки переключалися у низькоомний стан. Перехід високоомних зразків у низькоомний стан при цьому, у більшості випадків, був незворотним.

Особливості ВАХ добре розрізняються на залежностях  $\eta - \log U$ , які дозволяють виявити тонку структуру кривих струм-напруга (рис.7.3). Кожна точка цього графіку визначає кут нахилу кривої струм-напруга у подвійному логарифмічному масштабі до осі напруги. Залежності  $\eta - \log U$  були одержані нами шляхом знаходження похідної у кожній експериментальній точці ВАХ СОПЗ. Як вже вказувалося, математично задача зводилася до побудови згладжувального кубічного сплайна, що апроксимує експериментальні дані та його диференціювання у вузлах.

Вигляд отриманих ВАХ при високій напрузі зміщення є характерним для монополярної інжекції носіїв, але оскільки згідно з [1, 24] існують інші механізми струмоперенесення через зразки, які призводять до якісно подібних залежностей струм – напруга, проводилась додаткова їх ідентифікація згідно процедури, описаній раніше. Для цього здійснювався спільний аналіз залежностей  $\lg I - \lg U$ ,  $\eta - \lg U$  та  $\log \eta - \lg U$ . Це дозволило ідентифікувати відповідні високовольтові механізми зарядоперенесення у зразках, а у деяких випадках визначити їх тип.

Для подальшого уточнення домінуючого механізму струмоперенесення через базовий шар ZnTe, нами у екстремальних точках залежності  $\eta - \lg U$  розраховувався коефіцієнт дискримінації  $Q_{ext}$  та проводилося його співставлення з коефіцієнтами, характерними для інших механізмів [24]. Для цього використовувалися програми розроблені у [178]. В

результаті розрахунків з'ясувалося, що практично у всіх випадках  $Q_{ext} > 10^6 - 10^7$ , що суттєво перевищує значення  $Q_{ext}$ , характерні для польової іонізації пасток, а також бар'єрного механізму зарядоперенесення у матеріалі. Це, у відповідності до [24], свідчить про те, що екстремуми на залежностях  $\eta - \lg U$  обумовлені заповненням пасток, розміщених у плівках ZnTe, носіями заряду, інжекттованими з металевого контакту. Використання декількох методів визначення механізму зарядоперенесення у досліджених структурах, які доповнюють один одного, дозволило з великою достовірністю стверджувати, що особливості ВАХ багат шарових структур, де плівки ZnTe отримані при  $T_s > 573$  К, були обумовлені саме механізмом СОПЗ.

Вигляд ВАХ низькотемпературних конденсатів ZnTe часто визначався механізмом Пула-Френкеля [179], який виникає при пониженні термічної енергії іонізації мілких кулонівських центрів у присутності зовнішнього електричного поля. В результаті цього зростає ймовірність вивільнення носіїв заряду, захоплених ЛС. Відомо, що густина інжекційного струму при цьому описується виразом [179], який лінійлізується у координатах  $\lg I/U - U^{1/2}$ . Саме така залежність і спостерігалася експериментально. Це вказує на присутність у зразках високої концентрації достатньо мілких ЛС.

У подальшому, нами оброблялися тільки ВАХ, вигляд яких був обумовленим інжекційними струмами. На таких кривих, ділянці стрімкого зростання струму, як правило, передує ділянка з майже квадратичною залежністю  $I$  від  $U$  (рис. 7.1 - 7.3). Це є характерним для СОПЗ у випадку присутності у зразках мілких пасток [1].

На кривих  $\eta - \lg U$ , отриманих у результаті обробки ВАХ СОПЗ, як правило, спостерігалось 1-2 максимуми, яким на  $I - U$  залежностях відповідали ділянки стрімкого зростання струму.

При цьому, найбільш часто, значення  $\eta_{\text{ext}}$  лежали в інтервалі 8–10. Іноді на залежності  $\eta - \log U$  виявлялися практично горизонтальні ділянки з майже сталим нахилом  $\eta > 2$ . Особливості ВАХ у першому і другому випадках можна пояснити присутністю у зразках ряду моноенергетичних або близьких до моноенергетичних пасток з різною глибиною залягання і концентрацією, або присутністю експоненціального (чи іншої форми) розподілу ЛС за енергією. Особливі точки ВАХ СОПЗ та суперлінійні ділянки у подальшому були використані для розрахунку параметрів пасток в матеріалі, омічні ділянки – для розрахунку питомої провідності шарів ZnTe, яка становила  $\sigma = (10^4 - 10^5)$  Ом·м.

Результати вивчення енергетичного спектру пасток у плівках ZnTe можливо частково перевірити шляхом дослідження температурної залежності провідності конденсатів. Типові графіки  $\lg \sigma - 1/T$ , зняті на омічній ділянці ВАХ, наведені на рис. 7.1-7.2. У області температурної активації провідності звичайно спостерігалось 2–3 лінійні ділянки, з нахилу яких визначалася енергія активації провідності. Розрахунки цієї енергії проводились у відповідності з виразами, характерними для некомпенсованих або компенсованих напівпровідників, залежно від вигляду залежності  $\lg \sigma - 1/T$  [2, 3, 13, 14]. Слід відмітити, що нами [180], як і авторами [181], спостерігалася зміна провідності досліджуваних зразків при їх відпалах у процесі знімання  $\sigma - T$  залежностей. Як правило, стабілізація властивостей плівок ZnTe спостерігалася після другого відпалу до 373 К, саме після цього визначалися параметри ЛС у матеріалі.

### **7.1.2. ВАХ багат шарових структур на основі плівок CdTe**

Дослідження плівок інших халькогенідів здійснювалося аналогічно до того як це було описано для шарів ZnTe. Типові

ВАХ від багат шарових структур, де плівки CdTe отримані при різних фізико–технологічних умовах конденсації, наведені на рис 7.4. Як показали дослідження, вид ВАХ, як і у випадку плівок ZnTe, визначається умовами конденсації базового матеріалу, його кристалічною структурою, матеріалами струмознімальних контактів.

Встановлено, що у випадку структур Ag/CdTe/Мо при малій напрузі зміщення і різній полярності ВАХ структур були майже симетричними. При цьому коефіцієнт випрямлення при  $U \sim 0,5$  В не перевищував 5, а у більшості випадків складав 1,1–2,0. Прямому напрямку відповідала негативна полярність на верхньому струмознімальному контакті. ВАХ структур In/CdTe/Мо при прямому зміщенні в основному були схожі на залежності струм – напруга сандвіч структур Ag/CdTe/Мо, але при зворотній напрузі на ВАХ спостерігалися сублінійні ділянки, що свідчить про випрямлення струму у зразках внаслідок існування заборного шару.

На ВАХ високотемпературних конденсатів при негативній полярності на верхньому контакті спостерігалось декілька лінійних ділянок з різним нахилом до осі напруги:  $I-U$ ,  $I-U^2$ ,  $I-U^{3-5}$ ,  $I-U^{7-8}$ . У ряді випадків, після суперлінійних ділянок знову спостерігалась квадратична залежність  $I$  від  $U$ , яка потім переходила у суперлінійну з нахилом  $\eta \sim 13-25$ . Особливості ВАХ добре розрізняються на залежностях  $\eta - \lg U$ , які дозволяють виявити тонку структуру кривих струм-напруга (рис.7.5). Методика диференцювання ВАХ була описана нами раніше.

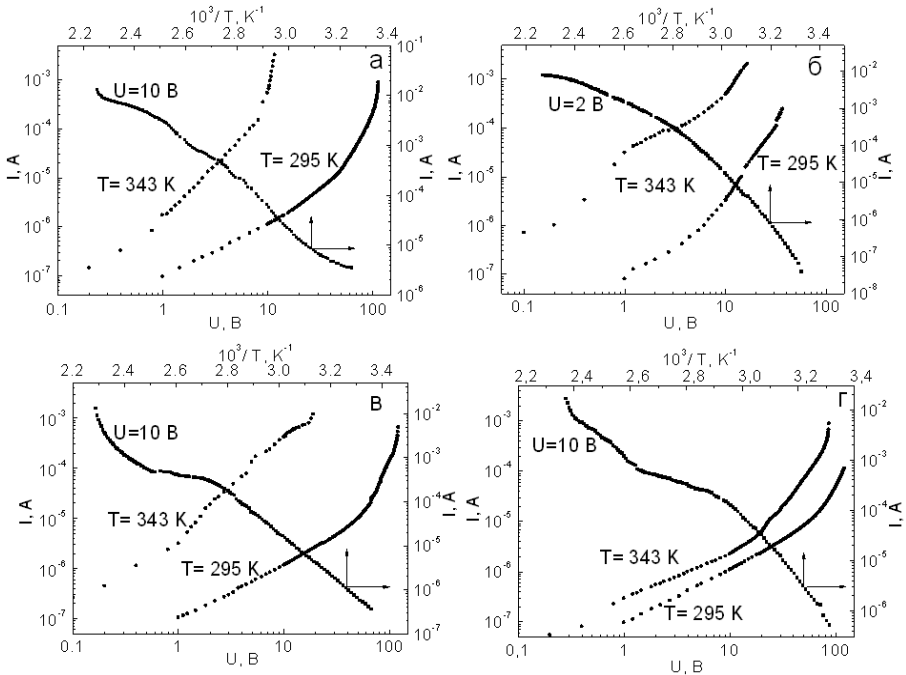


Рис. 7.4. Типові ВАХ структур Ag/CdTe/Mo, виміряні при різних температурах  $T$  та  $\log \sigma - 1/T$  залежності одержані при напрузі  $U$ . Плівки CdTe отримані при  $T_e = 893$  K та  $T_s$ : 773 K (а); 748 K (б); 723 K (в); 673 K (г)

Вигляд ВАХ досліджених зразків при зміні полярності і величини напруги зміщення  $U$ , як показано у [182, 183], можна пояснити у рамках діодної моделі у присутності високого послідовного опору діода. У цьому випадку при низьких напругах струм через багат шарову структуру обмежується збідненим шаром на границі поділу плівка CdTe – провідна підкладка, а при високих напругах – об’ємним зарядом у базовому шарі. Зразок при цьому необхідно розглядати як довгу інжекційну структуру [183, 183]. У ряді випадків необхідно враховувати тунельно прозорий шар окису  $\text{TeO}_2$ , який дуже

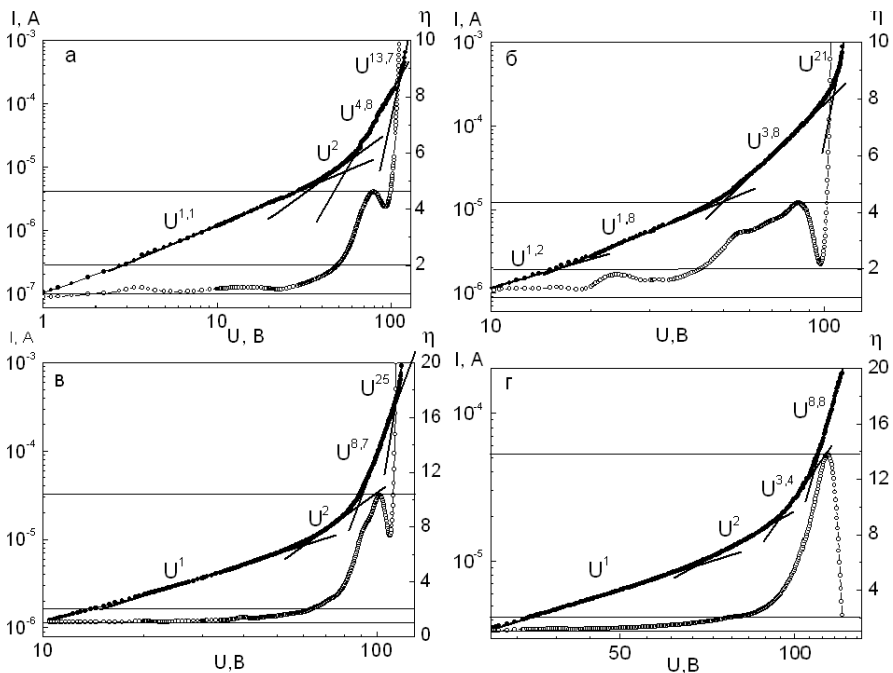


Рис. 7.5. ВАХ СОПЗ багат шарових структур Ag/CdTe/Mo у подвійних логарифмічних координатах та результати їх диференціювання. Плівки CdTe отримана при  $T_e = 893$  K та різних  $T_s$ : 723 K (а); 773 K (б); 798 K (в); 823 K (г)

швидко утворюється на поверхні CdTe при винесенні плівок на повітря, що встановлено раніше.

Вигляд отриманих ВАХ при високій напрузі зміщення є характерним для монополярної інжекції носіїв, але для уточнення механізму зарядоперенесення нами проводився додатковий аналіз кривих аналогічний тому який здійснювався для плівок ZnTe. Залежності  $\lg \eta - \lg U$  які використовувалися для ідентифікації режимів перенесення у багат шарових структурах наведені на рис. 7.6. Результати розрахунків дискримінаційного коефіцієнта  $Q_{ext} > 10^6 - 10^7$  та його порівняння

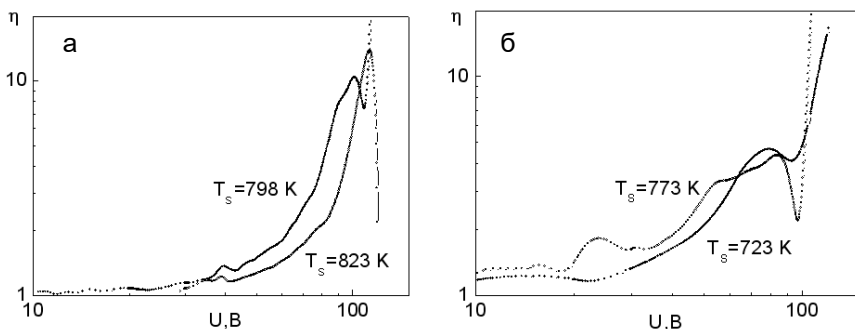


Рис. 7.6. Залежності  $\log \eta - \log U$ , які використовувалися для ідентифікації режимів перенесення у багатошарових структурах Ag/CdTe/Mo, з базовим шаром CdTe отриманим при  $T_e = 893$  K та різних температурах підкладки  $T_s$

з коефіцієнтами характерними для інших механізмів зарядоперенесення наведені у таблиці 7.1 однозначно свідчать, що особливості ВАХ обумовлені саме механізмом СОПЗ.

Високо польові механізми зарядоперенесення (ефект Пула-Френкеля чи інші) у плівках CdTe, як свідчить аналіз залежностей  $\lg \eta - \lg U$ , спостерігались лише при нарузі близької до переключення структур у низькоомний стан. Перехід високоомних зразків у низькоомний стан при цьому, у більшості випадків, як і для плівок ZnTe, був незворотним.

Як вже вказувалося подальшій обробці піддавалися лише ВАХ вигляд яких обумовлений СОПЗ [9, 23, 184]. На кривих  $\eta - \lg U$ , отриманих у результаті обробки ВАХ СОПЗ структур з шаром CdTe, як правило, спостерігалось 1–4 максимуми. Їм на  $I - U$  залежностях відповідали ділянки стрімкого зростання струму, обумовлені заповненням пасток.  $\eta_{ext}$  в цих точках найбільш часто приймало значення 4–8.



Таблиця 7.1 Результати ідентифікації механізмів зарядоперенесення через зразки

Режим конденсації плівки	№ максимуму	$U, \text{В}$	$\eta$	$Q_{BE}$	$Q_{PI}$	$Q_{ext}$	Механізм зарядо-перенесення
$T_s=723 \text{ К}$ , $T_e = 893 \text{ К}$	1	79,5	4,6	6,4	18,5	1980460,4	СОПЗ
$T_s=748 \text{ К}$ , $T_e = 893 \text{ К}$	1	14,4	3,9	15,9	15,5	259767,3	СОПЗ
	2	32,3	6,3	81,8	25,3	131352,7	СОПЗ
$T_s=773 \text{ К}$ , $T_e = 893 \text{ К}$	1	84,3	4,3	4,4	17,3	1075780,9	СОПЗ
$T_s=798 \text{ К}$ , $T_e = 893 \text{ К}$	1	102,3	10,3	625,6	41,1	1766607,7	СОПЗ
$T_s=823 \text{ К}$ , $T_e = 893 \text{ К}$	1	113,7	13,8	6721,8	55,1	2872623,4	СОПЗ

На залежності  $\eta - \lg U$  також виявлялися ділянки з майже постійним нахилом  $\eta > 2$ . Як вже вказувалося, такі особливості ВАХ можна пояснити присутністю у зразках ряду моноенергетичних або близьких до моноенергетичних пасток з різною глибиною залягання і концентрацією або присутністю експоненціального (чи іншої форми) розподілу ЛС за енергією.

Як показано раніше та у роботах [92, 105, 185, 186], метод ІС за ВАХ СОПЗ дозволяє побудувати залежності  $h(E)=1/e \cdot d\rho/dE_F - E_F$ , які фактично дають можливість реконструювати енергетичний розподіл пасток у ЗЗ матеріалу. При розрахунках параметрів ЛС їх глибина залягання знаходилась згідно положення максимуму на залежності  $h(E)$ , а концентрація визначалась за площею під кривою. Для обробки експериментальних даних нами в основному використовувалося низькотемпературне наближення методу ІС [178, 186, 187]. При цьому застосовувались як точні, так і спрощені співвідношення методу. Використовувались також модельні уявлення розвинуті у [1, 17], які базуються на параболічній апроксимації ступеня ВАХ. Це дозволило суттєво підвищити достовірність одержаних

результатів, а також уникнути похибок, пов'язаних з некоректністю операції диференціювання, яка використовується при обробці ВАХ. Деякі результати реконструкції енергетичного розподілу пасток у зразках з використанням методу ІС наведені на рис.7.7.

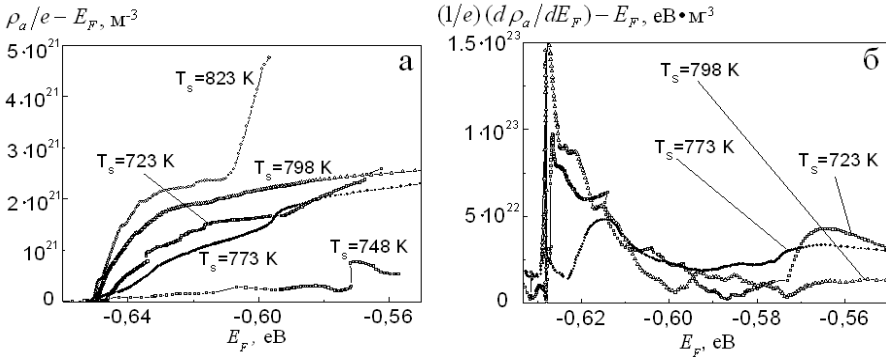


Рис. 7.7. Типові диференціальні криві  $\rho_a/e - E_F$  (а) та  $\frac{1}{e} \frac{d\rho_a}{dE_F} - E_F$  (б), які одержані у результаті обробки ВАХ СОПЗ

(б), які одержані у результаті обробки ВАХ СОПЗ

Результати вивчення енергетичного спектру пасток у плівках CdTe методом ВАХ СОПЗ перевірялися шляхом дослідження температурної залежності провідності конденсатів. Типові графіки  $\lg\sigma - 1/T$  зняті на омичній ділянці ВАХ наведені на рис. 7.8. Як видно з цього рисунка, для досліджених сандвіч-структур в області високих температур має місце активаційна залежність провідності, яка при зниженні  $T$  переходить у безактиваційну. У області температурної активації провідності спостерігалось 2–4 лінійні ділянки, розділені ділянкою насичення домішок, де нахил лінії визначався температурною залежністю рухливості носіїв. Енергія активації провідності визначалась нами на кожній лінійній ділянці кривої  $\lg\sigma - 1/T$  ( $\lg\sigma T^{3/2} - 1/T$ ).

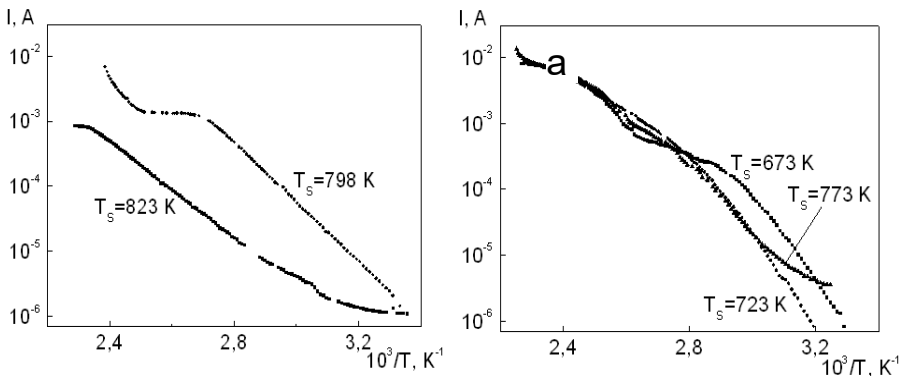


Рис. 7.8. Типові залежності  $\log \sigma-1/T$  зняті на омичній ділянці ВАХ сандвіч структур Ag/CdTe/Mo. Плівки CdTe отримані при  $T_e = 893$  K та різних температурах підкладки  $T_s$

Розрахунки активаційної енергії проводились у відповідності з виразами характерними для некомпенсованих або компенсованих напівпровідників залежно від вигляду функції  $\lg \sigma-1/T$  [13, 14].

### 7.1.3. ВАХ багат шарових структур на основі плівок ZnS

Використання плівок сульфиду цинку як базового шару ряду приладових структур потребує детального дослідження їх електрофізичних характеристик. Проте, як відомо з літературних джерел [157, 187] електричні властивості конденсатів ZnS вивчені недостатньо. Це пов'язано з високим питомим опором монокристалів і плівок цієї сполуки, який може приймати значення від  $\rho = 10^{12}$  Ом·м до  $\rho = 10^{16}$  Ом·м [188, 189], що технологічно ускладнює електрофізичні дослідження.

Типові ВАХ, побудовані у подвійних логарифмічних координатах, та  $\sigma-T$  залежності, зняті на омичній ділянці кривих струм – напруга плівок ZnS, отриманих при різних фізико-технологічних умовах конденсації, наведені на рис. 7.9.

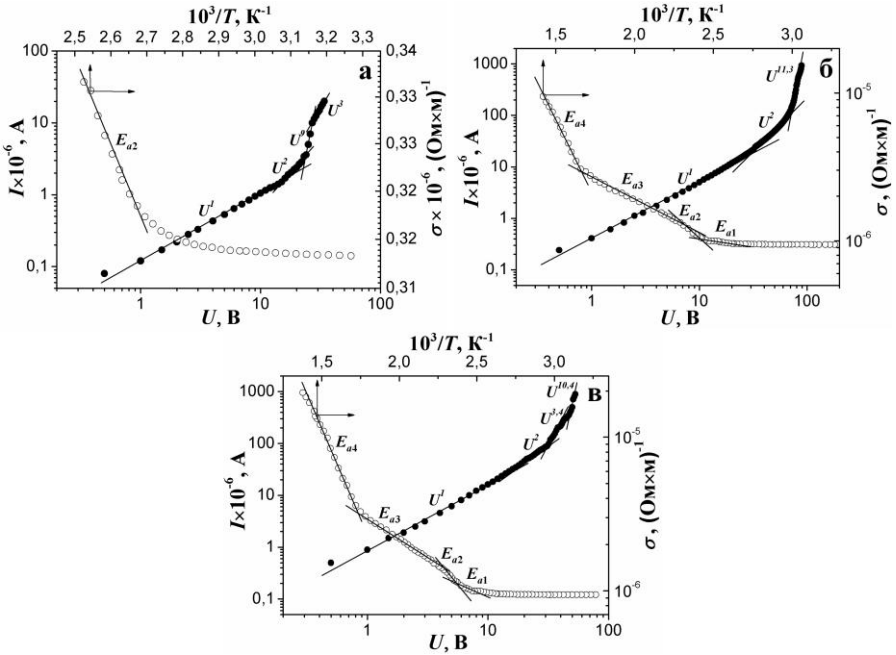


Рис. 7.9. Типові ВАХ структур In/ZnS/Mo одержані при кімнатній температурі та  $\lg\sigma - T$  залежності зняті на омичній ділянці ВАХ. Плівки ZnS отримані в різних технологічних умовах ( $T_e = 1173$  К):  $T_s = 523$  К (а); 590 К (б); 673 К (в)

ВАХ високотемпературних конденсатів ZnS у подвійному логарифмічному масштабі були подібними до таких від плівок ZnTe та CdTe. На цих залежностях спостерігалось декілька лінійних ділянок з різним нахилом до осі напруги:  $I-U$ ,  $I-U^2$ ,  $I-U^{3-7}$  та  $I-U^{9-11}$ . Як вже вказувалося, така зміна кутів нахилу ВАХ при підвищенні напруги зміщення є характерною для заповнення моноенергетичних пасток а відповідні особливі точки  $I-U$  - залежності можуть бути використані для визначення параметрів цих ЛС. Як і для інших халькогенідів  $\sigma - T$  залежності від досліджених структур в основному являють собою декілька лінійних ділянок, кут нахилу яких до осі  $T$

зменшується при зниженні температури вимірювання (рис. 7.9). В області кімнатних температур спостерігається ділянка з нульовим нахилом яка відповідає області насичення мілких домішок. Такі особливості  $\sigma-T$  залежностей є характерними для матеріалу, який містить декілька видів донорних домішок з різною енергією активації. Слід зазначити, що для плівки нанесеної при  $T_s = 523$  К (рис. 7.9, а) нам не вдалося провести вимірювання в області високих температур, це пояснюється електричним пробоем досліджуваного зразка при збільшенні цієї температури до 400 К.

Саме тому на  $\sigma-T$  залежності зразка було зафіксовано лише три лінійні ділянки з малими енергіями активації. Для зразків отриманих при більших температурах конденсації (рис. 7.9 б, в) характерною є присутність 4-5 лінійних ділянок. Крім цього на  $\sigma-T$  залежностях таких зразків спостерігаються ділянки де кут нахилу з підвищенням температури вимірювання не зменшується, а навпаки збільшується. Це явище є характерним для скомпенсованих матеріалів [2, 3, 13, 14] і свідчить про присутність в матеріалі наряду з донорними - акцепторних центрів.

Для вивчення впливу відпалювання на електрофізичні властивості плівок ZnS нами було проведене дослідження  $\sigma-T$  залежності зразка халькогеніду, як при його нагріванні, так і при охолодженні. При переході від нагрівання до охолодження зразка вигляд залежності провідність – зворотна температура дещо змінювався, це проявлялося у збільшенні енергії активації питомої провідності в області високих температур вимірювання. Це свідчить про зміну ансамблю ТД у плівці при її відпалі.

## 7.2. Визначення параметрів ЛС плівок халькогенідних сполук із ВАХ СОПЗ та $\sigma$ - $T$ залежностей

### 7.2.1. Параметри ЛС у плівках ZnTe

Результати розрахунків параметрів ЛС у конденсатах ZnTe, отриманих в різних фізико-технологічних умовах, знайдені з ВАХ шляхом їх аналізу наведені у таблиці 7.2. Цим методом у плівках ZnTe виявляється ряд груп пасток з найбільш ймовірною глибиною залягання, що складає  $E_{t1} = 0,21$  еВ;  $E_{t2} = (0,32-0,34)$  еВ,  $E_{t3} = 57$  еВ;  $E_{t4} = (0,41-0,42)$  еВ;  $E_{t5} = 0,89$  еВ. Точність розрахунків глибини залягання пасток не перевищувала  $kT$ , тобто 0,026 еВ при кімнатній температурі. Концентрація знайдених ЛС лежить в інтервалі  $N_t = (10^{14} - 10^{15}) \text{ см}^{-3}$ . У більшості зразків домінуючими пастками, які в основному визначали вигляд ВАХ СОПЗ, є ЛС з енергією  $E_t = (0,32-0,33)$  еВ.

В останньому рядку таблиці 7.2 наведені результати розрахунку параметрів пасток у зразках з симетричними контактами Cr/ZnTe/Cr. Знімання ВАХ проводилось при прямій і оберненій напрузі зміщення (плюс або мінус на верхньому контакту), прикладеній до зразка. Як видно з таблиці, отримані значення параметрів ЛС дещо відрізняються між собою. Цю відмінність, як вже вказувалося, можна пояснити просторовою неоднорідністю зразків. Аналіз свідчить, що концентрація пасток біля підкладки є більшою ніж на відкритій поверхні плівки. Це узгоджується з даними структурних досліджень, які свідчать про зростання розміру зерен та покращення якості плівок при збільшенні їх товщини.

Інтервал сканування спектру ЛС у плівках ZnTe визначався положенням рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$ , тобто його положенням при відсутності інжекції носіїв у зразок (на омічній ділянці ВАХ), та квазірівня Фермі у момент переключення багат шарових структур у низькоомний стан. Початкове положення рівня

Таблиця 7.2. Параметри ЛС у плівках ZnTe, знайдені з ВАХ СОПЗ

Режим конденсації плівок	з ВАХ СОПЗ		з $\sigma - T$ залежності на квадратичній ділянці	
	$E_t$ , eВ	$N_t$ , $\text{см}^{-3}$ ,	$E_t$ , eВ	$N_t$ , $\text{см}^{-3}$ ,
$T_s = 623$ К, $T_e = 973$ К	-	-	0,21	$2,1 \cdot 10^{14}$
	0,34	$8,6 \cdot 10^{14}$	0,34	$7,3 \cdot 10^{14}$
$T_s = 673$ К, $T_e = 973$ К	0,33	$5,3 \cdot 10^{14}$	-	-
$T_s = 723$ К, $T_e = 973$ К	0,34	$2,9 \cdot 10^{14}$	0,33	$4,1 \cdot 10^{14}$
	-	-	0,57	$5,5 \cdot 10^{14}$
	-	-	0,89	$8,4 \cdot 10^{14}$
$T_s = 773$ К, $T_e = 973$ К	0,32	$5,3 \cdot 10^{14}$	-	-
$T_s = 823$ К, $T_e = 973$ К	0,42	$2,1 \cdot 10^{14}$	-	-
$T_s = 873$ К $T_e = 973$ К	0,32	$1,5 \cdot 10^{15}$	-	-
$T_s = 623$ К $T_e = 973$ К	0,35	$8,8 \cdot 10^{14}$ (+)	-	-
	0,37	$1,1 \cdot 10^{15}$ (-)	-	-

Фермі задавалося рівноважною концентрацією носіїв у матеріалі, а отже провідністю плівок ZnTe. Як показали розрахунки, практично у всіх досліджених конденсатах положення рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$  співпадало або було близьким до енергії найбільш глибоких ЛС, виявлених у відповідних зразках. Це обумовлено закріпленням рівня Фермі пастками внаслідок того, що концентрація вільних носіїв у плівках є близькою до повної концентрації ЛС, розташованих на межах зерен та в об'ємі кристалітів конденсатів. В результаті найбільш глибокі пасткові рівні в плівках ZnTe методом аналізу ВАХ СОПЗ не виявлялися.

Можливість виявлення у зразках мілких пасток ( $E_t \leq 0,21$  eВ) обмежувалася явищем їх переключення у низькоомний стан, яке стимулювалось саме заповненням ЛС. Тому нами, методом ВАХ

СОПЗ, спостерігалися лише пастки, які мали енергію залягання більшу, ніж зазначена. Однак, у досліджених зразках можливо існування пасткових рівнів з енергією залягання, як меншою ніж 0,21 еВ, так і більшою ніж 0,42 еВ, про що свідчать дані, одержані з нахилу залежностей провідність - температура на омічній та квадратичній ділянці ВАХ і спектрів люмінесценції.

Як свідчить аналіз  $\sigma-T$  залежностей на омічній ділянці ВАХ, для високотемпературних полікристалічних конденсатів ZnTe, є характерними такі енергії активації провідності: 0,05 еВ; (0,14-0,15) еВ; (0,20-0,21) еВ; (0,33-0,34) еВ; (0,42-0,43) еВ; (0,51-0,52) еВ; (0,57-0,58) еВ; (0,69-0,70) еВ та 0,89 еВ (таблиця 5.7). Як правило, на температурній залежності провідності від одного зразка спостерігалось 2-3 ділянки сталого нахилу, що свідчить про присутність у плівці одразу декількох видів дефектів.

Слід зазначити, що ряд значень  $E_t$ , знайдених з  $\sigma-T$  залежностей, добре корелюють зі значеннями глибини залягання пасток, які визначені у плівках ZnTe методами ВАХ СОПЗ (табл. 7.2) та низькотемпературної люмінесценції [190-200].

Оскільки плівки телуриду цинку спеціально не легувалися, можна зробити висновок, що всі знайдені ЛС обумовлені власними ТД, їх комплексами, неконтрольованими домішками та їх комплексами з власними дефектами. Нажаль методи, що використані для знаходження параметрів ЛС, не дозволяють визначити їх природу. Однак така інтерпретація можлива шляхом співставлення експериментальних результатів з літературними даними.

ЛС у монокристалах та плівках ZnTe методом ВАХ СОПЗ вивчалися у роботах [1, 179, 201]. Авторами [1] в монокристаличних зразках за напругою повного заповнення пасток визначені їх параметри:  $E_t = 0,17$  еВ та  $N_t = 10^{16}$  см<sup>-3</sup>. З іншого боку вимірювання  $\sigma-T$  залежностей на квадратичній ділянці ВАХ до-



зволили отримати авторам дещо інші значення цих величин –  $E_t = 0,14$  еВ та  $N_t = 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. Виходячи з моделі присутності у матеріалі моноенергетичних пасток, автори [201] розрахували густину ЛС у плівках ZnTe, отриманих методом лазерного випаровування. Вона виявилася дуже високою  $N_t = (4,2-8,4) \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. Нажаль, енергію пасток у роботі не визначено. Дещо менша концентрація пасток, з використанням тієї ж моделі, знайдені у плівках ZnTe отриманих електроосадженням  $N_t = 3,6 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> [179].

Як можна побачити з таблиці 7.3, виявлена нами у плівках ZnTe концентрація пасток є значно меншою ніж у конденсатах, отриманих методом лазерного випаровування, електроосадження і навіть у монокристалічному матеріалі. Це свідчить про високу структурну досконалість та стехіометричність шарів.

Дослідженню температурних залежностей провідності монокристалів та плівок ZnTe присвячена більша кількість робіт [195, 198, 199, 202-207] ніж дослідженню ВАХ СОПЗ. На  $\sigma$ - $T$  залежностях від монокристалів ZnTe, як свіже вирошчених, так і відпалених у водневій атмосфері, автори [195] спостерігали ділянки з енергією активації 0,03 еВ; 0,14 еВ; (0,23-0,25) еВ; 0,28 еВ; 0,36 еВ та (0,41-0,45) еВ. Ці енергії непогано корелюють з отриманими нами (0,05 еВ; (0,14-0,15) еВ; (0,20-0,21) еВ; (0,33-0,34) еВ; (0,42-0,43) еВ). Нажаль, Корбутяк з співавторами [195] ідентифікують тільки рівень 0,36 еВ, який пов'язують з дефектом  $O_{Te}$ . В нелегованих плівках ZnTe, отриманих електронно-променевим випаровуванням, з нахилу  $\sigma$ - $T$  залежностей автори [204] визначили енергію активації провідності зразків, яка складала  $E_1 = (0,48-0,51)$  еВ,  $E_2 = 0,89$  еВ,  $E_3 = (0,94-0,96)$  еВ,  $E_4 = (0,98-1,03)$  еВ. Такі ж дослідження високоомних  $R = (8,7 \cdot 10^9 - 8 \cdot 10^{11})$  Ом плівок ZnTe, отриманих високочастотним катодним

Таблиця 7.3 Глибини залягання ЛС у 33 ZnTe, визначених з нахилу  $\sigma$ - $T$  залежностей

$T_s, K$	623		673	723		773	823		873	Можлива інтерпретація рівнів
ділянка	ом.	кв.	ом.	ом.	кв.	ом.	до відп.	після відп.	ом.	
енергія, еВ										
$E_9$					0,89					
$E_8$	0,70								0,69	
$E_7$			0,58	0,58	0,57			0,58		$V_{Te}^{2+} (Zn_i^{2+})$ [203]
$E_6$	0,51			0,52		0,51	0,52			$V_{Zn}^{2-} (0,50)$ [206]
$E_5$	0,43		0,42					0,42		$O_{Te} (0,41)$ [203]
$E_4$	0,33	0,34	0,33		0,33		0,34	0,34	0,33	$O_{Te} (0,36)$ [195]
$E_3$		0,21		0,20		0,20				$V_{Zn}^{2-} (0,21)$ [203]
$E_2$						0,14			0,15	$V_{Zn}^{2-}, Cu_{Zn}^+ (0,15)$ [206]
$E_1$		0,05								$V_{Zn}^- (0,05)$ [209]

розпиленням [207], дали наступні результати –  $E=0,48$  еВ. Рису з співавторами [181] у плівках, отриманих методом КЗО, спостерігали рівні з енергією (0,75-1,20) еВ. У роботі [206], де досліджені нелеговані та леговані міддю вакуумні конденсати ZnTe, знайдені рівні з енергією активації 0,05; (0,12-0,15) еВ та 0,50 еВ. Перші автори не ідентифікують ці рівні, другі пов'язують з домішкою  $Cu_{Zn}^+$ , а треті з власним дефектом  $V_{Zn}^{2-}$ . ЛС з енергією активації 0,22 еВ спостерігалися авторами [208] у нелегованих плівках ZnTe, отриманих методом термічного випаровування у вакуумі. Їх інтерпретація нажаль відсутня.  $\sigma$ - $T$  залежності характерні для компенсованих зразків отримали автори [156]. Вони досліджували епітаксціальні плівки ZnTe, нанесені методом MOVPE на підкладки GaAs. Енергія активації провідності цих зразків  $E=0,103$  еВ пов'язується авторами з комплексом  $C_{Te} - D_{Zn}$ . Як ми бачимо, в телуриді цинку спостерігається велика кількість дефектів з енергіями активації, що лежать у інтервалі (0,05-1,2) еВ, але більшість з них в наш час не ідентифіковані.

Все ж більшу частину рівнів, знайдених нами у плівках ZnTe, ідентифікувати можна, хоча і з деякою долею ймовірності. Рівень з  $E_1 = 0,05$  еВ звичайно пов'язують з однозарядною  $V_{Zn}^-$ , а  $E_2 = 0,15$  еВ – двозарядженою вакансією цинку  $V_{Zn}^{2-}$  [198, 199]. У більш пізніх роботах останній рівень вважають обумовленим міддю, яка є традиційною залишковою домішкою у ZnTe, а двозарядженій вакансії цинку приписують більш глибокий рівень енергій – 0,21 еВ [209]. Вважається, що енергію активації (0,36-0,40) еВ [195, 199] має звичайна у телуриді цинку домішка заміщення –  $O_{Te}$ . Ще більш глибокий рівень 0,58 еВ автори роботи [203] пов'язують з вакансією телуру  $V_{Te}^{2+}$  (міжвузловим цинком  $Zn_i^{2+}$ ). Можлива інтерпретація знайдених у плівках ZnTe ЛС наведена у таблиці 7.3. Інші енергетичні рівні дефектів на нашу

думку належать неконтрольованим домішкам та комплексам власний дефект - домішка.

### 7.2.2. Параметри ЛС у плівках CdTe

Результати розрахунків параметрів ЛС у конденсатах CdTe знайдені з ВАХ СОПЗ з використанням методу ІС та методу розвиненому у [24] наведені у табл. 7.4. Цими методами у плівках CdTe виявляється ряд груп пасток з найбільш ймовірною глибиною залягання, що складає  $E_{t1}=(0,68-0,70)$  еВ,  $E_{t2}=(0,60-0,63)$  еВ,  $E_{t3}=(0,56-0,57)$  еВ,  $E_{t4}=(0,51-0,53)$  еВ,  $E_{t5}=(0,45-0,46)$  еВ,  $E_{t6}=(0,39-0,4)$  еВ. Точність визначення  $E_t$  як і для плівок ZnTe складає  $kT$ . Концентрація знайдених ЛС лежить в інтервалі  $N_t=(10^{12}-10^{15})$  см<sup>-3</sup> і у більшості випадків зростає при наближенні їх енергій залягання до краю зони провідності. Пастки за формою профілю  $h(E)=N/\sqrt{2\pi}\sigma_t \exp(\Delta E^2/2\sigma_t^2)$  є близькими до моноенергетичних з напівшириною  $\sigma_t=0,011-0,015$  еВ. У більшості зразків домінуючими пастками, які в основному визначали вигляд ВАХ СОПЗ, є ЛС з енергією  $E_t=(0,60-0,63)$  еВ;  $E_t=(0,56-0,57)$  еВ;  $E_t=(0,45-0,46)$  еВ. Лише пастки з енергією  $E_t=0,40$  еВ у випадку, якщо вони виявлялись, мали більшу концентрацію.

Слід відзначити, що ЛС, що спостерігались у полікристалічних плівках, виявлялись також і у монокристалічних зразках. У 33 монокристалічного телуриду кадмію вдавалось розрізнити пастки з енергією залягання  $E_t=(0,56-0,57)$  еВ;  $E_t=(0,52-0,53)$  еВ;  $E_t=(0,45-0,46)$  еВ та  $E_t=(0,40-0,41)$  еВ.

Сканування пасток у плівках CdTe як і у шарах ZnTe проводилося в інтервалі від рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$  ( $E_t > 0,70$  еВ) до квазірівня Фермі у момент переключення.

Таблиця 7.4. Параметри ЛС у плівках CdTe, які розраховані з використанням кількох модифікацій диференційного методу

Режим конденсації плівок	Модельний метод [24]		Метод ІС [65, 178, 210, 211]			Моделювання ТД $N$ , $\text{см}^{-3}$
	$E_i$ , eV	$N_i$ , $\text{см}^{-3}$ , монорівень	$E_i$ , eV	$N_i$ , $\text{см}^{-3}$ , монорівень	$N_i$ , $\text{см}^{-3}$ , гаус	
$T_s=723$ К, $T_e = 893$ К	0,62	$3,7 \cdot 10^{15}$	0,62	$6,6 \cdot 10^{15}$	$1,6 \cdot 10^{15}$	$4,1 \cdot 10^{12}$
			0,56	$4,4 \cdot 10^{15}$	$3,9 \cdot 10^{15}$	
$T_s=748$ К, $T_e = 893$ К	0,61	$4,3 \cdot 10^{14}$	0,61	$1,4 \cdot 10^{15}$	$2,3 \cdot 10^{14}$	$1,9 \cdot 10^{13}$
	0,58	$8,5 \cdot 10^{14}$	0,57	$2,7 \cdot 10^{15}$	$4,6 \cdot 10^{14}$	
$T_s=773$ К, $T_e = 893$ К	0,60	$2,64 \cdot 10^{15}$	0,61	$4,9 \cdot 10^{15}$	$9,7 \cdot 10^{14}$	$7,9 \cdot 10^{13}$
			0,56	$3,5 \cdot 10^{15}$	$3,9 \cdot 10^{15}$	
$T_s=798$ К, $T_e = 893$ К	0,62	$5,6 \cdot 10^{15}$	0,61	$9,4 \cdot 10^{15}$	$1,7 \cdot 10^{15}$	$3,1 \cdot 10^{14}$
			0,58	$1,7 \cdot 10^{15}$	$4,2 \cdot 10^{15}$	
$T_s=823$ К, $T_e = 893$ К	0,64	$9,81 \cdot 10^{15}$	0,62	$2,0 \cdot 10^{16}$	$1,8 \cdot 10^{15}$	$1,3 \cdot 10^{15}$
			0,57	$1,7 \cdot 10^{16}$	$7,6 \cdot 10^{15}$	
$T_s=748$ К, $T_e = 1068$ К	0,66	$2,1 \cdot 10^{12}$	0,69	$9,8 \cdot 10^{11}$	$5,6 \cdot 10^{11}$	$1,4 \cdot 10^{12}$
	0,62	$3,4 \cdot 10^{13}$	0,63	$4,3 \cdot 10^{12}$	$2,1 \cdot 10^{12}$	
	0,57	$2,6 \cdot 10^{13}$	0,56	$8,2 \cdot 10^{12}$	$4,9 \cdot 10^{12}$	
			0,40	$4,3 \cdot 10^{13}$	$3,1 \cdot 10^{13}$	
$T_s=753$ К, $T_e = 993$ К епітаксіальна			0,62	$4,6 \cdot 10^{12}$	$5,6 \cdot 10^{11}$	$4,0 \cdot 10^{12}$
			0,52	$1,3 \cdot 10^{13}$	$2,1 \cdot 10^{12}$	
			0,41	$1,1 \cdot 10^{14}$	$4,9 \cdot 10^{12}$	

багатошарових структур у низькоомний стан ( $E_t \leq 0,40$  еВ). Оскільки монокристалічні конденсати мали нижчий опір ніж полікристалічні (у 10-100 разів), рівноважний рівень Фермі був розташований у них ближче до зони провідності (валентної) ніж у полікристалічних. У зв'язку з цим найбільш глибокі пастки методом ВАХ СОПЗ у монокристалічних плівках не виявлялися. Саме тому пастки з  $E_t \sim 0,70$  еВ та  $E_t \sim 0,62$  еВ, які знайдені нами у полікристалічних зразках, цілком можливо можуть бути присутніми і у більш низькоомних монокристалічних плівках

Як свідчить аналіз  $\sigma - T$  залежностей у високотемпературних полікристалічних конденсатах спостерігались такі енергії активації їх провідності  $E_t = 0,15; 0,33; (0,40-0,41); 0,46; (0,60-0,61), 0,80$  еВ. У монокристалічних плівках виявлялися ЛС з меншою енергією активації:  $E_t = (0,06-0,07); (0,13-0,14); (0,22-0,23); 0,29; 0,40; 0,46$  еВ. Енергія активації  $E_t = (1,50-1,52)$  еВ, яка є характерною для високих температур вимірювання, відповідає ширині ЗЗ матеріалу. Слід зазначити, що значення  $E_t$  знайдені з  $\sigma - T$  залежностей добре корелюють зі значеннями глибини залягання пасток, які спостерігалися у плівках CdTe методом ВАХ СОПЗ.

Результати співставлення глибин залягання ЛС знайдених з ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей наведені у табл. 7.5.

Інтерпретація виявлених у плівках CdTe ЛС проводилася шляхом співставлення експериментальних результатів з літературними даними. Відповідні результати наведені у табл. 7.5. Як вже вказувалося, існує велика кількість суперечливих даних про глибини залягання рівнів тих чи інших ТД у CdTe, саме тому наведена інтерпретація є приблизною. Нами для встановлення типу виявлених пасток в основному використовувалися дані Вея [160, 164], отримані їм методом «*ab initio*».

Таблиця 7.5. Глибини залягання рівнів ЛС дефектів у 33 CdTe

$\Delta E$ , еВ			Можлива інтерпретація
Із ВАХ СОПЗ	Із $\sigma$ - $T$ залежностей		
полікристалічні плівки	полікристалічні плівки	епітаксіальні плівки	
0,68-0,70	-	-	$V_{Te}^{2+}$ (0,71 еВ) [164]
0,60-0,63	0,60	-	$Te_{Cd}^{2+}$ (0,59 еВ) [164]
0,56-0,57	0,57	-	$Cd_i^{c2+}$ (0,56 еВ) [164]
0,51-0,53	-	-	$V_{Te}^{2+}$ (0,50 еВ) [160]
0,45-0,46	0,46	0,46	$Cd_i^{c+}$ (0,46 еВ) [164]
0,39-0,40	0,40-0,41	0,40	$Te_{Cd}^{2+}, V_{Te}^{+}$ (0,40 еВ) [160]
-	0,33	0,29	$Cd_i^{a2+}$ (0,33 еВ) [164]
-	-	0,22-0,23	$Cd_i^{2+}$ (0,20 еВ) [160]
-	0,15	0,13-0,14	
-	-	0,06-0,07	

Згідно з розрахунками Вея глибокі центри з глибиною 0,71 еВ належать  $V_{Te}^{2+}$ . Нами експериментально спостерігався рівень з  $E_f=(0,68-0,70)$  еВ, який можливо обумовлений саме цим дефектом. Аналогічно ЛС з енергіями  $E_c-(0,60-0,63)$  еВ можуть належати антиструктурному дефекту  $Te_{Cd}^{2+}$  (0,59 еВ), а з (0,56-0,57) еВ та (0,45-0,46) еВ міжвузловому кадмію у різних зарядових станах -  $Cd_i^{c2+}$  (0,56 еВ),  $Cd_i^{c+}$  (0,46 еВ). Рівень з енергією  $E_c-0,29$  еВ те ж утвориться власним дефектом пов'язаним з кадмі-

ем  $Cd_i^{a2+}$  (0,33 еВ). Різні енергії іонізації міжвузлового кадмію обумовлені його розташуванням в окто- або тетраедричному положенні у кристалічній ґратці матеріалу.

### 7.2.3. Параметри ЛС у плівках ZnS

З аналізу ВАХ СОПЗ використовуючи традиційний підхід та вирази наведені в [1, 17] у плівках ZnS нами виявлені пасткові рівні з глибиною залягання  $E_t = (0,22 - 0,25)$  еВ та концентрацією  $N_t = (5 \cdot 10^{14} - 1,5 \cdot 10^{15})$  см<sup>-3</sup>. Знайдені ЛС можуть бути обумовлені присутністю міжвузельного атома цинку  $Zn_i^{2+}$ . ЛС з енергіями залягання  $E_t = (0,24 - 0,25)$  еВ спостерігалися також у [212] методом термостимульованих струмів.

У відповідності до рівняння Арреніуса з  $\sigma - T$  залежностей нами визначена енергія активації провідності на лінійних ділянках. Вона становить:  $E_{a1'} = 0,03$  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.

Результати розрахунків параметрів ЛС у конденсатах ZnS, отриманих при різних фізико-технологічних умовах, знайдені з використанням методу аналізу ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей зведені у таблиці 7.6. Тут же для порівняння наведені літературні дані, отримані іншими дослідниками. Як видно з таблиці, спостерігається певна кореляція між параметрами ЛС у плівках ZnS отриманих нами та іншими авторами. Крім цього, в ряді випадків відбувається збіг значень енергій залягання дефектів визначених з ВАХ ТОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей.

Нажаль, ідентифікувати більшість знайдених ЛС не вдалося оскільки з літературних даних відсутні вказівки на 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 двічі  $Zn_i^{2+}$  зарядженим міжвузловим атомом цинку.



Таблиця 7.6. Параметри ЛС, знайдені шляхом аналізу ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей на омичній ділянці ВАХ, для плівок ZnS, отриманих у різних фізико-технологічних режимах конденсації

$T_s, K$ ( $T_e = 1173 K$ )	З ВАХ СОПЗ		З $\sigma - T$ залежностей на омичній ділянці		
	$E_t, eV$	$N_t, cm^{-3}$	$E_{ax}, eV$		
			нагрівання	охолодження	літературні дані
523 K	0,22	$5 \cdot 10^{14}$	-	0,03	0,029 [173]
			0,07	0,08	0,06 [174]
590 K	0,25	$1,5 \cdot 10^{15}$	0,07	-	0,06 [174]
			0,24	-	0,24; 0,25 [174, 212]
			0,33		0,31-0,33 [212]
			0,87	-	0,81-1,29 [213]
673 K	0,23	$8 \cdot 10^{14}$	0,03	-	0,029 [173]
			0,23	-	0,24; 0,25 [174, 212]
			0,15	-	0,14 [174]
			0,46	-	-

#### 7.2.4. Параметри ЛС у плівках CdS

Методика отримання та результати дослідження структурних характеристик плівок сульфїду кадмію викладена нами у [214]. Для регулювання стехіометрії шарів в процесі їх нанесення додатково співвипаровувалася сірка при температурі  $T_{eS} = 60-200^{\circ}C$ . Як підкладки використовувалося покрівне скло з провідним підшаром ІТО. У якості верхнього струмознімального контакту при створенні багат шарової структури застосовані шари In (площею  $0,02 \text{ cm}^2$ ), одержані вакуумним випаровуванням. Цей матеріал дозволяє реалізувати інжекцію носіїв струму у сульфід кадмію який має n-тип провідності при прикладанні напруги.

На рис. 7.10 наведені темнові та світлові ВАХ багат шарових структур ІТО/CdS/Іn, зняті при прямому та зворотному зміщенні. Криві від плівок CdS з надлишком кадмію наведені на рис.7.10 а, відповідно на рис. 7.10 б представлені криві від шарів з надлишком сірки. Аналіз цих ВАХ свідчить що матеріал плівок мав питомий опір що становив ( $5 \cdot 10^6 - 10^7$ ) Ом·см. З рисунку видно, що підвищений вміст сірки у плівці CdS приводить до збільшення фотопровідності матеріалу. При надлишку сірки провідність освітленого матеріалу збільшується майже три порядки (рис. 7.10 б), у той час, коли при дефіциті сірки - тільки на один порядок за величиною. Встановлено також, що дефіцит кадмію знижує темнову провідність матеріалу на два порядки.

На темнових ВАХ від плівок CdS («+» ІТО) з надлишком та дефіцитом сірки, в області високої напруженості поля, спостерігалось декілька майже лінійних ділянок з різним нахилом до осі напруги. Як правило, виділялись ділянки з залежністю струму від напруги виду:  $I - U$ ,  $I - U^{1,5-2}$ ,  $I - U^{3-4}$ . У ряді випадків після суперлінійних ділянок спостерігалась квадратична залежність  $I$  від  $U$ .

Особливості ВАХ добре розрізняються на залежностях  $\eta - \lg U$ , які дозволяють виявити тонку структуру кривих струм-напруга. Кожна точка цього графіку визначає кут нахилу кривої струм-напруга у подвійному логарифмічному масштабі до осі напруги. Залежності  $\eta - \lg U$  були одержані нами шляхом знаходження похідної у кожній експериментальній точці ВАХ СОПЗ. Як вже вказувалося, математично задача зводилася до побудови згладжувального кубічного сплайна, що апроксимує експериментальні дані та його диференціювання у вузлах. Результати диференційної обробки темнових та світлових ВАХ наведені на рис. 7.11 а-з.

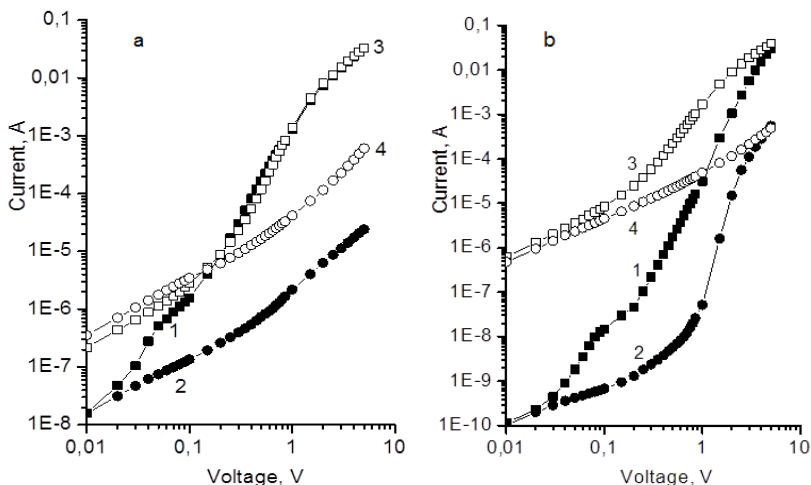


Рис.7.10 - ВАХ у подвійному логарифмічному масштабі від багаточарових структур ІТО/CdS/In (а, б) півки CdS з надлишком кадмію (а), з надлишком сірки (б); 1,3 – «+» ІТО, 2, 4 – «+» In. Затемнені символи відповідають темновим струмам, відкриті - струмам при освітленні зразків білим світлом

Аналіз диференціального нахилу ВАХ (рис. 7.11 в, г) [214] дозволив виявити два варіанти у характері інжекції носіїв у матеріал: у випадку надлишку кадмію ( $C_{Cd} > C_S$ ) має місце біполярна рекомбінація носіїв у матеріалі як у темноті та при освітленні, вона забезпечує диференційний нахил ВАХ  $\eta=1.5$ . У випадку надлишку сірки ( $C_{Cd} < C_S$ ) головним механізмом зарядоперенесення у матеріалі є монополярна інжекція, саме вона забезпечує диференційний нахил кривих струм-напруга  $\eta=2$ . В усіх випадках на кривих мають місце стрибки струму, характерні для СОПЗ. Математична обробка відповідних кривих дозволила побудувати залежності  $n_s - E_F$  (а) та  $n_s / E_F - E_F$  (рис. 7.12) та визначити значення  $E_t$ ,  $N_t$  пасток присутніх у ЗЗ матеріалу.

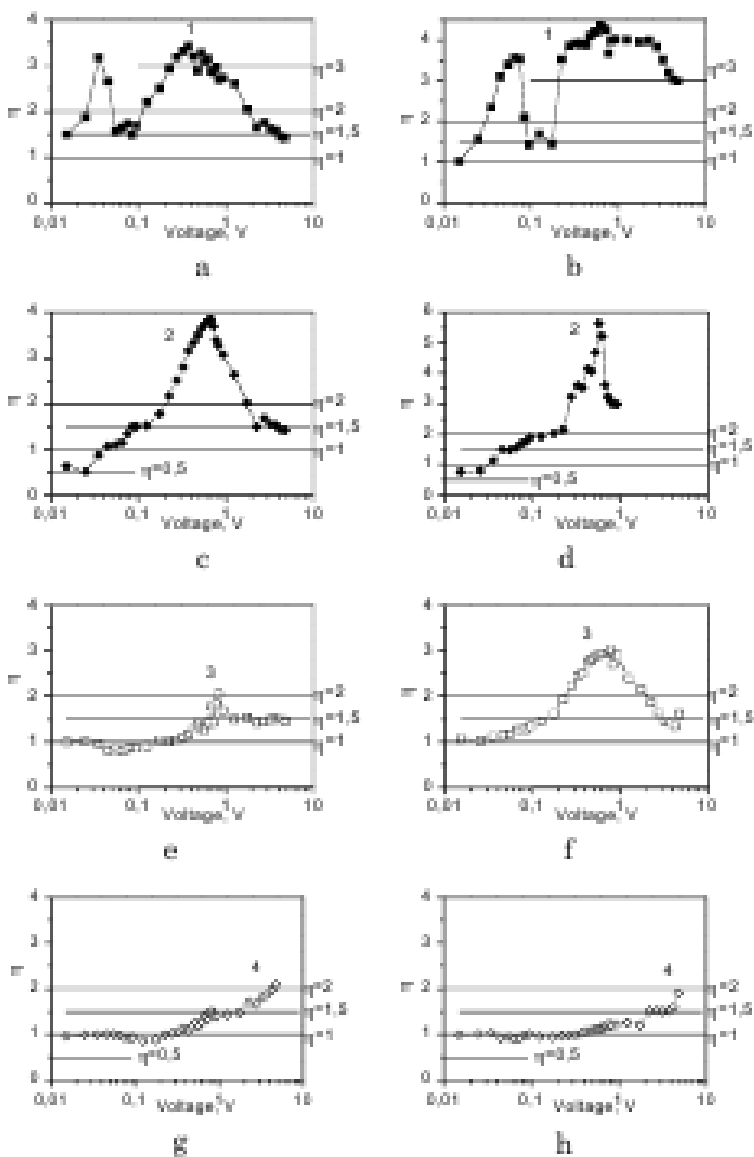


Рис.7.11 - Диференційний нахил ВАХ: плівки з надлишком кадмію (а, в, д, ж), з надлишком сірки (б, г, е, з); 1,3 – «+» ІТО, 2, 4 – «+» Іп. Затемнені символи відповідають темновим струмам (а-г), відкриті (д-з) - струмам при освітленні зразків білим світлом

Було встановлено, що для плівок сульфїду кадмїю з надлишком кадмїю ( $C_{Cd} > C_S$ ) є характерними присутність ЛС з енергією  $E_t = 0.514 \pm 0.026$  eВ, в той час як у матеріалі з надлишком сірки ( $C_{Cd} < C_S$ ) у ЗЗ присутні рівні з енергією залягання  $E_t = 0.514 \pm 0.026$  eВ та  $E_t = 0.700 \pm 0.026$  eВ. Концентрація дозаповнення носіями цих ЛС становила від  $2 \cdot 10^{21} \text{ м}^3$  до  $5 \cdot 10^{22} \text{ м}^3$  в залежності від полярності та умов освітлення зразків. Відповідно їх повна концентрація  $N_t$  є дещо вищою від цих значень.

Таким чином, виявлена залежність інжекційних параметрів та характеру інжекції у структурах ІТО/CdS/In на основі наноструктурованих плівок CdS від їх стехіометрії.

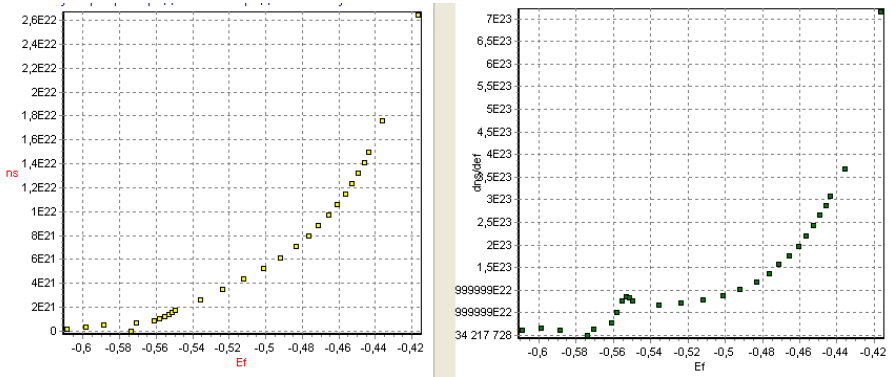


Рис.7.12 - Типові диференціальні криві  $n_s - E_F$  (а) та  $dn/dE - E_F - E_F$  (б), одержані у результаті обробки ВАХ СОПЗ, які дозволили визначити параметри пасток у матеріалі

## ДОДАТОК А

### А.1. Числовий алгоритм розв'язання інтегрального рівняння Фредгольма 1-го роду

Рівняння Фредгольма 1-го роду можна записати [134] у вигляді

$$Ay \equiv \int_a^b K(x, s)y(s)ds = f(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (\text{A.1})$$

З умови мінімуму функціонала слідує рівняння Тихонова [136]:

$$\alpha[y_\alpha(t) - qy'_\alpha(t)] + \int_a^b R(t, s)y_\alpha(s)ds = F(t), \quad a \leq t \leq b, \quad (\text{A.2})$$

де

$$R(t, s) = R(s, t) = \int_a^b K(x, t)K(x, s)dx; \quad F(t) = \int_c^d K(x, t)\bar{f}(x)dx.$$

Тут крайові умови вибрані у вигляді:  $y'_\alpha(a) = y'_\alpha(b) = 0$ .

Розглянемо числовий алгоритм розв'язання даної задачі. При розв'язанні рівняння (А.2) був використаний один з найбільш ефективних методів: метод кінцевих сум і різниць [134].

Нехай  $\bar{f}(x)$  у правій частині рівняння задане у вигляді таблиці на нерівномірній  $x$ -сітці вузлів:  $c = x_1, x_2, \dots, x_l = d$ , а розв'язок  $y_\alpha(s)$  шукається на іншій нерівномірній  $s$ -сітці вузлів  $a = s_1, s_2, \dots, s_n = b$ , при цьому  $l \neq n$ , а  $t$ -сітка збігається з  $s$ -сіткою. Підставивши значення  $R(t, s)$  і  $F(t)$  у рівняння (А.2) одержимо

$$\alpha[y_\alpha(t) - qy''_\alpha(t)] + \int_a^b \left[ \int_c^d K(x, t)K(t, x)dx \right] y_\alpha(s)ds = \int_c^d K(x, t)\hat{f}(x)dx,$$

$$a \leq t \leq b. \quad (\text{A.3})$$

Розписавши інтеграли в (A.3) за формулою трапецій із змінним кроком та апроксимуючи похідну  $y''_{\alpha}(t)$  кінцевими різницями, одержимо дискретний аналог співвідношення (A.3)

$$\left\{ \begin{aligned} & \alpha \left( y_1 - q \frac{y_2 - y_1}{r_1 h_2} \right) + \sum_{j=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{il} K_{ij} y_j \sum_{i=1}^l p_i K_{il} \hat{f}_i, \\ & \alpha \left\{ y_k - \frac{q}{r_k} \left[ \frac{y_{k-1}}{h_k} - \left( \frac{1}{h_k} + \frac{1}{h_{k+1}} \right) y_k + \frac{y_{k+1}}{h_{k+1}} \right] \right\} + \\ & + \sum_{i=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{ik} K_{ij} y_j = \sum_{i=1}^l p_i K_{ik} \hat{f}_i, \quad k = \overline{2, n-1} \\ & \alpha \left( y_n + q \frac{y_n - y_{n-1}}{r_n h_n} \right) + \sum_{j=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{in} K_{ij} y_j = \sum_{i=1}^l p_i K_{in} \hat{f}_i, \end{aligned} \right. \quad (\text{A.4})$$

де

$$\left\{ \begin{aligned} & h_j = s_j - s_{j-1} = t_j - t_{j-1}, \quad j = \overline{2, n}, \\ & r_1 = \frac{s_2 - s_1}{2} = \frac{h_2}{2}, \quad r_j = \frac{s_{j+1} - s_{j-1}}{2} = \frac{h_j + h_{j+1}}{2}, \\ & j = \overline{2, n-1}, \quad r_n = \frac{s_n - s_{n-1}}{2} = \frac{h_n}{2}, \\ & p_1 = \frac{x_2 - x_1}{2}, \quad p_i = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}, \quad i = \overline{2, l-1}, \quad p_l = \frac{x_l - x_{l-1}}{2}. \end{aligned} \right.$$

Рівняння (A.4) – система алгебраїчних рівнянь відносно  $y_j$ . Для того, щоб ця система стала симетричною і позитивно визначеною помножимо  $k$ -й рядок на  $r_k/\rho_s$ , де

$$\rho_s = \frac{2r_1 + \sum_{j=2}^{n-1} r_j + 2r_n}{n}.$$

У випадку, якщо  $h_2 = h_3 \dots = h_n = h$ , то  $\rho = h$  і

$$\frac{r_k}{\rho_s} = \begin{cases} 0.5 & \text{при } k=1 \text{ или } k=n \\ 1 & \text{при } k=\overline{2, n-1} \end{cases}$$

У результаті маємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь із симетричною позитивно визначеною матрицею  $\alpha C + G$ :

$$(\alpha C + G)y_\alpha = F, \quad (\text{A.5})$$

де

$$G_{kj} = G_{jk} = \sum_{l=1}^l \frac{p_l}{\rho} z_{lk} z_{lj}, \quad k, j = \overline{1, n},$$

$$F_k = \sum_{l=1}^l \frac{p_l}{\rho} z_{lk} \hat{f}_l, \quad k = \overline{1, n},$$

$$z_{ij} = r_j K_{ij}, \quad i = \overline{1, l}, \quad j = \overline{1, n},$$



$$\begin{cases}
C_{11} = \left(1 + \frac{q}{r_1} \frac{1}{h_2}\right) \frac{r_1}{\rho} \\
C_{kk} = \left[1 + \frac{q}{r_k} \left(\frac{1}{h_k} + \frac{1}{h_{k+1}}\right)\right] \frac{r_k}{\rho}, & k = \overline{2, n-1} \\
C_{nn} = \left(1 + \frac{q}{r_n} \frac{1}{h_n}\right) \frac{r_n}{\rho}
\end{cases}$$

$$C_{k,k+1} = -\frac{q}{h_{k+1}\rho}, \quad k = \overline{1, n-1},$$

$$C_{k,k-1} = -\frac{q}{h_k\rho}, \quad k = \overline{2, n},$$

інші  $C_{kj} = 0$  ( $C$  – стрічкова тридіагональна матриця). Числова апроксимація функції  $\beta(\alpha)$  має вигляд:

$$\beta(\alpha) = \sum_{i=1}^l p_i \left[ \sum_{j=1}^n z_{ij}(y_\alpha)_j - \hat{f}_i \right]^2. \quad (\text{A.6})$$

Чисельне розв’язання рівняння (A.1) здійснювалося у такий спосіб. Спочатку проводилося нормування вихідного співвідношення, потім формувалася матриця системи (A.5). Оскільки матриця даної системи є тридіагональною, для її розв’язання використовувався метод Халецького [215], який дозволяє заощадити машинну пам’ять і підвищити максимально можливий порядок системи.

На першому етапі для ряду значень  $\alpha$ , що змінювалися за законом  $\alpha = \ln \alpha_0 - h$ , (де  $\alpha_0$  – початкове значення величини;  $h$  – крок) визначалася функція  $y_\alpha$  (шляхом розв’язання системи

(A.5)), а також нев'язка  $\beta(\alpha_i)$ . При цьому перевірялася умова монотонності функції  $\beta(\alpha)$

$$\beta(\alpha_i) \leq \beta(\alpha_{i-1}), \quad (\text{A.7})$$

і фіксувалося мінімальне значення  $\alpha_m$ , при якому умова (A.7) виконувалося. Потім обчислювалося значення  $\mu = \beta(\alpha_m)$ . Після цього, знову змінюючи значення  $\alpha$  за законом  $\alpha = \ln \alpha_0 - h$  знаходили значення  $\alpha^*$  з умови

$$|\beta(\alpha_i) - \delta - \mu| = \min_{\alpha_i \in [\alpha_m, \alpha_1]} . \quad (\text{A.8})$$

Нарешті, розв'язуючи систему лінійних алгебраїчних рівнянь (A.5) при  $\alpha = \alpha^*$  знаходилась функція  $y(s)$ .

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Ламперт М. Инжекционные токи в твердых телах / М. Ламперт, П. Марк. – Москва: Мир, 1973. – 222 с.
2. Шалимова К.В. Физика полупроводников / К.В. Шалимова. – Москва: Энергия, 1976. – 416 с.
3. Епифанов Г.И. Твердотельная электроника / Г.И. Епифанов, Ю.А. Мома. – Москва: Высшая школа, 1986. – 304 с.
4. Крёгер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крёгер. – Москва: Мир, 1969. – 620 с.
5. Грундман М. Основы физики полупроводников: нанофизика и технические приложения. – 2-е издание / М. Грундман. – Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2012 -772 с.
6. Holt D.V. Extended defects in semiconductors. Electronic properties, device effects and structures / D.V. Holt, B.G. Yacobi. – New York, Melbourne, Madrid, Cape Town: Cambridge university press, 2007. – 631 p.
7. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках / А. Милнс. – Москва: Мир, 1977. – 463 с.
8. Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела / В.И. Фистуль. – Москва: Металлургия, 1995. – 480 с.
9. Stokman F. On the classification of traps and recombination centres / F. Stokman // phys. status solidi A. – 1973. – V.20. – P. 217–220.
10. Сердюк В.В. Фотоэлектрические процессы в полупроводниках / В.В. Сердюк, Г.Г. Чемересюк, М. Терек. – Одесса: Вища школа. Головное издательство, 1982. – 151 с.
11. Гринев Б.В. Сцинтиляционные детекторы и системы контроля радиации на их основе / Б.В. Гринев, В.Д. Рыжиков, В.П. Семиноженко. – Київ: Наукова думка, 2007. – 446 с.

12. Kolodziejski L.A. Wide-bandgap II–VI heterostructures for blue/green optical sources / L.A. Kolodziejski, R.L. Gunshor, A.V. Nurmikko / *Annu. Rev. Mater. Sci.* – 1995. – V.25. – P. 711–753.
13. Павлов А.П. Методы измерения параметров полупроводниковых материалов / А.П. Павлов. – Москва: Высшая школа, 1987. – 239 с.
14. Воробьев Ю.В. Методы исследования полупроводников / Ю.В. Воробьев, В.И. Добровольский, В.И. Стриха. – Київ: Вища школа, 1988. – 232 с.
15. Блад П. Методы измерений электрических свойств полупроводников / П. Блад, Дж. В. Ортон // *Зарубежная радиоэлектроника.* – 1981. – №2. – С. 3–49.
16. Сыновров В.Ф. Релаксационные методы исследования энергетического спектра локализованных состояний в полупроводниках / В.Ф. Сыновров, Б.И. Сысоев, В.А. Линник. – Воронеж: ВГУ, 1982. – 180 с.
17. Као К. Перенос электронов в твердых телах. Т.1 / К. Као, В. Хуанг. – Москва: Мир, 1984. – 352 с.
18. Колесниченко К.Л. ТОПЗ в полупроводниковой керамике титаната бария с различным содержанием донорной добавки / К.Л. Колесниченко, Б.К. Черный, Т.М. Федорова // *УФЖ.* – 1982. – Т.27, №2. – С. 272–273.
19. Orton J.W. On the analysis of space-charge-limited-current-voltage characteristics and the density of states in amorphous silicon / J.W. Orton // *Phil. Mag.* – 1984. – V. B49, №1. – P. L1–L7.
20. Аскеров И.М. Инжекционные токи в смешаннослойных монокристаллах  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$  / И.М. Аскеров, Ф.Ю. Асадов // *ФТП.* – 1997. – Т.31, №8. – С.1011–1012.

21. Injection currents in lamellar crystals of gallium telluride / R.S. Madatov, T.B. Tadiey, I.A. Gabulov [et al.] // *Semicond. Phys. Quant. Electr. Optoelectron.* – 2003. – V.6, №3. – P. 278–281.
22. Singh S.P. Space charge limited conduction in  $\alpha$ -Se<sub>90</sub>Ge<sub>10-x</sub>In<sub>x</sub> thin films / S.P. Singh // *Chalc. Lett.* – 2004. – V.1, №8. – P. 105–109.
23. Defect-induced luminescence in high-resistivity high-purity undoped CdTe crystals / N. Armani, C. Ferrari, G. Salviati [at al.] // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2002. – V.14.– P. 13203–13209.
24. Зюганов А.И. Инжекционно-контактные явления в полупроводниках / А.И. Зюганов, С.В. Свечников. - Киев: Наукова думка, 1981. – 256 с.
25. Lampert M.A. Simplified theory of space-charge-limited currents in an insulator with traps / M.A. Lampert // *Phys. Rev.* – 1956. – V.103. – P. 1648–1656.
26. Dumke W.P. On the additivity of omic and space charge limited currents / W.P. Dumke // *Solid State Electron.*– 1982.– V.25, №2. – P. 101–103.
27. Mochizuki K. I–V characteristics of CdTe single crystals / K. Mochizuki, K. Masumoto // *Meter. Lett.*– 1986.– V.4, №5–7. – P. 301–303.
28. Темновые токи в *p–n* переходах, созданных ионно–лучевым травлением на кристаллах Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Te / Н.Л. Баженов, С.И. Тасанов, В.И. Иванов–Омский [и др.] // *ФТП.*– 1991.– Т.26 – С. 2196–2200.
29. Слободчиков С.В. О влиянии уровней захвата на токоперенос в структурах Pd–p(n)–CdTe / С.В. Слободчиков, Х.М. Салихов, Е.В. Руссу // *ФТП.*– 1999.– Т.33, №4. – С. 492–493.
30. Тагиев О.Б. Исследование влияния сильного электрического поля на электропроводность монокристалла VnGaInS<sub>4</sub>:Eu /

- О.Б. Тагиев, Т.Ш. Гашимова, И.М. Аскеров // ФТП. – 1998.– Т.32, №6. – С. 701–702.
31. Хляп Г.М. Экспериментальное исследование и численный анализ вольт–амперных характеристик плёнок CdTe, полученных вакуумной технологией / Г.М. Хляп, В.И. Белозерцева // 12–й Международный симпозиум “Тонкие пленки в электронике”, ISTFE–12, «Тонкие пленки в электронике». – Харьков: НИЦ “ХФТИ”. – 2001.– С. 15–17.
  32. Hernandez E. Space–charge–Limited Current Effects in p–Type  $\text{CuIn}_{0,8}\text{Ga}_{0,2}\text{Se}_2/\text{In}$  / E. Hernandez // Cryst. Res. Technol. – 1998.– V.33, №2. – P. 285–289.
  33. Кузнецов Н.И. Вольт–амперные характеристики GaN и Al–GaN  $p$ – $i$ – $n$ –диодов / Н.И. Кузнецов // ФТП.–1998.– Т.32, №3. – С. 369–372.
  34. Релаксационные электронные процессы в монокристаллах  $\text{TlGaSe}_2$  / С.Н. Мустафаева, С.Д. Мамедбейли, М.М. Асадов [и др.] // ФТП. – 1996.– Т.30, №12. – С. 2154–2158.
  35. Исследование микропараметров полупроводников с использованием ТОПЭ и кинетики ТДМЗ / Ю.К. Вищакас, П.В. Мачкус, А.А. Смилга [и др.] // Проблемы диэлектрической электроники. –1974. – С. 23–40.
  36. Gildenblat G. Sh. Current–voltage characteristic of pulsed space–charge–limited currents in GaAs / G. Sh. Gildenblat, A.R. Rao // J. Appl. Phys.–1984.– V.61, № 7.– P. 2683–2685.
  37. Тимман Б.Л. Инжекционные токи в широкозонных примесных полупроводниках / Б.Л. Тимман, В.М. Фесенко, Г.М. Гулевич // ФТП. – 1977. – Т.11, №6. – С. 1195–1199.
  38. Owen J.P. On charge carrier trapping in insulating solid as investigated by the space charge limited current (SCLC) technique: a cautionary note / J.P. Owen, A. Charlesby // J. Phys. – 1974. – V. C7. – P. L400–L402.

39. Silinsh E.A. On the physical nature of traps in molecular crystals / E.A. Silinsh // *phys. stat. sol. A.* – 1970. – V.3. – P. 817–828.
40. Hwang W. A unified approach to the theory of current injection in solids with traps uniformly and non-uniformly distributed in space and energy, and size effects in anthracene films / W. Hwang, K.C. Kao // *Solid State Electron.* – 1972. – V.15. – P. 523–529.
41. Rose A. Recombination processes in insulators and semiconductors / A. Rose // *Phys. Rev.* – 1955. – V.97. – P. 322–323.
42. Rose A. Space-charge-limited currents in solids / A. Rose // *Phys. Rev.* – 1955. – № 97. – P. 1538–1544.
43. Nespurek S. Evolution of validity of analytical equations describing steady-state space-charge-limited current-voltage characteristics / S. Nespurek, J. Sworakowsky // *Czech. J. Phys.* – 1980. – V. B30, №10. – P. 1148–1156.
44. Mark P. Space-charge-limited currents in organic crystals / P. Mark, W. Helfrich // *J. Appl. Phys.* – 1962. – V.33. – P. 205–215.
45. Thomas J.M. Lattice imperfections in organic solids. Part 3, 4 / J.M. Thomas, J.O. Williams, L.M. Turton // *Trans. Faraday Soc.* – 1968. – V. 64. – P. 2496–2504.
46. Hwang W. Studies of the theory of single and double injections in solids with a gaussian trap distribution / W. Hwang, K.C. Kao // *Solid-State Electron.* – 1976. – V.19. – P. 1045–1047.
47. Nespurec S., Semejtec P. Space charge limited currents in insulators with gaussian distribution of traps / S. Nespurec. P. Semejtec // *Czech. J. Phys.* – 1972. – V. B22. – P. 160–175.
48. Boncham J.S. SCLC theory for a gaussian trap distribution / J.S. Boncham // *Aust. J. Chem.* – 1973. – V.26. – P. 927–939.
49. Simmons J.G. Theory of isothermal currents and the direct determination of trap parameters in semiconductors and insulators

- containing arbitrary trap distributions / J.G. Simmons, M.C. Tarn // *Phys. Rev.* – 1973. – V. B7. – P. 3706–3713.
50. Rose A. Performance of photoconductors / A. Rose // *Proc. IRE.* – 1955. – №43. – P. 1850–1869.
51. Pfister J.C. Note of interpretation of space–charge–limited currents with traps / J.C. Pfister // *phis. stat. sol A.* – 1974. – V. 24, № 1. – P. k15–k17.
52. Мотт Н. Электронные процессы в ионных кристаллах / Н. Мотт, Р. Герни // Москва: ИИЛ, 1950. – 197 с.
53. Акопян А.А. Обратные токи резких гетеропереходов  $p^+-Ge-n-GaAs$  / А.А. Акопян, З.С. Грибников, Р.В. Конакова // *Полупроводниковая техника и микроэлектроника.* – 1977. – №25. – С. 52–62.
54. Адирович Э.И., Исаев Г.О. О природе резкого роста тока при монополярной эмиссии в высокоомный полупроводник.– В кн.: Проблемы диэлектрической электроники / Э.И. Адирович, Г.О. Исаев. – Ташкент: Фан. – 1974. – С. 85–88.
55. Зюганов А.Н. Влияние конечности прикатодной концентрации носителей на вольтамперную характеристику монополярного полупроводника с произвольной степенью компенсации/ А.Н. Зюганов, Ю.Т. Письменный, Ю.А. Тхорик // *Полупроводниковая техника и микроэлектроника.* – 1974. – №15. – С. 47–49.
56. Зюганов А.И. Определение структуры локальных состояний запрещенной зоны квазимонополярного полупроводника по низкоинжекционной ВАХ / А.И. Зюганов, А.В. Маловичко, С.В. Свечников // *Полупроводниковая техника и микроэлектроника.*–1974. – №15. – С. 49–59.
57. Расчет экстремальных параметров для области скачка тока / А.Н. Зюганов, С.В. Свечников, А.Ю. Тхорик [и др.] // *УФЖ.* – 1977. – Т.22. – №3. – С. 370–375.



58. Беришвили З.В. Исследование электрофизических характеристик пленок твердых растворов материалов группы АІВVI, полученных катодным, трехэлектродным распылением / З.В. Беришвили, А.Н. Зюганов, С.В. Свечников // Полупроводниковая техника и микроэлектроника. – 1978.– №28. – С. 23–31.
59. Зюганов А.Н. Исследование механизма проводимости сендвич–структур  $\text{In}_{2-x}\text{Sn}_x\text{O}_{3-y}(\text{SnO}_2)\text{--CdSe--CdS:Cu, Cl}$  / А.Н. Зюганов, Э.Б. Каганович, С.Ф. Пирятинская // Полупроводниковая техника и микроэлектроника. – 1979.– №30. – С. 28–35.
60. Зюганов А.Н. Обобщенная методика определения объемных и контактных параметров полупроводника по вольт–амперной характеристике / А.Н. Зюганов, П.С. Смертенко, Е.П. Шульга // Полупроводниковая техника и микроэлектроника. – 1979.– №29. – С. 48–54.
61. Андриеш А.М. Электрические и фотоэлектрические свойства аморфных плёнок германий–сера, германий–селен / А.М. Андриеш, А.И. Будвутан, М.А. Иову // Реф. Ж. Изв. АН–МССР, сер. Физ–техн. и мат. наук. – Кишинев.– 1987.
62. Ashen S. Space–charge limited current in thin–film diamond / S. Ashen, K. Srikanth, A. Badzian // Appl. Phys. Lett. – 1987. – V. 50, №12. – P. 763–765.
63. Аронов Д.А. Физические явления и их закономерности в тонких аморфных пленках фосфида галлия, возбужденных светом или пучками быстрых электронов / Д.А. Аронов, Х.И. Исаев, В.М. Рубинов // ФТП. – 1994. – Т. 28, №2. – С. 177–197.
64. Пассивация кристаллического карбида кремния в водородной плазме / А.О. Константинов, Н.С. Константинова, О.И. Коньков // ФТП. – 1994. – Т.28, №2. – С. 342–344.

65. Analysis of SCLC curves by a new direct method / C. Manfredotti, C. De Blasi, S. Galassini [et al.] // *phis. stat. sol. A.* – 1976. – V. 36, №2. – P. 569–577.
66. Nespurec S. A Study of traps for current carriers in organic solids  $N,N'$ -diphenyl- $p$ -phenylenediamine / S. Nespurec, J. Obrda, J. Sworakowsky // *phis. stat. sol. A.* – 1978. – V. 46, №1. – P. 273–280.
67. Nespurec S. A differential method of analysis of steady-state-space-limited current-voltage characteristics / S. Nespurec, J. Sworacowsky // *phis. stat sol A.* – 1977. – V. 41, №2. – P. 619–627.
68. Nespurec S. A different method of analysis of steady-state space-charge-limited currents / S. Nespurec, J. Sworacowsky // *phis. stat. sol A.* – 1978. – V. 49. – P. k149–k152.
69. Shauer F. A new approach to the analysis of steady-state space charge limited currents using their activation energies an application to  $\alpha$ - $As_2Si_3$  / F. Shauer, O. Zmeskal, S. Nespurek // *phis. stat. sol. A.* – 1983. – V. 75, №2. – P. 531–534.
70. Stokman F. An exact evolution of steady-state space-charge-limited currents for arbitrary trap distribution / F. Stokman // *phis. stat. sol. A.* – 1981. – V. 64, №2. – P.475–483.
71. Weisfield R.L. Space-charge-limited currents: refinements in analysis and applications to  $\alpha$ - $Si_{1-x}Ge_x:H$  alloys / R.L. Weisfield // *J. Appl. Phys.* – 1983. – V. 54, №11. – P. 6401–6415.
72. Schauer F. The bulk trap spectroscopy of solids by temperature-modulated space-charge-limited currents (TMSCLC): Application to real crystalline and amorphous semiconductors / F. Schauer, S. Nespurek, O. Zmeskal // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1986. – V.19. – P. 7231–7246.
73. Zmeskal O. The bulk trap spectroscopy of solids by temperature-modulated space-charge-limited currents (TMSCLC) in the

- steady state / O. Zmeskal, F. Schauer, S. Nespurek // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1985. – V. 18. – P. 1873–1884.
74. Nespurek S. Spectroscopy of local states in molecular materials using space– charge – limited currents / S. Nespurek, J. Sworakowski // Radiat. Phys. Chem. – 1990. – V. 36, №1. – P. 3–12.
75. Ciurea M.L. Traps in polycrystalline CdTe thin films / M.L. Ciurea, T. Botila // phys. stat. sol. A. – 1980. – V.61, №2. – P. 487–491.
76. Defect levels in electrodepo–sited *n*–type CdTe thin films / S.M. So, W. Hwang, P.V. Meyers [et al] // J. Appl. Phys. – 1987.– V.61, №6. – P. 2234–2243.
77. Sitter H. Investigation of deep level in epitaxially grown CdS and CdTe layers / H. Sitter, J. Humenberger // J. Crystal Growth. – 1982. – V.59, №1–2. – P. 229–233.
78. Hole traps in p–type electrochemically deposited CdTe thin film / S.S. On, A. Bindal, O.M. Stafsudd [et al.] // J. Appl. Phys. – 1984. – V.55, №4. – P. 1020–1022.
79. On S.S. Space– charge– limited current measurement of traps in p–type electrochemically deposited CdTe thin films / S.S. On, O.M. Stafsudd, B.M. Basol // Thin Solid Films. – 1984. – V.112, №4.– P. 301–308.
80. Verity D. DLTS investigation of some II–VI compounds / D. Verity, F.J. Bryant, C.G. Scott // J. Cryst Growth. – 1982. – V.59, №1–2. – P. 234–239.
81. Райкерус П.А. Дифференциальный метод расчета вольт–амперных характеристик токов, ограниченных пространственным зарядом в полупроводниковом диоде / П.А. Райкерус, В.А. Лалэко // Радиотехника и электроника. – 1984. – Т. 29, №9. – С. 1840–1842.

82. Muller R.S. A unified approach to the theory of space charge limited currents in an insulator with traps / R.S. Muller // *Solid State Electron.* – 1963. – V.6, №1. – P. 25–32.
83. Стечкин С.Б., Субботин Ю.Н. Слайны в вычислительной математике / С.Б. Стечкин, Ю.Н. Субботин. – Москва: Наука, 1976. – 248 с.
84. Завьялов Ю.С. Методы сплайн-функций / Ю.С. Завьялов, Б.И. Квасов, В.Л. Мирошниченко. – Москва: Наука, 1980. – 352 с.
85. Шикин Е.В. Кривые и поверхности на экране компьютера. Руководство по сплайнам для пользователей / Е.В. Шикин, А.И. Плис. – Москва: Диалог, МИФИ, 1996. – 237 с.
86. Roberts G.G. Study of localized levels in semiisolators by combined measurements of thermally activated ohmic and space-charge-limited conduction / G.G. Roberts, F.W. Shmidlin // *Physical Review.* – 1969. – V.180, №3. – P. 785–794.
87. Верлань А.В., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: Методы, алгоритмы, программы / А.В. Верлань, В.С. Сизиков. – Киев: Наукова думка, 1986. – 542 с.
88. Тихонов А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методах регуляризации / А.Н. Тихонов // *ДАН СССР.* – 1963. – Т.151, №3. – С. 501–504.
89. Тихонов А.Н. Численные методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, А.Г. Ягола. – Москва: Наука, 1990. – 232 с.
90. Тихонов А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – Москва: Наука, 1986. – 287 с.
91. Леонов А.С. О выборе параметра регуляризации по критериям квазиоптимальности и отношения / А.С. Леонов // *ДАН СССР.* – 1978. – Т.240, №1. – С. 18–20.
92. Опанасюк А.С. Високотемпературний метод інжекційної спектроскопії глибоких пасток / А.С. Опанасюк, Н.В. Тир-

- кусова // Вісник Сумського державного університету, Серія: Фізика, математика, механіка. – 2000.– №17.– С. 28–37.
93. Опанасюк А.С. Деякі особливості реконструкції розподілів глибоких станів методом інжекційної спектроскопії / А.С. Опанасюк, І.Ю. Проценко, Н.В. Тиркусова // Журнал фізичних досліджень. – 2000.– Т.4, №2. – С.208–215.
94. Кунченко А.Л. Особливості дослідження глибоких пасток у напівізолюючих матеріалах методом високотемпературної інжекційної спектроскопії / А.Л. Кунченко, А.С. Опанасюк, Н.В. Тиркусова // 12-й Міжнародний симпозиум “Тонкі плівки в електроніці”, ISTFE-12, – Харків:ННЦ “ХФТИ.– 2001.– С. 315–318.
95. Space-charge-limited current in a film / A. Grinberg, S. Luryi, M. Pinto [et al.] // IEEE Trans. on Electr. Devices. – 1989. – V. 36, № 6. – P. 1162 – 1170.
96. Zoul A. Space-charge-limited currents in high resistivity CdTe crystals / A. Zoul, E. Klier // Czech. J. Phys. – 1977. – V. 27, № 7. – P. 789 – 796.
97. Basol B. M. Observation of electron traps in electrochemically deposited CdTe films / B.M. Basol, O.M. Stafssudd // Solid State Electronics. – 1981. – V. 24. – P. 121 – 125.
98. Павелец А. М. Исследование уровней прилипания в поликристаллических слоях ZnS / А.М. Павелец, Г.А. Пашенко, Е.А. Сальков // УФЖ. – 1982. – Т. 27, № 11. – С.761 – 765.
99. Физические явления и их закономерности в тонких аморфных пленках фосфида галлия, возбужденных светом или пучками быстрых электронов/ Д.А. Аронов, Х.И. Исаев, В.М. Русинов [и др.] // ФТП. – 1994. – Т.28, В.2. – С.177–197.
100. Attia A.A. Space-charge-limited currents in evaporated GaS thin films / A. A. Attia // Egypt. J. Sol. – 2001. – V. 24, № 2. – P. 235 – 244.

101. Тагиев Б.Г. Особенности токопрохождения в монокристаллах  $\text{PbGa}_2\text{Se}_4$  / Б.Г. Тагиев, Н.Н. Мусаева, Р.Б. Джаббаров // ФТП. – 2002. – Т. 36, № 3. – С.292 – 294.
102. Анализ механизмов переноса заряда в монокристаллах  $\text{Ca}_4\text{Ga}_2\text{S}_7$ :  $\text{Eu}^{3+}$ , определяющих форму вольт–амперных характеристик / Б.Г. Тагиев, У.Ф. Касумов, Н.Н. Мусаева [и др.] // ФТТ. – 2003. – Т. 45, № 3. – С.403 – 408.
103. Kalita P. Space–charge–limited conduction in CdSe thin films / P. Kalita, B. Sarma, H. Das // Bull. Mat. Sci. – 2003. – V. 26, № 6. – P. 613 – 617.
104. Sworakovski J. Trap distribution and space–charge–limited current in organic crystals anthracene / J. Sworakovski, K. Pigon // J. Phys. Chem. Solids. – 1969. – V. 30, №3. – P. 419–496.
105. Метод інжекційної спектроскопії для вивчення глибоких центрів у плівках телуриду кадмія / В.О. Любчак, А.С. Опанасюк, Н.В. Тиркусова [та ін.] // УФЖ. – 1999. – Т.44, №6. – С.741–747.
106. Опанасюк А.С. Инжекционная спектроскопия глубоких ловушечных центров в полупроводниковых тонких пленках / А.С. Опанасюк, А.П. Чекалов // Вісник Сумського державного університету. – 1994. – №1 – С. 29–34.
107. Самосогласованный дифференциальный метод инжекционной спектроскопии глубоких ловушек в полуизолирующих материалах / А.С. Опанасюк, Н.В. Тиркусова, В.И. Харченко [та ін.] // Вісник Сумського державного університету. – 1997. – №1(7). – С.131–138.
108. Опанасюк А.С. Високотемпературний метод інжекційної спектроскопії глибоких пасток / А.С. Опанасюк, Н.В. Тиркусова // Вісник Сумського державного університету, Серія: Фізика, математика, механіка. – 2000. – №17. – С.28–37.
109. Тагиев О. Б. Исследование влияния сильного электрического поля на электропроводность монокристалла  $\text{MnGaInS}_4$ :Eu

- / О.Б. Тагиев, Т.Ш. Гашимова, И.М. Аскеров // ФТП. – 1998. – Т. 32, № 6. – С. 701 – 702.
110. Александров Л.Н. Переходные области эпитаксиальных полупроводниковых пленок / Л.Н. Александров. – Новосибирск: Наука, 1978. – 272 с.
111. Орешкин П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков / П.Т. Орешкин. – Москва: Высшая школа, 1977. – 448 с.
112. de Boer R.W.I. Influence of surface traps on space-charge limited current / R.W.I de Boer, A.F. Morpurgo // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 72. – P. 073207–1–0733207–4.
113. Ibrahim A.A. DC electrical conduction of zinc telluride thin films / A.A. Ibrahim // Vacuum. – 2006. – V. 81. – P. 527–530.
114. Колесник М.М. Вплив просторової негомогенності зразків на точність визначення параметрів локалізованих станів методом струмів обмежених просторовим зарядом / М.М. Колесник, А.С. Опанасюк // Вісник Львівського університету, Серія фізична. – 2008. – Т.41. – С.143–150.
115. Determination of parameters of the localized states in spatial inhomogeneous semiconductor materials / М.М. Kolesnyk, V.V. Kosyak, A.S. Opanasyuk [et al.] // Photoelectronics. – 2007. – V.16. – P. 8–13.
116. Poortmans J. Thin film solar cells: fabrication, characterization and application / J. Poortmans, V. Arkhipov. – Leuven, Belgium: John Wiley&Sons, Ltd. IMEC, 2006. – 471 p.
117. Райкерус П. А. Дифференциальный метод расчета вольт-амперных характеристик токов, ограниченных пространственным зарядом в полупроводниковом диоде / П. А. Райкерус, В. А. Лалэко // Радиотехника и электроника. – 1984. – Т. 29, № 9. – С. 1840 – 1842.
118. Stokman F. On the dependence of photocurrents on the excitation strength / F. Stokman // phys. stat. sol. A. – 1969. – V.34. – P. 741 – 749.

119. Берченко Н.Н. Полупроводниковые твердые растворы и их применение: Справочные таблицы / Н.Н. Берченко, В.Е. Кревс, В.Г. Средин. – Москва: Воениздат, 1982. – 208 с.
120. Структура та електрофізичні властивості тонких плівок з'єднань ZnTe і ZnS / С.М. Данильченко, Т.Г. Калініченко, М.М. Колесник [та ін.] // ФХТП. – 2008. – V.9, №2. – С. 343–349.
121. Kolesnyk M.M. Point defect structure in CdTe and ZnTe thin films / M.M. Kolesnyk, V.V. Kosyak, A.S. Opanasyuk // J. Mat. Sci.: Mat. in Electr. – 2008. – V.19. – P. 375–381.
122. Structural and electrophysical properties of CdTe and ZnTe thin films / M.M. Kolesnyk, V.V. Kosyak, A.S. Opanasyuk [et al.] // Матеріали міжнародної конференції 22–nd Nordic Semiconductor Meeting NSM–22. – Stockholm, Sweden, 2007. – P.103.
123. Зюганов А.Н., Свечников С.В., Чумачкова М.М., Шапарь В.Н. Вольт–амперные характеристики монополярных полупроводников для различных высокополевых механизмов электропроводности // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. – 1986. – Т. 9.– С. 3–10.
124. Bogoslovskaya A.B. Electrophysical characteristics of LEDs based on GaN epitaxial films / A.B. Bogoslovskaya, I.O. Spichak // Semiconductor physics quantum electronics and optoelectronics. – 1998.– V. 1, № 1.– P. 112–115.
125. Милнс А. Гетеропереходы и переходы металл / А. Милнс, Д. Фойхт. – Физика полупроводников. – Москва: Мир, 1975. – 432 с.
126. Шарма Б.Л. Полупроводниковые гетеропереходы / Б.Л. Шарма, Р.Г. Пурохит. – Москва: Сов. Радио, 1979. – 232 с.
127. Горелик С.С. Материаловедение полупроводников и диэлектриков / С.С. Горелик, М.Я. Дашевский. – Москва: Металлургия, 1988. – 574 с.



128. Корбутяк Д.В. Телурид кадмію: домішково–дефектні стани та детекторні властивості / Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук. – Київ: Іван Федоров, 2000. – 198 с.
129. Zanio K. Cadmium telluride / K. Zanio // *Semiconductors and Semimetals*. – 1978. – №13. – P. 1–236.
130. Морозова Н.К. Сульфид цинка. Получение и оптические свойства / Н.К. Морозова, В.А. Кузнецов. – Москва: Наука, 1987. – 200 с.
131. Физика соединений  $A_2B_6$  / [Под ред. Георгобиани А.Н.]. – Москва: Наука, 1986. – 320 с.
132. Berding M.A. Vacancy formation energies in II–VI semiconductor / M.A. Berding, A. Sher, A.B. Chen // *J. Vac. Sci. Technol.* – 1987. – V. A.5, №5. – P.3009–3013.
133. Berding M.A. Native defects in CdTe / M.A. Berding // *Phys. Rev. B*. – 1999. – V.60, №12. – P. 8943–8950.
134. Berding M.A. Defects in ZnTe, CdTe and HgTe: Total energy calculations / M.A. Berding, M. Schilfgaard, A. Sher // *J. Vac. Sci. Technol.* – 1990. – V.A8, №2. – P.1103–1107.
135. Berding M.A. Annealing conditions for intrinsic CdTe / M.A. Berding // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – V.74, №4. – P. 552–554.
136. Chern S.S. The defects structure of CdTe: Hall data / S.S. Chern, H.R. Vydynath, F.A. Kroger // *J. Solid State Chem.* – 1975. – V.14, №1. – P. 33–40.
137. de Nobel D. Phase equilibria and semiconductors properties of cadmium telluride / D. de Nobel // *Phil. Res. Repts.* – 1959. – V. 14, № 3. – P. 430–492.
138. Chern S.S. The defects structure of CdTe: Diffusion data / S.S. Chern, H.R. Vydynath, F.A. Kroger // *J. Solid State Chem.* – 1975. – V.14, №1. – P.40–48.
139. Fochuk P. High–temperature point defect equilibrium in CdTe modelling / P. Fochuk, O. Korovyanko, O. Panchuk // *J. Cryst. Growth*. – 1999. – V. 197, №3. – P. 603–606.

140. Fochuk P. Experimental identification of the point defects / P. Fochuk, O. Panchuk // *CdTe and related compounds: physics, defects, hetero- and nano-structure, crystal growth, surfaces and applications*. [R. Triboulet, P.Siffert]. – Netherlands: Elsevier, 2010. – P. 292–362.
141. Фізико-хімічні проблеми напівпровідникового матеріалознавства. Том III. Сполуки АІВVI. Частина I. Кадмій телурид: монографічний збірник / Д.М. Фреїк, М.О. Галушак, В.В. Прокопів, І.В. Горічок [та ін.]. – Івано-Франківськ: Видавництво Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу, 2010. – 394 с.
142. Термодинамічний n–p–перехід у кристалах телуриду кадмію / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець [та ін.] // *ФХТТ*. – 2002. – Т.3, №1. – С.58–61.
143. Подвійний термодинамічний n–p–перехід у кристалах телуриду кадмію, легovanого хлором / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець [та ін.] // *ФХТТ*. – 2002. – Т.3, №4. – С. 642–646.
144. Фреїк Д.М. Модель атомних дефектів і термодинамічний n–p–перехід у легovanих золотом кристалах телуриду кадмію CdTe (Cd): Au / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець // *ФХТТ*. – 2003. – Т.4, №3. – С.547–554.
145. Saraie J. Effect of component element during LPE on electrical properties of CdTe / J. Saraie, M. Kitagava // *J. Solid State Chem.* – 1979. – V.126, № 12. – P. 2225–2231.
146. Квазіхімічний опис дефектів у телуриді кадмію / В.В. Косяк, А.С. Опанасюк, Н.М. Опанасюк [та ін.] // *Вісник Сумського державного університету. Серія: Фізика, математика, механіка*. – 2004. – №10 – С. 5–15.
147. Косяк В.В. Ансамбль точкових дефектів у монокристалах CdTe у випадку повної рівноваги та закалювання / В.В. Косяк, А.С. Опанасюк // *ФХТТ*. – 2005. – Т.6, №3. – С. 461–471.

148. Kosyak V.V. Ensemble of point defects in single crystals and films in the case of full equilibrium and quenching / V.V. Kosyak, A.S. Opanasyuk, I.Yu. Protsenko // *Functional Materials*. – 2005. – №4. – P. 797–806.
149. Kasap S. The springer handbook of electronic and photonic materials / S. Kasap, P. Capper. – Berlin: Springer, 2007. – 1406 p.
150. Observation and first-principles calculation of buried wurtzite phases in zinc-blende CdTe thin films / Y. Yan, M.M. Al-Jassim, K.M. Jones [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2000. – V.77, №10. – P.1461–1463.
151. Косяк В.В. Структура точкових дефектів у плівках телуриду кадмію: дис. канд. фіз.–мат. наук: 01.04.07 / Косяк Володимир Володимирович. – Суми, 2009. – 170 с.
152. Phase equilibria, defect chemistry and semiconducting properties of CdTe(s) – thermodynamic modelling / Q. Chen, M. Hillert, B. Sundman [et al.] // *J. Electr. Mater.* – 1998. – V.27, №8. – P. 961–971.
153. Smith F.T. Electrically active point defects in CdTe / F.T. Smith // *J. Metall. Trans.* – 1971. – V.1, №3. – P.617–625.
154. Wienecke M. Native point defects in CdTe and its stability region / M. Wienecke, H. Berger, M. Schenk // *J. Mater. Sci. Eng.* – 1993. – V.16. – P.219–222.
155. Матвеев О.А. Самокомпенсация в CdTe(Cl) в условиях фазового равновесия кристалл–пар кадмия (теллура) / О.А. Матвеев, А.И. Терентьев // *ФТП*. – 1998. – Т.32, №2. – С. 159–163.
156. Effect of precursors stoichiometry on morphology, crystallinity and electrical properties of ZnTe epilayers grown on (100) GaAs by MOVPE / P. Paiano, P.Prete, N. Lovergine [et al.] // *Cryst. Res. Technol.* – 2005. – V. 40, № 10. – P. 1011–1017.

157. Калинин И.П. Эпитаксиальные пленки соединений  $A_2B_6$  / И.П. Калинин, В.Б. Алесковский, А.В. Симашкевич. – Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1978. – 311 с.
158. Drabold D.A. Theory of defects in semiconductors / D.A. Drabold, S.K.Estreicher. – Berlin: Springer-Verlag, 2007. – 295 p.
159. Berding M.A. First-principles calculation of native defect densities in  $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$  / M.A. Berding, M. Schilfgaarde, A. Sher // Phys. Rev. B. – 1994. – V.50, №3. – P. 1519–1534.
160. Wei S.H. First-principles study of doping limits of CdTe / S.H. Wei, S.B. Zhang // phys. status solidi A. – 2002. – V.229, №1. – P. 305–310.
161. Kosyak V.V. Calculation of fermi level location and point defect ensemble in CdTe single crystal and thin films / V.V. Kosyak, A.S. Opanasyuk // Semicond. Phys. Quant. Electr. Optoelectron. – 2007. – V.10, №3. – P. 95–102.
162. Meyer B.K. Native defect identification in II–VI materials / B.K. Meyer, W. Stadler // J. Cryst. Growth. – 1996. – V.161, №4. – P.119–127.
163. Identification of the cadmium vacancy in CdTe by electron paramagnetic resonance / P. Emanuelsson, P. Omling, B.K. Meyer [et al.] // Phys. Rev. B. – 1993. – V. B47. – P. 15578–15580.
164. Wei S.H. Chemical trends of defect formation and doping limit in II–VI semiconductor: The case of CdTe / S.H. Wei, S.B. Zhang // Phys. Rev. B. – 2002. – V.66. – P. 1–10.
165. Pogrebnjak A.D. Observation of positronium states in strongly damaged semiconductors / A.D. Pogrebnjak, M.F. Kuznetsov, Yu.P. Surova // Phys. Lett. A. – 1984. – V. 105, № 1–2. – P. 69–71.

166. Adachi S. Handbook on physical properties of semiconductors. V.3. II–VI compound Semiconductors / S. Adachi. – New York, Boston: Kluwer Academic publishers, 2004. – 1472 p.
167. Adachi S. Properties of group – IV, III–V and II–VI semiconductors / S. Adachi. – New York: John Wiley & Sons, 2005. – 387 p.
168. Курбатов Д.І. Структурні, оптичні та електрофізичні властивості плівок ZnS та гетеропереходів  $n$ -ZnS/ $p$ -CdTe: дис. канд. фіз.-мат. наук: 01.04.07 / Курбатов Денис Ігорович. – Суми, 2010. – 157 с.
169. Zhidong L. Point defects in active layers of TFEL devices based on ZnS / L. Zhidong, A. Georgobiani // Chinese Sci. Bull. – 1998. – V. 43 (6). – P. 518–522.
170. Denzler D. Luminescence studies of localized gap states in colloidal ZnS nanocrystals // D. Denzler, M. Olschewski, K.Sattler // J. Appl. Phys. – 1998.– V.84, №5. – P. 2841–2845.
171. High temperature electrical conductivity of undoped ZnS / K. Lott, L. Turn, O.Volobujeva [et al.] // Physica B. – 2001. – V.308–310. – P. 932–934.
172. Close–spaced evaporated ZnSe films: Preparation and characterization / Y.P.V. Subbaiah, P. Prathap, M. Device [et al.] // Phys. B. – 2005. – V.365. – P.240–246.
173. Subbaiah Y.P.V. Structural, electrical and optical properties of ZnS films deposited by close–spaced evaporation / Y.P.V. Subbaiah, P. Prathap, K.R. Reddy // Appl. Surf. Sci. – 2006. – V. 253. – P.2409–2415.
174. Prathap P. Thickness effect on the microstructure, morphology and optoelectronic properties of ZnS films / P. Prathap, N. Revathi, Y.P.V. Subbaiah // J. Phys.: Cond. Mat. – 2008. – V. 20. – P. 035205–035215.
175. Influence of growth rate on microstructure and optoelectronic behaviour of ZnS films / P. Prathap, Y.P.V. Subbaiah, P. Prathap

- [et al.] // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2007. – V. 40. – P. 5275–5282.
176. Preparation and characterization of transparent conducting ZnS:Al films / P. Prathap, N. Revathi, Y.P.V. Subbaiah [et al.] // Sol. State Sci. – 2009. – V.11. – P. 224–232.
177. The way to determine parameters of the local states using the method of space charge limited currents in inhomogeneous materials / A.S. Opanasyuk, M.M. Kolesnik, V.V. Kosyak [et al.] // Materials of the 6<sup>th</sup> European conference on luminescent detectors and transformers of ionizing radiation (LUMDETR 2006). – Ukraine, Lviv, June 19–23, 2006. – P. 205.
178. Тиркусова Н.В. Інжекційна спектроскопія глибоких пасткових центрів в плівках телуриду кадмію: дис. канд. фіз.–мат. наук: 01.04.07 / Тиркусова Надія Володимирівна. – Суми, 2002. – 189 с.
179. Annealing studies of electrodeposited zinc telluride thin films / T. Mahalingam, V.S. John, S. Rajendran [et al.] // Surf. Coat. Techn. – 2002. – V. 155. – P.245–249.
180. Колесник М.М. Структурні, електрофізичні та оптичні властивості плівок ZnTe та гетеропереходів ZnTe/CdTe: дис. канд. фіз.–мат. наук: 01.04.07 / Колесник Максим Миколайович. – Суми, 2010. – 168 с.
181. On the electronic transport and optical properties of ZnTe thin films / G.I. Rusu, P. Prepelita, N. Apetroaei [et al.] // J. Opt. Electr. Adv. Mat. – 2005. – V. 7, №. 2. – P. 829–835.
182. Фаренбрук А. Солнечные элементы. Теория и эксперимент / А. Фаренбрук, Р. Бьюб. – Москва: Энергоатомиздат, 1987. – 280 с.
183. Симашкевич А.В. Гетеропереходы на основе полупроводниковых соединений  $A_2B_6$  / А.В. Симашкевич. – Кишинев: Штиинца, 1980. – 156 с.

184. Махний В.П. Диффузионные слои ZnTe:Sn с электронной проводимостью / В.П. Махний, В.И. Гривун // ФТП. – 2006. – Т.40, В.7. – С. 794–795.
185. Опанасюк А.С. Инжекционная спектроскопия глубоких ловушечных центров в полупроводниковых тонких пленках / А.С. Опанасюк, А.П. Чекалов // Вестник Сумского государственного университета. – 1994. – №1. – С. 29–35.
186. Самосогласованный дифференциальный метод инжекционной спектроскопии глубоких ловушек в полуизолирующих материалах / А.Н. Бобров, А.С. Опанасюк, Н.В. Тиркусова [та ін.] // Вісник Сумського державного університету. – 1997. – №1(7). – С. 131–138.
187. Armstrong S. Properties of zinc sulfur selenide deposited using a close-spaced sublimation method / S. Armstrong, P.K. Datta, R.W. Miles // Thin Solid Films. – 2002. – V. 403–404. – P. 126–129.
188. Balasz J. Investigation of the I–V characteristics of ZnS single crystals / J. Balasz // Acta Phys. Hung. – 1968. – V. 25. – P. 413–415.
189. Bale A. Preparation and study of thickness dependent electrical characteristics of zinc sulfide thin films / A. Bale, D. Kulkarni // V. Mater. Sci. – 2005. – V. 28. – P. 43–47.
190. Оптическая спектроскопия глубоких состояний в ZnTe / А.В. Квит, С.А. Медведев, Ю.В. Клевков [и др.] // ФТП. – 1998. – Т.40, В.6. – С. 1010–1017.
191. Влияние отжига в парах и в жидком Zn на фотолюминесценцию высокочистых поликристаллов ZnTe / В.С. Багаев, В.В. Зайцев, Ю.В. Клевков [и др.] // ФТП. – 2003. – Т.37, В.3. – С. 299–303.
192. Морфология, двойникование и фотолюминесценция кристаллов ZnTe, выращенных методом химического синтеза компонентов из паровой фазы / Ю.В. Клевков, В.П. Марто-

- вицкий, В.С. Багаев [и др.] // ФТП. – 2006. – Т.40, В.2. – С. 153–159.
193. Электрические свойства, фотопроводимость и фотолюминесценция крупнозернистого  $p$ -ZnTe / Ю.В. Клевков, С.А. Колосов, В.С. Кривобоков [и др.] // ФТП. – 2008. – Т.42, В.11. – С. 1291–1296.
194. Изменение спектра фотолюминесценции вблизи двойниковых границ в кристаллах ZnTe, полученных при быстрой кристаллизации / В.С. Багаев, Ю.В. Клевков, В.С. Кривобоков [и др.] // ФТП. – 2008. – Т.50, В.5. – С.774–780.
195. Investigation of photoluminescence and electroconductivity of ZnTe grown in hydrogen atmosphere / D.V. Korbutyak, N.D. Vakhnyak, D.I. Tsutsura [et al.] // Ukr. J. Phys. – 2007. – V. 52, №4. – P. 378–381.
196. On interaction of hydrogen atoms with complex defects in CdTe and ZnTe / D.I. Tsutsura, D.V. Korbutyak, O.M. Pihur [et al.] // Ukr. J. Phys. – 2007. – V.52, №12. – P. 1165–1169.
197. Taguchi T. Growth of high-purity ZnTe single crystals by the sublimation travelling heater method / T. Taguchi, S. Fujita, Y.G. Inushi // J. Cryst. Growth. – 1978. – V.45. – P. 204–213.
198. Dean P.J. Copper, the dominant acceptor in refined, undoped zinc telluride // P.J. Dean / Luminesc. – 1979. – V. 21. – P. 75–83.
199. Bhunia S. Photoluminescence and photoconductivity in hydrogen-passivated ZnTe / S. Bhunia, D. Pal, D.N. Bose // Semicond. Sci. Technol. – 1998. – V.13. – P. 1434–1438.
200. Annealing-induced changes in the electronic and structural properties of ZnTe substrates / J.A. Garcia, A. Remon, V. Munoz [et al.] // J. Mater. Res. – 2000. – V.15, №7. – P. 1612–1616.
201. Structural and electrical properties of evaporated ZnTe thin films / A.A. Ibrahim, N.Z. El-Sayed, M.A. Kaid [et al.] // Vacuum. – 2004. – V. 75. – P. 189–194.



202. Conduction studies on ZnTe thin films / R. Amutha, A. Subbarayan, R. Sathyamoorthy [et al.] // *J. New Mat. Elect. Syst.* – 2007. – V.10. – P. 27–31.
203. Садофьев Ю.Г. Спектры глубоких уровней в слоях ZnTe:Cr<sup>2+</sup>, полученных эпитаксией из молекулярных пучков / Ю.Г. Садофьев, М.В. Коршков // *ФТП.* – 2002. – Т.36, В.5. – С. 525–527.
204. Hossain M.S. Temperature effect on the electrical properties of undoped and vanadium-doped ZnTe thin films / M.S. Hossain, R. Islam, K. A. Khan // *Renew. Energ.* – 2008. – V. 33, № 4. – P. 642–647.
205. The structural phase transition and mechanism of abnormal temperature dependence of conductivity in ZnTe:Cu polycrystalline thin films / J. Zhang, L. Feng, W. Cai [at al.] // *Thin Solid Films.* – 2002. – V. 414. – P. 113–118.
206. The structural, optical, and electrical properties of vacuum evaporated Cu-doped ZnTe polycrystalline thin films / L. Feng, D. Mao, J. Tang [at al.] // *J. Electron. Mater.* – 1996. – V. 25. – P. 1422–1427.
207. Bellakhder H. Study of ZnTe thin films deposited by RF sputtering / H. Bellakhder, A. Outzourhit, E.L. Ameziane // *Thin Solid Films.* – 2001. – V.382. – P. 30–33.
208. Properties of CdTe thin films prepared by hot-wall epitaxy / Y. Bilevych, A.I. Boka, L.O. Darchuk [et al.] // *Semicond. Phys. Quant. Electr.* – 2004. – V.7, № 2. – P.129–132.
209. The nature of the predominant acceptors in high quality zinc telluride / P.J. Dean, H. Venghaus, J.C. Pfister [et al.] // *J. Lumin.* – 1978. – V.16. – P.363–394.
210. Nespurek S. A differential method of analysis of steady-state space-charge-limited currents: an extension / S. Nespurek, J. Sworakowski // *phys. status solidi A.* – 1978. – V. 49. – P. 149–152.

211. Nespurek S. Use of space-charge-limited current measurement to determine of properties of energetic distributions of bulk traps / S. Nespurek, J. Sworakowski // J. Appl. Phys. – 1980. – V. 51, №4. – P. 2098–2102.
212. Atakova M. Local levels in a zinc sulfide film / M. Atakova, P. Ramazanov, E. Sal'man // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Fizika. – 1973. – V.10. – P. 95–98.
213. Preparation and characterization of n-ZnS and its self-assembled thin film / J.M. Abbas, C. Mehta, G.S.S. Saini [et al] // Digest J. Nanomater. Biostruct. – 2007. – V. 2 (3). – P. 271–276.
214. Опанасюк А.С. Структурні, електрофізичні та оптичні властивості плівок сполук  $A_2B_6$  і гетеропереходів на їх основі: дис. д. ф.-м. наук: 01.04.07 / Опанасюк Анатолій Сергійович. – Суми, 2011. – 378 с.
215. Калиткин Н.Н. Численные методы – Москва: Наука, 1978. – 512 с.

## **Обкладинка**

### **Опанасюк Анатолій Сергійович**



Доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри електроніки і комп'ютерної техніки Сумського державного університету. Фахівець у галузі дослідження властивостей плівок нових напівпровідникових матеріалів і багатошарових структур на їх основі для створення пристроїв мікро-, оптоелектроніки, геліоенергетики та сенсорики. Автор понад 450 наукових і методичних робіт, зокрема 6 навчальних посібників, 4 патентів, 2 колективних монографій і 80 статей у виданнях, які обліковуються науково-метричними базами даних Scopus та Web of Science.

### **Тиркусова Надія Володимирівна**



Кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри комп'ютерних наук Сумського державного університету. Фахівець у галузі розробки математичних моделей та їх комп'ютерної реалізації з дослідження та реконструкції розподілів глибоких станів методом інжекційної спектроскопії. Автор понад 70 наукових та методичних робіт, зокрема 4 навчальних посібників, 12 статей у фахових журналах.

### **Колесник Максим Миколайович**



Кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри Прикладної математики та моделювання складних систем Сумського державного університету. Фахівець у галузі отримання та дослідження властивостей напівпровідникових плівок що використовуються для створення пристроїв оптоелектроніки та геліоенергетики. Автор понад 40 наукових та методичних робіт, зокрема 10 статей у виданнях, які обліковуються науково-метричними базами даних Scopus та Web of Science.

### **Косяк Володимир Володимирович**



Кандидат фізико-математичних наук, докторант кафедри електроніки і комп'ютерної техніки Сумського державного університету, науковий співробітник кафедри твердотільної електроніки університету Упсали (Швеція). Фахівець у галузі дослідження точкових дефектів у напівпровідникових матеріалах, електричних властивостей напівпровідникових плівок та сонячних перетворювачів на їх основі. Автор понад 50 наукових робіт, зокрема 25 статей у виданнях, які обліковуються науково-метричними базами даних Scopus та Web of Science.

## **Курбатов Денис Ігорович**



Кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, начальник науково-дослідної частини (НДЧ) Сумського державного університету. Фахівець у галузі напівпровідникового матеріалознавства, зокрема у напрямі синтезу і дослідження багатошарових плівкових структур халькогенідів, халькопїритів та кестеритів, що використовуються для створення пристроїв оптоелектроніки та геліоенергетики. На посаді керівника НДЧ, безпосередньо бере участь в організації річного виконання близько 800-900 науково-дослідних робіт на замовлення більш ніж 400 підприємств, установ та організацій різних форм власності, у т.ч. із більш ніж 25 країн світу. Автор понад 150 наукових робіт у т.ч. більше 40 у виданнях, які обліковуються науково-метричними базами даних Scopus та Web of Science, 3 патентів, 2 колективних монографій англійською мовою у закордонних видавництвах та низки інших публікацій.

## **Доброжан Олександр Анатолійович**



Асистент, молодший науковий співробітник кафедри електроніки та комп'ютерної техніки Сумського державного університету. Фахівець у галузі створення та дослідження тонких плівок на основі халькогенідів та кестеритів отриманих безвакуумними техніками для використання у сонячних перетворювачах. Автор понад 50 наукових робіт, зокрема 13 статей у виданнях, які індексуються науково-метричними базами даних Scopus та Web of Science.

Наукове видання

**Опанасюк** Анатолій Сергійович, **Тиркусова** Надія Володимирівна, **Колесник** Максим Миколайович та ін.

**ІНЖЕКЦІЙНА СПЕКТРОСКОПІЯ  
ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ  
У ПЛІВКАХ НАПІВІЗОЛЮЮЧИХ СПОЛУК  $A_2B_6$**

Монографія

Художнє оформлення обкладинки М. М. Колесник  
Редактор О. А. Доброжан  
Комп'ютерне верстання О. А. Доброжан

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 14,76. Обл.-вид. арк. 13,15. Тираж 300 пр. Зам. №

Видавець і виготовлювач  
Сумський державний університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК №3062 від 17.12.2007.