

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет

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

**Монографія**

**За загальною редакцією А. С. Опанасюка, Д. І. Курбатова**

Рекомендовано вченою радою Сумського державного університету



Суми  
Сумський державний університет  
2018

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

Рецензенти:

- Л. В. Одноворець* – доктор фізико-математичних наук, професор Сумського державного університету;  
*О. Г. Пономарьов* – доктор фізико-математичних наук, професор Інституту прикладної фізики НАН України (м. Суми)

*Рекомендовано до видання  
вченою радою Сумського державного університету  
(протокол № 6 від 15 листопада 2018 року)*

I-57 **Інжекційна** спектроскопія локалізованих станів у плівках напівізолювальних сполук  $A_2B_6$ : монографія / А. С. Опанасюк, Д. І. Курбатов, Н. В. Тиркусова [та ін.] ; за заг. ред. А. С. Опанасюка, Д. І. Курбатова. – Суми : Сумський державний університет, 2018. – 254 с.  
ISBN 978-966-657-744-6

У монографії наведено результати вивчення характеристик точкових дефектів у напівізолювальних 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. Описане самоузгоджене та високотемпературне наближення методу інжекційної спектроскопії. Розглянуто вплив неоднорідності розподілу пасток за товщиною зразків на точність визначення їх параметрів із ВАХ струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ). Наведені 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**

© Опанасюк А. С., Курбатов Д. І.,  
Тиркусова Н. В. та ін., 2018

ISBN 978-966-657-744-6

© Сумський державний університет, 2018

## ЗМІСТ

	С.
СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	7
ВСТУП.....	12
РОЗДІЛ 1. СТРУМИ, ОБМЕЖЕНІ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У НАПІВПРОВІДНИКАХ.....	15
1.1. Класифікація локалізованих станів у напівпровідниках..	15
1.2. Основні поняття, пов’язані з електропровідністю, обмеженою просторовим зарядом .....	19
1.3. Вольт-амперна характеристика у випадку монополярної інжекції носіїв у напівпровідник.....	23
1.3.1. Залежність струм – напруга за наявності в напівпровіднику моноенергетичних пасток .....	27
1.3.2. Особливості вольт-амперної характеристики за наявності неперервних розподілів пасток .....	35
1.3.3. Обмеження моделей слабого та сильного заповнення пасток носіями.....	38
1.3.4. Нові підходи до визначення параметрів глибоких пасток із вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом .....	42
РОЗДІЛ 2. ВОЛЬТ-АМПЕРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРУМІВ, ОБМЕЖЕНИХ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У ВИПАДКУ СКЛАДНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ ЗА ЕНЕРГІЄЮ (ПРЯМА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ).....	45
2.1. Аналіз придатності аналітичних виразів для коректних розрахунків вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом .....	45
2.2. Наближений метод розрахунку залежностей струм - напруга за відомими розподілами носіїв заряду на пастках ....	56
2.3. Вплив параметрів локалізованих станів та температури вимірювань на вигляд вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом .....	60

РОЗДІЛ 3. ОСОБЛИВОСТІ РЕКОНСТРУКЦІ ЕНЕРГЕТИЧНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ МЕТОДОМ ІНЖЕКЦІЙНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ (ОБЕРНЕНА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ) .....	64
3.1. Теоретичні основи методу інжекційної спектроскопії .....	64
3.2. Визначення параметрів глибоких пасток для різних типів розподілів локалізованих станів .....	78
3.3. Вплив експериментальних факторів на точність визначення параметрів глибоких локалізованих центрів методом інжекційної спектроскопії .....	80
3.4. Вплив спрощень робочих співвідношень на точність визначення параметрів пасток методом інжекційної спектроскопії .....	88
3.5. Самоузгоджений метод інжекційної спектроскопії .....	97
3.6. Високотемпературне наближення методу інжекційної спектроскопії .....	103
РОЗДІЛ 4. ІНЖЕКЦІЯ НОСІЇВ В УМОВАХ НЕОДНОРІДНОГО ПРОСТОРОВОГО РОЗПОДІЛУ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ .....	116
4.1. Основні підходи до визначення параметрів локалізованих станів у напівпровідниках методом аналізу вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом .....	116
4.2. Врахування впливу просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів локалізованих станів ....	117
4.3. Вплив просторової неоднорідності зразків на точність визначення параметрів локалізованих станів методом аналізу вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом .....	121
4.4. Вольт-амперні характеристики струмів, обмежених просторовим зарядом неоднорідних матеріалів .....	122
4.5. Врахування приповерхневих станів, розміщених поблизу однієї поверхні зразка .....	127
4.6. Врахування приповерхневих станів, розміщених поблизу обох поверхонь зразка .....	134

РОЗДІЛ 5. КЛАСИФІКАЦІЯ МЕХАНІЗМІВ ЗАРЯДОПЕРЕНЕСЕННЯ У НАПІВПРОВІДНИКАХ.....	140
5.1. Ідентифікація механізму зарядоперенесення в досліджуваних структурах .....	140
5.2. Ідентифікація струмів, обмежених просторовим зарядом серед інжекційних процесів .....	147
РОЗДІЛ 6. ДОСЛІДЖЕННЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ПЛІВКАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ У РАМКАХ КВАЗІХІМІЧНОГО ФОРМАЛІЗМУ .....	151
6.1. Класифікація дефектів у плівках сполук $A_2B_6$ .....	151
6.2. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у CdTe в рамках квазіхімічного формалізму .....	152
6.2.1. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у монокристалах CdTe.....	152
6.2.2. Квазіхімічний опис ансамблю точкових дефектів у плівках CdTe для випадків повної рівноваги та гартування.....	166
6.2.3. Моделювання ансамблю точкових дефектів у плівках CdTe з використанням параметрів дефектоутворення, розрахованих « <i>ab initio</i> » .....	171
6.3. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у сульфіді цинку в рамках квазіхімічного формалізму .....	184
6.3.1. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у монокристалах ZnS із використанням параметрів дефектоутворення, розрахованих « <i>ab initio</i> » .....	184
6.3.2. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у плівках ZnS для випадків повної рівноваги та гартування.....	187
РОЗДІЛ 7. ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ У НАПІВІЗОЛЮВАЛЬНИХ СПОЛУКАХ $A_2B_6$ .....	192
7.1. Загальна характеристика вольт-амперних характеристик та $\sigma - T$ -залежностей плівок халькогенідів .....	192
7.1.1. Вольт-амперні характеристики багат шарових структур на основі плівок ZnTe.....	192

7.1.2. Вольт-амперні характеристики багат шарових структур на основі плівок CdTe.....	199
7.1.3. Вольт-амперні характеристики багат шарових структур на основі плівок ZnS.....	206
7.2. Визначення параметрів локалізованих станів плівок халькогенідних сполук із вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом та $\sigma - T$ -залежностей.....	208
7.2.1. Параметри локалізованих станів у плівках ZnTe.....	208
7.2.2. Параметри локалізованих станів у плівках CdTe .....	214
7.2.3. Параметри локалізованих станів у плівках ZnS.....	219
7.2.4. Параметри локалізованих станів у плівках CdS .....	220
Додаток А .....	225
Список використаної літератури .....	230

## СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ВАХ	–	вольт-амперна характеристика
ЛС	–	локалізований стан
ІС	–	інжекційна спектроскопія
СОПЗ	–	струми, обмежені просторовим зарядом
МІ	–	монополярна інжекція
ПдІ	–	подвійна інжекція
ПдІ + ПІ	–	польова іонізація при подвійній інжекції
ПІ	–	польова іонізація
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 електрона
$\phi_m$	–	робота виходу електронів із металу
$\phi_s$	–	робота виходу електронів із напівпровідника
$\epsilon_0, \epsilon$	–	абсолютна діелектрична стала та відносна діелектрична проникність матеріалу
$G$	–	фактор спінового виродження ЛС
$\mu_n, \mu_p$	–	рухливість електронів і дірок
$v$	–	теплова швидкість руху носіїв заряду
$V$	–	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, одержана екстраполяцією омічного струму до дійсної напруги, прикладеної 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 за відсутності інжекції
$E_F$	– енергія квазірівня Фермі
$E_{dn}, E_{dp}$	– енергія електронного та діркового демаркаційного рівнів
$N_t$	– концентрація моноенергетичних пасток
$N_t^*$	– концентрація пасток, що 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 відпалювання 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 внесок 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 функції 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 інжекттованих 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
$N_{(XO)}^z$	– 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 під час відпалювання
$p_f$	– концентрація вільних дірок
$n_{f0}$	– рівноважна концентрація вільних електронів у зразку
$n_f$	– концентрація вільних електронів
$n_i$	– концентрація інжекттованих із 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 разі неоднорідного матеріалу

$n_H$	– холлівська 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 із розробленням, освоєнням і використанням нових напівпровідникових матеріалів. Серед напівпровідників, що будуть визначати майбутнє сенсорики, опто-, акустoeлектроніки 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. Підвищений 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 за наявності ЗЗ матеріалу моноенергетичних і неперервних розподілів пасток, наведені обмеження моделей слабого та сильного заповнень пасток носіями та подані нові підходи до ви-

значення параметрів глибоких пасток із вольт-амперних характеристик (ВАХ) струмів, обмежених просторовим зарядом (СОПЗ).

У другому розділі роботи наведені результати побудови теоретичних ВАХ СОПЗ з використанням декількох різних методів за наявності у ЗЗ матеріалу складних розподілів ЛС за енергією (пряма задача експерименту). Проаналізовано вплив виду аналітичних виразів, що використовувалися, 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 із ВАХ СОПЗ методом інжекційної спектроскопії (ІС) (обернена задача експерименту). Наведені теоретичні основи цього методу, досліджений вплив експериментальних факторів та спрощень робочих співвідношень на точність визначення параметрів ЛС із експериментальних ВАХ методом ІС. Описані самоузгодження та високотемпературне наближення методу.

У четвертому розділі розглянутий вплив неоднородності розподілу пасток за товщиною зразка на точність визначення їх параметрів із ВАХ СОПЗ. Розглянуті випадки наявності приповерхневих ЛС поблизу однієї або обох поверхонь зразка. Наведені результати розрахунку корегувальних коефіцієнтів, що дозволяють враховувати 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 відпалювання монокристалів CdTe під надлишковим тиском кадмію, плівок CdTe, ZnS при їх нанесенні на підкладку за різних температур. 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. Із використанням літературних даних проведена ідентифікація цих рівнів як таких, що належать власним точковим дефектам, неконтрольованим домішкам, а також їх комплексам.

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

# РОЗДІЛ 1

## СТРУМИ, ОБМЕЖЕНІ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

### 1.1. Класифікація локалізованих станів у напівпровідниках

Напівпровідникові матеріали та діелектрики будь-якої чистоти завжди містять неконтрольовані домішкові атоми, що створюють у ЗЗ матеріалу свої власні енергетичні рівні, які одержали назву домішкових. Ці рівні можуть розмішуватися як у дозволених, так і в ЗЗ матеріалу на різній відстані від вершини валентної зони або дна зони провідності. Рівні, розміщені досить глибоко ( $E_t \geq kT$ , де  $kT$  – теплова енергія) у ЗЗ матеріалу одержали 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, що одержали назву глибини залягання рівня у ЗЗ матеріалу ( $E_t$ ), концентрації пасток ( $N_t$ ), перетину захоплення носіїв заряду (електрона або дірки) дефектом ( $S_n$ ), коефіцієнта прилипання носіїв ( $\theta$ ) та ін. [1–3, 8].

Залежно 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, розміщений 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 за ймовірність 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  $E_{dn}$ , розміщений 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  $E_{Fn}$ , одержимо 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:

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

Очевидно, що

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

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

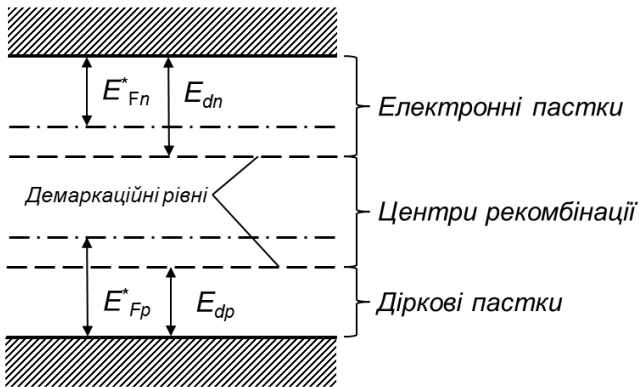


Рисунок 1.1 – Відносне розміщення демаркаційних рівнів і квазі-рівнів Фермі

Демаркаційні рівні та квазірівні Фермі поділяють ЗЗ напівпровідника на п'ять областей, що мають такі властивості. У найближчій до зони провідності області містяться енергетичні рівні

електронних пасток, що перебувають у термічній рівновазі з даною зоною. Очевидно, що ці рівні слабо заповнені електронами, тому вони одержали назву *мільких пасток*. У другій області розміщені енергетичні рівні, які поки що перебувають у термічній рівновазі із зоною провідності, але значно більше заповнені електронами. Вони одержали назву *глибоких пасток*. У третій області розміщені рівні *рекомбінаційних центрів*, заповнення яких визначається кінетикою рекомбінації. Ще нижче розміщені рівні істотно заповнені дірками, але такі, що поки що перебувають у термічному обміні з валентною зоною і, нарешті, мількі 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 зрозуміло, що центрам різних типів будуть відповідати різні демаркаційні рівні. Характер ЛС значною мірою визначається також концентрацією вільних носіїв того чи іншого типу в матеріалі. Так, у разі монополярної інжекції носіїв у напівпровідник, якщо концентрація носіїв одного знака набагато більша, ніж іншого, ряд дефектів, які за звичайних умов є рекомбінаційними центрами, починають поводити себе як глибокі пастки [9, 10].

Із ЛС у ЗЗ напівпровідників пов'язані як бажані, так і небажані ефекти. Наприклад, наявність великої концентрації рекомбінаційних центрів призводить до істотного 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, необхідних властивостей [11, 12], наприклад, у разі

швидкодіючих приладів малий час життя носіїв заряду. Все це свідчить про важливість розуміння властивостей ЛС, необхідність контролю їх наявності у матеріалі у процесі одержання та оброблення 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, в 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 із катода. У результаті густина струму крізь зразок у цьому випадку буде контролюватися не електродом, що інжектує носії, а об'ємними властивостями напівпровідника або діелектрика, або, іншими словами, рухливістю носіїв заряду в об'ємі речовини. Зазвичай, електрони, що емітовані, певним чином розподілені за енергією, а у самому матеріалі розміщені ЛС, що також мають розподіл за енергією, нарешті, існує ряд фізичних ефектів, викликаних наявністю у напівпровіднику сильних полів. Таким чином, реальна картина процесів, що відбуваються у речовині, досить складна, і для того щоб одержати ВАХ явища достатньо простим шляхом, потрібні спрощувальні припущення.

Темновий СОПЗ, що не пов'язаний ні з поглинанням світла, ні з термічним збудженням носіїв заряду, виникає у тих випадках, якщо контактні електроди спроможні інжектувати або електрони у зону провідності, або дірки у валентну зону напівпрові-

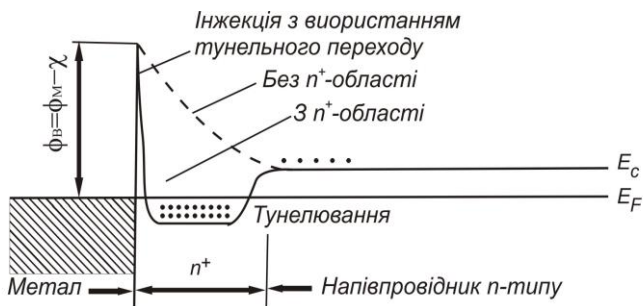
дника чи діелектрика, при цьому початкова швидкість такої інжекції перевищує швидкість їх рекомбінації. Внаслідок цього інжектвані носії будуть створювати об'ємний заряд, що обмежує потік носіїв із контакту. Таким чином, СОПЗ контролюються об'ємними властивостями речовини.

Існує декілька методів одержання інжектувальних контактів до напівпровідникових матеріалів, необхідних для забезпечення СОПЗ (рис. 1.2). Ці методи можна класифікувати таким чином [1, 13–16]:

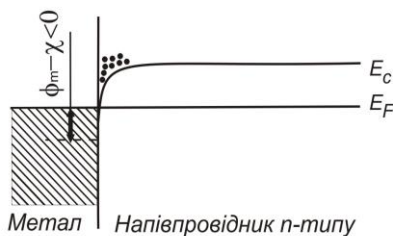
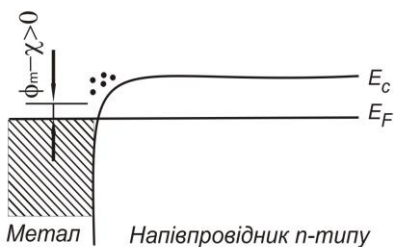
1. Інжекція електронів може здійснюватися за допомогою квантово-механічного тунельного переходу з метала у сильнолеговану  $n^+$ -область, а після цього за допомогою термічного збудження – з цієї області в зону провідності напівпровідника  $n$ -типу (рис. 1.2 а). Із рисунка можна побачити, що фактична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

2. Інжекція електронів з металу в зону провідності напівпровідника може відбуватися за допомогою термоелектронної, автоелектронної або термоавтоелектронної емісії. Необхідно зазначити, що у разі якщо метал контактує з іншою речовиною через достатньо тонке вістря, то поблизу його створюється інтенсивне електричне поле, яке зменшує ширину запірного бар'єра, сприяючи проникненню електронів через бар'єр за відносно малої прикладеної напруги.

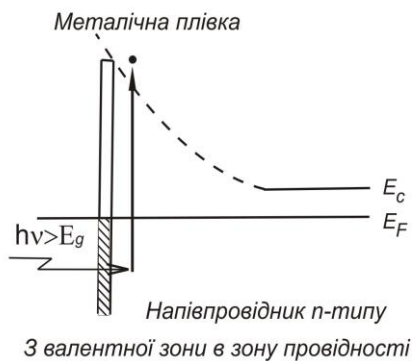
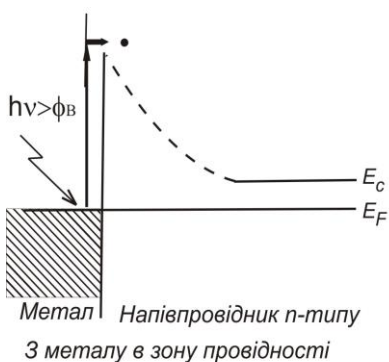
3. Інжекція електронів з металу у зону провідності напівпровідника може здійснюватися через омичний контакт (рис. 1.2 б). Він реалізується за умови  $\phi_m < \phi_s$  для матеріалів  $n$ -типу провідності або  $\phi_m > \phi_s$  – для матеріалів  $p$ -типу.



а)



б)



в)

Рисунок 1.2 – Схеми енергетичних рівнів для деяких контактів, що інжектують електрони: а) контакт вироджений  $n^+$  – неvirоджений  $n$  напівпровідник; б) омичний контакт; в) інжектувальний контакт із фотозбудженням

Тут  $\phi_m$ ,  $\phi_s$  – робота виходу електронів із металу та напівпровідника.

4. Інжекція електронів з металу у напівпровідник або з валентної зони напівпровідника в його зону провідності на межі розділу з металом може відбуватися внаслідок збудження матеріала світлом із 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 із 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 використовують в органічних напівпровідниках.

Варто відзначити, що приповерхневі стани на межі розділу між металом і напівпровідником можуть полегшувати інжекцію носіїв, а тонка плівка ізолятора між ними може змінювати швидкість інжекції основних і неосновних носіїв заряду завдяки наявності 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. У напівпровідникових матеріалах, як вже зазначалося, завжди наявні ЛС, що створюються недосконаlostями кристалів усіх типів. Ці пастки взаємодіють з носіями, інjektованими з контактів, і тим самим контролюють потік носіїв через багат шарову структуру, визначаючи вигляд ВАХ.

### 1.3. Вольт-амперна характеристика у випадку монополярної інжекції носіїв у напівпровідник

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

Під час вивчення властивостей широкозонних напівпровідників і діелектриків (напівізоляторів) широко використовують 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 досліджуваній матеріал (аналогічно емісії електронів у вакуум) із металевого контакту шляхом прикладання до зразка напруги зміщення ( $U$ ). Оскільки в реальних напівпровідниках і діелектриках завжди наявні ЛС, частина інжекттованих носіїв захоплюється пастками, утворює нерухомий об'ємний заряд із густиною  $\rho$  і в перенесенні струму через зразок участі не бере. Поле цього об'ємного заряду знижує швидкість емісії електронів із катода. Як наслідок 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 пас-

ток у ЗЗ матеріалу і видом ВАХ, автори [1, 17] використовували цілу низку припущень, викладених, наприклад, у [17, 19–21].

Звичайно вважається, що:

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

2. Розглядаються лише інжекттовані носії одного знака (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, у той самий час як захоплених носіїв – статистикою Фермі – Дірака.

5. Електричне поле настільки сильне, що складовою струму, зумовленою 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 переважальним у рівнянні неперервності струму стає дрейфовий член; друга умова буде виконуватися, якщо опір контакта набагато менший, ніж власний опір зразка.

6. Під час описування зарядоперенесення носіїв не враховують такі ефекти сильного електричного поля, як ефект Пула-Френкеля, Онзагера, ударну іонізацію речовини, а також залежність рухливості носіїв струму від напруженості поля.

7. Теоретична модель зарядоперенесення вважається одновимірною (рис. 1.3). Площина  $x = 0$  приймається за межу контакта, що інжектує носії (катод), а площина  $x = L$  збігається з межею напівпровідник-анод (де  $L$  – товщина зразка). Цим припускається, що напруженість електричного поля дорівнює нулю



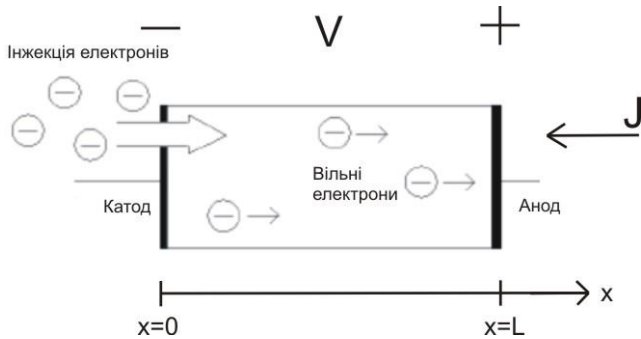


Рисунок 1.3 – Модель зразка при проходженні СОПЗ

( $E_e = 0$ ) 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 припускається, що інжектувальні контакти до зразка є плоскими, хоча у праці [17] розглянуті й інші випадки.

У загальному випадку ВАХ СОПЗ при інжекції електронів може бути одержана 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]:

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

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

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

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

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 проникність матеріалу;  $e$  – заряд електрона;  $n_{f0}$  – рівноважна концентрація вільних носіїв у зразку;  $n_f = n_f(x)$  – фактична концентрація вільних носіїв, що змінюється за товщиною зразка  $L$ ;  $n_{t_{j0}}$ ,  $n_{t_j}$  – 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 розподіли 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, зазвичай, приймають таким, що дорівнює одиниці.

Вираз  $\rho = e[(n_f - n_{f0}) + \sum_j (n_{t_j} - n_{t_{j0}})]$  описує величину густини об'ємного заряду, що відповідає за обмеження наскрізного струму через зразок. При розв'язанні системи рівнянь дифузійним струмом у співвідношенні (1.6), зазвичай, нехтують.

Система рівнянь (1.6) – (1.9) розв'язується за граничної умови  $E_e(0) = 0$ . Розв'язання цієї 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  $n_{fc}$ ,  $n_{fl}$  – 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'язане з тим, що внаслідок інжекції носіїв з катода розподіл носіїв у матеріалі стає неоднорідним. Концентрація носіїв, а відповідно, і провідність напівпровідника буде найбільшою поблизу катода, у той самий час як біля анода вона буде найменшою. У подальшому індекс  $a$ , який свідчить про те, що фізичні величини, які визначаються на аноді, будемо опускаєти.

### 1.3.1. Залежність струм – напруга за наявності у напівпровіднику моноенергетичних пасток

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

Одержимо ВАХ СОПЗ для простого випадку інжекції носіїв одного знака, наприклад, електронів, за 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 цього 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 за граничної умови  $x = 0$ ,  $E_e = 0$ , одержимо:

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

Повне падіння напруги на напівпровіднику дорівнюватиме:

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

Тоді залежність густини струму від напруги матиме вигляд

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

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

Під час виведення рівняння ми знехтували впливом термічно генерованих носіїв у напівпровіднику. За наявності таких носіїв і малих значеннях прикладеної напруги ВАХ може описува-

тися законом Ома, якщо густина термічно генерованих вільних носіїв  $n_{f0}$  перевищує концентрацію інжекттованих:

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

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

$$U_{\Omega} = \frac{8}{9} \frac{en_{f0}L^2}{\varepsilon\varepsilon_0}. \quad (1.18)$$

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, зазвичай, для розрахунку ВАХ використовують *наближення мілких та глибоких пасток*, або *метод регіональних наближень* [1]. У разі мілких пасток ( $E_t < E_F$ ) ВАХ СОПЗ може бути одержана таким чином.

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

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

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 залежно від прикладеної напруги не можна, хоча для окремих реальних випадків можливий числовий розв'язок спільно зі співвідношеннями (1.6). 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), одержимо

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

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  $\frac{\theta}{\theta+1} = \frac{n_f}{n_f+n_t} \ll 1$  – 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 зо-

ні провідності, оскільки збільшується енергія викиду електронів із пасток.

Одержані ВАХ СОПЗ (співвідношення (1.16), (1.22)) легко лінійаризуються при поданні їх у подвійному логарифмічному масштабі, а ступінь ВАХ у цих координатах легко обчислити, визначивши першу похідну  $\eta = \frac{d \ln j}{d \ln U}$ .

Рівняння (1.22) відрізняється від рівняння (1.16) лише числовим множником  $\theta$ , і оскільки  $\theta \ll 1$ , то і струм через зразок за наявності мілких пасток буде значно меншим, ніж у діелектрику без пасток. Наявність 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 лише у разі, якщо інжекттованих електронів не вистачає для помітного заповнення пасток.

Перехід від омічної провідності зразка до провідності, пов'язаної із СОПЗ, визначається умовою (1.17). Звідси перехідна напруга дорівнює

$$U_{\Omega} = \frac{8 e n_{f0} (\theta + 1) L^2}{9 \theta \varepsilon \varepsilon_0}. \quad (1.23)$$

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. Внаслідок цього пастки можуть стати глибокими ( $E_F > E_t$ ). Як результат, їх переважна частина заповнюється носіями. При граничному значенні напруги ( $U_{TFL}$ ) густина струму через зразок буде швидко збільшуватися від малої величини, що 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 у матеріалі і широко використовується до цього часу [18–20, 26–34].

У разі, якщо  $\theta$  не дуже мале, тобто  $N_t/n_{fo} > \frac{16}{9} \left( \frac{\theta+1}{\theta} \right)$ , одержуємо  $U_{TFL} > U_\Omega$ .

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 обчислити параметр Ламперта  $\theta$ . Відзначимо також, що цей параметр може бути визначений за напругою переходу від омічної ділянки струму до квадратичної (співвідношення (1.23)).

Якщо відомі значення концентрації пасток  $N_t$  і параметр  $\theta$ , глибину залягання пасток  $E_t$  розраховують 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 ( $\mu_n$ ,  $N_C$ ) та фактор спінового виродження ЛС ( $g$ ). У більшості праць припускається, що  $g = 1$ , хоча, як показано в [9], залежно від виду центра та його заповнення носіями  $g$  може набувати значення  $\frac{1}{2}$ , 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 є прямою 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  $E_t$  лише 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 разі усі носії, інжектвані 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 є переходом від омичної провідності до безпасткових СОПЗ, оскільки всі ЛС уже заповнені ( $U_{TFL} = U_\Omega$ ).

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

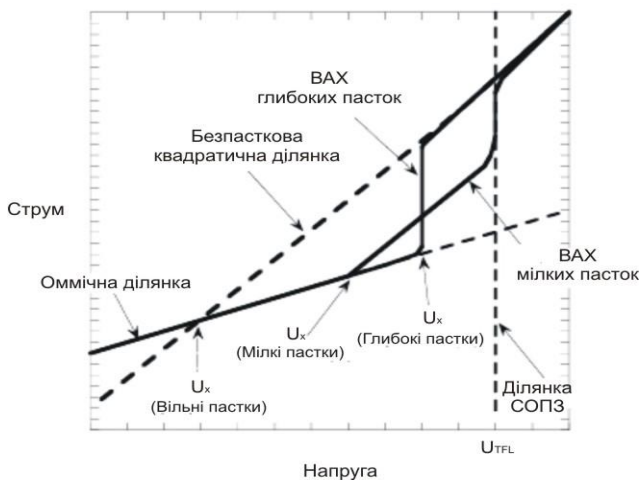


Рисунок 1.4 – ВАН СОПЗ у подвійних логарифмічних координатах за присутності у напівізоляторі моноенергетичних пасток

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.

Необхідно зазначити, що задача розрахунку ВАН СОПЗ навіть у випадку моноенергетичного рівня різко ускладнюється при спробі врахувати дифузійні струми [1], залежність рухливості носіїв заряду від напруженості поля [36], неоднорідність провідності за товщиною зразка [17] або наявності у зразках поряд із пастками донорних або акцепторних центрів [37].

### **1.3.2. Особливості вольт-амперної характеристики у випадку неперервних розподілів пасток**

Експериментальні дослідження засвідчують, що дискретні пасткові рівні є характерними для чистих монокристалічних матеріалів. У матеріалах із високим ступенем структурної неупорядкованості, для яких характерна полікристалічна або аморфна структура, можна очікувати наявності у ЗЗ матеріалу ЛС, які розподілені за енергіями неперервно [17]. У працях [38, 39] показано, що такий квазінеперервний розподіл пасток за енергіями можна пов'язати із статистичною дисперсією поляризаційної енергії носіїв заряду, зумовленої флуктуаційними нерегулярностями кристалічної ґратки матеріалу. Він може бути описаний гауссівською функцією з різною півшириною.

З іншого боку, структурна неупорядкованість ґратки матеріалу приводить до того, що необхідно враховувати велику кількість різних груп ЛС. Унаслідок цього набір близько розміщених нормальних розподілів може сприйматися як більш складний розподіл пасткових рівнів, розподілених за енергіями. Це звичайно враховують, взявши до уваги те, що їх 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 експоненціально 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 самий 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, що сягають 70 %. У зв'язку з цим для розрахунку залежностей струм – напруга використовують асимптотичні рівняння, одержані в припущенні заповнення мілких чи глибоких пасток [17, 26, 41–53]. Відповідні аналітичні вирази для ВАХ СОПЗ наведені в табл. 1.1.

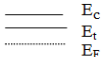
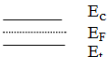
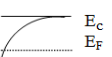
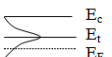
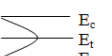
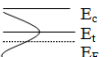
У разі експоненціального розподілу ЛС (див. табл. 1.1), що починається від краю зони провідності (чи валентної зони) або від деякого дискретного рівня  $E_{tc}$ , ВАХ при  $E_F > E_{tc}$  записується у вигляді [45]:

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

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

Під час аналізу експериментальних результатів у цьому разі 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  $T_c$  обчислюють 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 із нахилу одержаної прямої визначають  $E_{tc}$ , а екстраполюючи пряму до  $1/kT_c = 0$  – обчислюють значення  $N'_t$  [45].

Таблиця 1.1 – Вирази, що описують ВАХ СОПЗ у разі відсутності або наявності 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 (малі пастки)		$N_t \delta(E - E_t)$	2	$\frac{N_v}{N_t} \exp\left(-\frac{E_v}{E_t}\right)$	$\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \Theta U^2 / L^3$
Монорівень (глибокі пастки)		– “ –	$\rightarrow \infty$	$\rightarrow \frac{1}{N_t}$	$\rightarrow U_{плз}$
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		$\frac{N_t}{kT_c} \exp\left(\frac{E - E_t}{kT_c}\right) \cdot \left[1 + \exp\left(\frac{E - E_t}{kT_c}\right)\right]^{-2}$	$1 + \frac{T_c}{T}$	$\frac{N_v}{N_t^{\eta-1}} \exp\left(-\frac{E_t}{kT(\eta-1)}\right)$	$\frac{(\varepsilon \varepsilon_0)^{\eta-1} \mu_0}{e^{\eta-2}} \Theta \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta-1}{\eta}\right)^{\eta-1} \frac{U^\eta}{L^{2\eta-1}}$
Гауссівський розподіл (малі пастки)		$\frac{N_t}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{(E - E_t)^2}{2\sigma^2}\right)$	2	$\frac{N_v}{N_t} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) \exp\left(\frac{\sigma}{2k^2 T^2}\right)$	$\varepsilon \varepsilon_0 \mu_0 \Theta U^2 / L^3$
Гауссівський розподіл (глибокі пастки)		– “ –	$1 + \left(\frac{2\pi\sigma^2}{16k^2 T^2} + 1\right)^{1/2}$	$\frac{N_v}{N_t^{\eta-1}} \exp\left(-\frac{E_t}{kT(\eta-1)}\right)$	$\frac{(\varepsilon \varepsilon_0)^{\eta-1} \mu_0}{e^{\eta-2}} \Theta \left(\frac{2\eta-1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta-1}{\eta}\right)^{\eta-1} \frac{U^\eta}{L^{2\eta-1}}$

У разі гауссівського розподілу пасток (див. табл. 1.1) рівняння, що описує ВАХ [46–49], аналогічні співвідношенню, одержаному для випадку пасток з експоненціальним розподілом у середині ЗЗ матеріалу, за винятком того, що  $l$  замінено на вираз  $m = (1 + 2\pi\sigma^2 / 16k^2 T^2)^{1/2}$ . ВАХ СОПЗ для пасток з однорідним розподілом рівнів у вузькій зоні енергій між  $E_l$  і  $E_u$ , розміщеній усередині ЗЗ напівпровідника, була одержана в [40–43].

Співвідношення, що описують ВАХ СОПЗ у разі наявності в матеріалі пасток, що мають різний розподіл за енергією, 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 задачу про вигляд ВАХ розв'язують лише в граничних випадках мілких і глибоких пасток [1, 17]. Разом із 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 істотно відрізняється від об'ємного.

Правомірність наближення слабого і сильного заповнення для напівпровідника із неідеальним інжектвувальним контактом розглянута в працях [24, 53–60]. Автори розраховали відхилення максимального ступеня ВАХ від значень, що передбачаються аналітичною теорією, і встановили діапазон значень відношень  $n_{f0}/n_{fk}$  (де  $n_{fk}$  – приконтактна концентрація носіїв), за яких можливе застосування моделей слабого і сильного

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	$\frac{8 en_{f0}(\theta+1)L^2}{9 \varepsilon\varepsilon_0\theta}$	$\frac{eN_t L^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$ (мілкі); $\frac{e(N_t - n_{f0})L^2}{2\varepsilon\varepsilon_0}$ (глибокі)
Пастки з експоненціальним розподілом за енергією	$\frac{eL^2 N_t \left(\frac{n_{f0}}{N_v}\right) \left(\frac{l+1}{l}\right) \left(\frac{l+1}{2l+1}\right)^{(l+1)/l}}{\varepsilon\varepsilon_0}$	$\frac{eL^2}{\varepsilon_0} \left[ \frac{9 N_t^l}{8 N_v} \left(\frac{l+1}{l}\right)^l \left(\frac{l+1}{2l+1}\right)^{l+1} \right]^{1/(l-1)}$
Пастки з гауссівським розподілом за енергією	$\frac{eL^2 N_t \left(\frac{n_{f0}}{N_v}\right)^{1/\eta} \left(\frac{\eta+1}{\eta}\right) \left(\frac{\eta+1}{2\eta+1}\right)^{(\eta+1)/\eta}}{\varepsilon\varepsilon_0}$	$\frac{eL^2}{\varepsilon_0} \left[ \frac{9 N_t^\eta}{8 N_v} \left(\frac{\eta+1}{\eta}\right)^\eta \left(\frac{\eta+1}{2\eta+1}\right)^{\eta+1} \right]^{1/(\eta-1)}$
Пастки з однорідним розподілом за енергією	$\frac{eN_t kTL^2}{2\varepsilon_0}$	$\frac{eN_t (E_u - E_l)L^2}{2\varepsilon_0}$

заповнення пасток. Показано, що у разі 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 разі, 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 разі вигляд ВАХ істотно залежить від інжекційних властивостей контакту, а її ступінь завжди більший ніж два.

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 інжекційно-контактних явищ, придатні лише у вузькому діапазоні значень  $j$  і  $U$ . У працях [54, 55] безпосереднім розрахунком ступеня ВАХ продемонстровано, що ступенева апроксимація виду  $\rho \approx an^m$ ,  $m = const > -1$ , яка звичайно використовується при розрахунках залежностей струм – напруга, має точковий характер. Відповідно на експериментальних кривих  $j - U$  спостерігаються як довгі ділянки  $\eta(U) \sim const$ , 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 автори [24] запропонували апроксимацію, що 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 разі 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 із залежностями струм–напруга, розрахованими 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, одержані в [51]. Оскільки вирази (1.10) і (1.11) є безмодельними та можуть бути застосовані для будь-якого об'ємного механізму зарядоперенесення через зразок, авторам [24] на основі відповідного оброблення статичних ВАХ вдалося розробити цілий комплекс нових вимірювальних методик визначення фізичних параметрів інжекційних структур. При цьому, знаючи числові 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 разі високоінжекційної вимірювальної методики, вирази, одержані 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 підставі проведеного аналізу автори [24] запропонували

методику, що дозволяє ідентифікувати вузькі і широкі енергетичні розподіли в  $3Z$  напівпровідника, а також визначати параметри ЛС в обох випадках. Ефективність розробленого способу визначення параметрів таких станів із ВАХ (модель Зюганова) продемонстрована експериментально в [24] шляхом одночасного проведення досліджень із використанням трьох різних методів визначення параметрів пасткових центрів: високоінжекційного, низькоінжекційного і термостимульованої провідності.

Необхідно зазначити, що в працях [24, 53–60] фактично вперше зроблена спроба розв'язати обернену 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, хоч і найбільш загальних, дозволило вирішити цю задачу лише частково.

#### **1.3.4. Нові підходи до визначення параметрів глибоких пасток із вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом**

Оскільки форма і величина струму ВАХ залежать від концентрації та енергетичного положення ЛС, можна одержати інформацію про їх параметри з експериментально виміряних залежностей струму від напруги. У більшості праць, де використовувалася подібна методика [18–20, 26–34, 61–64], параметри пасток знаходили з порівняння експериментальних кривих із доступними аналітичними рівняннями, одержаними для типових розподілів. При цьому використовували так званий метод «підгонки», тобто у припущенні, що пастки описуються одним з типових розподілів за енергією, підбирали параметри ЛС таким чином, щоб теоретична крива якомога точніше збігалася з експериментальною.

Із використанням цього методу в працях [30–34] в ряді матеріалів розраховані параметри ЛС, у припущенні наявності у ЗЗ моноенергетичних пасток (модель Ламперта), у той час як у працях [1, 35, 61–64] розраховані параметри експоненціальних розподілів пасток (модель Роуза).

Спосіб оброблення експериментальних кривих, застосований у працях [1, 30–34, 61–64], є типовим прямим методом досліджень і має істотні недоліки, пов'язані з інтегральним характером співвідношень, які використовували 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, що ускладнює одержання достовірної інформації про енергетичний спектр пасткових рівнів методом ВАХ, є наявність 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 апіорно пов'язуються з механізмом СОПЗ [18–20, 26–29].

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

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

$$z'' = \frac{d^2z}{dy^2} = \frac{d}{d(1/j)} \frac{d(U/j^2)}{d(1/j)} = \frac{(n_f - n_0) + \sum_j (n_{i_j} - n_{i_{j_0}}) |eL^2}{\epsilon \epsilon_0}. \quad (1.31)$$

На підставі цих рівнянь автори [65–72] розвивають метод ІС глибоких пасток, що дозволяє одержувати інформацію про параметри ЛС безпосередньо з експериментальних ВАХ СОПЗ шляхом їх диференціального аналізу (обернена задача експерименту). Але цей метод залишається маловідомим і майже не використовується на практиці, очевидно, у зв'язку з тим, що потребує досить складного оброблення даних. У небагатьох експериментальних працях [65, 71], де застосовувався цей метод, як правило, використовували його низькотемпературне наближення та спрощені диференціальні співвідношення, що містять лише першу похідну, що дає істотні похибки при розрахунках параметрів пасток. У працях [72–74] подано самоузгоджений метод аналізу ВАХ СОПЗ, що дозволяє зробити деталізацію енергетичної топології рівнів у 3З напівпровідника без залучення додаткових експериментальних методик. Але метод [72–74] апробований лише для високомолекулярних сполук (полімерів) із шириною 3З  $E_g > 3$  еВ, для яких характерні розмиті за енергією розподіли пасток. Нарешті, у працях [24, 57, 59, 60] запропонований спосіб однозначної ідентифікації механізму зарядоперенесення через досліджуваний зразок за однією експериментальною ВАХ. Праці [24, 51, 57, 59, 60, 65–74] дозволяють розробити принципово новий підхід до визначення параметрів глибоких пасток із ВАХ СОПЗ, який ми розвинули у цій монографії.

## РОЗДІЛ 2

### ВОЛЬТ-АМПЕРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СТРУМІВ, ОБМЕЖЕНИХ ПРОСТОРОВИМ ЗАРЯДОМ У ВИПАДКУ СКЛАДНИХ РОЗПОДІЛІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ ЗА ЕНЕРГІЄЮ (ПРЯМА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ)

#### **2.1. Аналіз придатності аналітичних виразів для коректних розрахунків вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом**

Для перевірки коректності результатів, одержаних при розв'язанні оберненої задачі експерименту, яка є математично досить складною, ми розв'язували пряму задачу: за заданими модельними розподілами ЛС у ЗЗ матеріалу розраховували теоретичні ВАХ СОПЗ. При цьому використовували процедуру, докладно описану пізніше. При розрахунках вважалося, що зразки, в які здійснюється інжекція носіїв заряду, мають плоскопаралельну форму, крім того, задовольняються звичайні фізичні припущення теорії СОПЗ [17]. За модельні нами взяті розподіли пасток, що традиційно використовуються в літературі та відображають ситуації, які спостерігаються у реальних зразках [1, 17]. Ми, зокрема, розглядали випадки, коли у ЗЗ матеріалу наявні 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 разі проводили від краю валентної зони. Необхідно зазначити, що всі наведені 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 ми в основному використовували 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 напівізолювальних матеріалів.

Як зазначалося раніше, точні аналітичні вирази для ВАХ СОПЗ можна одержати лише у разі моноенергетичних пасток. Тому ми використали цей розподіл для перевірки можливості застосування інтегральних співвідношень (1.10), (1.11) для точного розрахунку залежностей струм – напруга. З цією метою для різноманітних параметрів пасток ми будували ВАХ як із використанням точного параметричного методу [50], так і шляхом чисельного інтегрування співвідношень (1.10) і (1.11).

У разі наявності в напівпровідниковому матеріалі моноенергетичних пасток густина об'ємного заряду може бути подана у вигляді

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

$$\text{де } n_1 = N_V \exp\left(-\frac{\Delta E_{t1}}{kT}\right).$$

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) набере 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 разі наявності у ЗЗ матеріалу одного або декількох монорівнів. Параметром при цьому є верхня межа інтегрування (концентрація носіїв на аноді), водночас концентрацію носіїв на катоді брали такою, що дорівнює нескінченності (випадок необмеженої інжекції з контакту). При чисельному інтегруванні співвідношень (1.10), (1.11) як змінну у зразку замість  $n_f$  використовували енергію квазірівня Фермі  $E_F$  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 за відсутності інжекції.

Результати порівняння ВАХ СОПЗ, розрахованих із використанням двох різних методів, наведені на рис. 2.1. Із рисунка бачимо, що у разі наявності у ЗЗ матеріалу моноенергетичних рівнів залежності струм – напруга, одержані з використанням

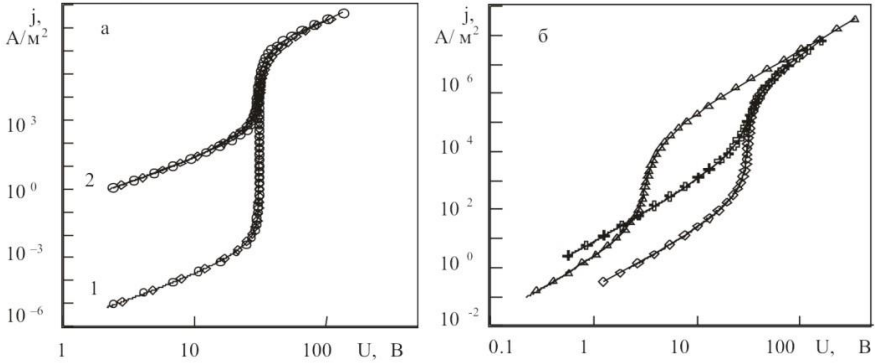


Рисунок 2.1 – ВАХ СОПЗ, розраховані за різних температур із використанням параметричного методу, інтегральних співвідношень (1.10) (1.11) та співвідношень (3.24), (3.25). Випадок моноенергетичних пасток із параметрами:  $\square - E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ;  $\Delta - E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ;  $+ - E_t = -0,47$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  (співвідношення (1.10) (1.11)); суцільна лінія – параметричний метод;  $\circ$  – запропонована методика (1.30), (1.31).  
Температура, К: 200 (1), 300 (2) (а); 300 (б)

параметричного методу та інтегральних співвідношень (1.10), (1.11), збігаються. Це дало можливість зробити висновок, що ці співвідношення можуть також ефективно застосовуватися для точного розрахунку ВАХ у разі більш складних розподілів пасток, наприклад експоненціального або гауссівського. При розрахунку ВАХ СОПЗ для таких розподілів ЛС густину об'ємного заряду записували 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, одержані за допомогою інтегральних рівнянь (1.10), (1.11), надалі ми використовували як еталонні при подальшому порівнянні з ВАХ, розрахованими за допомогою інших методів.

Добре відомо, що у разі 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, одержані в припущенні заповнення мілких або глибоких пасток [17, 41–50]. Відповідні аналітичні вирази наведені у таблиці 1.1.

На рисунку 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 лише у граничних випадках мілких або глибоких пасток, для побудови повної кривої проводили «зшивання» декількох розрахункових залежностей струм – напруга. З рисунка 2.2 добре бачимо, що за низьких температур вимірювання ( $T = 100$  К) криві, одержані цими двома методами, мають значну відмінність лише в області найбільшої крутизни ВАХ (на ділянці переходу від граничного заповнення пасток до безпасткового закону), в той самий час за кімнатної температури ( $T = 300$  К) відмінність кривих дуже значна практично на всьому інтервалі зміни прикладеної до зразка напруги. ВАХ, одержані з використанням аналітичних рівнянь, краще збігаються з еталонними у випадку вузьких розподілів пасток, при збільшенні півширини розподілу  $\sigma$  похибки розрахунків зростають.

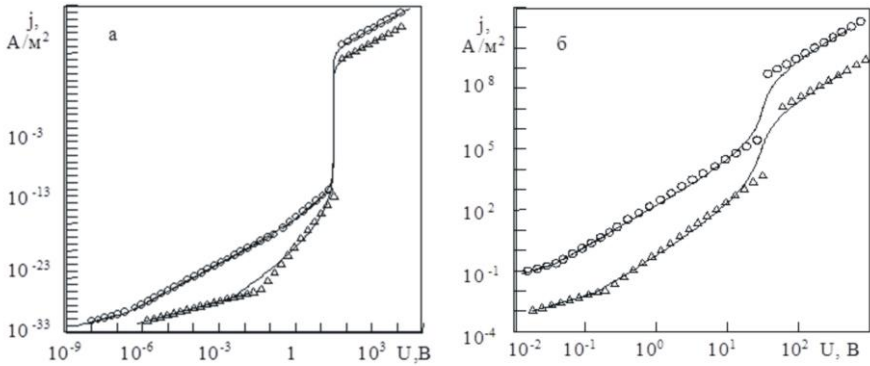


Рисунок 2.2 – ВАХ СОПЗ розраховані для гауссівського розподілу пасток ( $h(E) = N_t / [\sigma(2\pi)^{1/2}] \exp[-(E - E_t)^2 / 2\sigma^2]$ ) з параметрами  $E_t = -0,50$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  о –  $\sigma = 0,025$  еВ,  $j \cdot 100$  – аналітичне наближення;  $\Delta$  –  $\sigma = 0,05$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

Розглянемо причину такої великої похибки розрахунку ВАХ із використанням наближених аналітичних співвідношень, наведених у [73].

Як бачимо із таблиці 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 вигляд 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  $h(E)$ .

Визначимо, наскільки правильні 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  $\theta = \frac{n_f}{n_s} = \frac{n_f}{n_f + n_i}$ , а відповідні концентрації вільних

і захоплених носіїв заряду описуються співвідношеннями

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

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

можна остаточно записати

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

Цей 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 у зразках при інжекції обговорений у праці [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 разі 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 разі 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

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

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

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

Рівняння (2.10) показує, що під час зміни положення квазірівня Фермі напруга у зразку зростає експоненціально. Вираз (2.9) є базовим рівнянням методу ІС, розглянутому нижче, (обернена задача експерименту), оскільки демонструє, що за зростання напруги, прикладеної до зразка, відбувається зсув квазірівня Фермі у ЗЗ матеріалу, а це, у свою чергу, дозволяє здійснювати сканування розподілів пасток.

За достатньо високої зовнішньої напруги, прикладеної 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 ін-

теграл у (2.6) можна розрахувати лише для окремих випадків розподілів ЛС за низьких температур, універсального загального розв'язку у цьому разі не існує. У зв'язку з цим в асимптотичних рівняннях, одержаних у [40–49], дійсні значення  $\theta$  і  $\eta$  замінювалися певними усередненими значеннями  $\theta_{сер}$  і  $\eta_{сер}$  відповідно.

Реально, як бачимо з рис. 2.3, де наведені розрахунки цих величин із використанням співвідношень (1.10), (1.11), параметр  $\theta$  не є константою і його значення за низької температури ( $T = 150$  К) у разі гауссівського розподілу змінюється від  $10^{-23}$

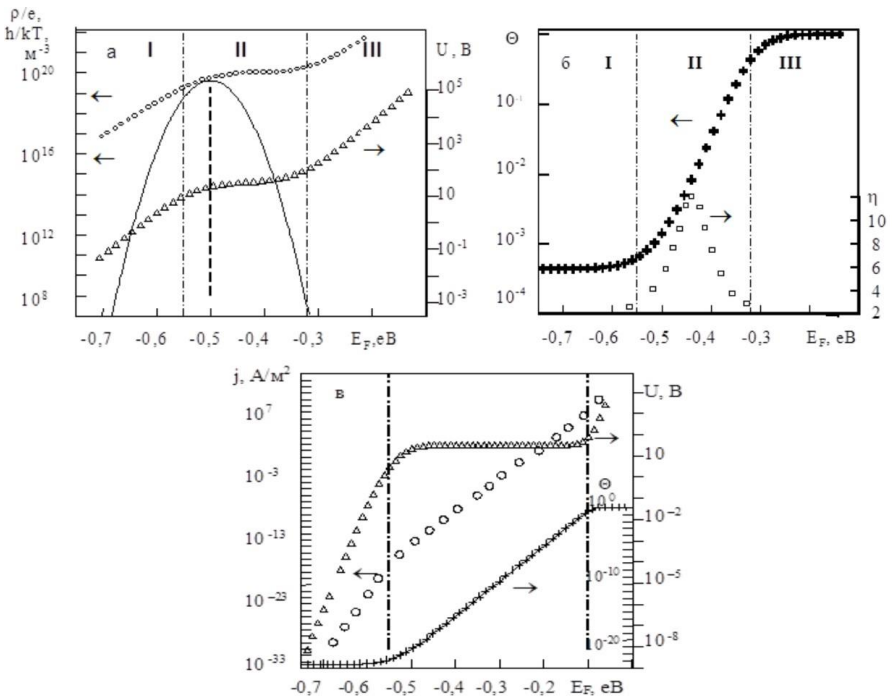


Рисунок 2.3 – Залежність  $\rho/e$ ,  $U$ ,  $j$ ,  $\theta$ ,  $\eta$  від положення квазірівня Фермі  $E_F$  для гауссівського розподілу пасток із параметрами:  $E_t = -0,5$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $T = 300$  К (а, б);  $T = 150$  К (в). Суцільна лінія – вхідний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

до  $10^{-1}$ , у той самий час як за кімнатних температур ( $T = 300$  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 цього виду розподілу пасток дорівнює  $\sim 2,17$ , у той самий 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 вигляду  $j \sim U^m$ , що 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.

За деякої напруги квазірівень Фермі зміщується достатньо високо у ЗЗ матеріалу так, що всі ЛС стають розміщеними нижче від нього (глибокі пастки). Із співвідношення (2.6) випливає, що практично всі глибокі центри при цьому заповнені носіями ( $\theta \sim 1$ ) і зразок поводить як безпастковий діелектрик. Відповідно рівняння (2.8) – (2.10) на цій ділянці набирають вигляду

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

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

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

Отже, напруга  $U$  у цьому разі 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  $\rho$ ,  $\eta$ ,  $\theta$ ,  $U$  залежно від положення квазірівня Фермі у матеріалі для випадку гауссівського розподілу пасток наведені на рис. 2.3. Проаналізуємо їх більш детально.

Як бачимо з рисунка, на залежностях  $\theta$ ,  $j$ ,  $U - E_F$  можна виділити три характерні області. В області 1, де  $E_F < E_t - \sigma^2/kT$  (квазірівень Фермі розміщений нижче від розподілу пасток), напруга залежить від  $E_F$  експоненціально, а параметр  $\theta$  залишається практично незмінним. У цьому разі 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 за зміни  $E_F$ , у той самий час як напруга не залежить від  $E_F$  і дорівнює  $U_{FTL}$ . У результаті вигляд залежності  $j \sim E_F$  визначається в основному характером зміни параметра  $\theta$ . Як показали розрахунки, чим нижча температура вимірювань, тим більший кут нахилу прямої  $\ln \theta - E_F$  на цій 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 за умови  $E_F \sim E_t$  і розрахункові криві мають максимальну похибку поблизу  $U = U_{FTL}$ .

В області 3 –  $E_F > E_U$  (рівень Фермі розміщений вище від 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 істотно знижується.

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

Інтегральні рівняння (1.10) – (1.11), що використовують 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, що при цьому заданий у вигляді таблиці. У цьому разі співвідношення (1.10) – (1.11) для побудови залежностей струм – напруга використані бути не можуть. Аналогічна ситуація виникає також тоді, якщо розподіл пасток описаний частково.

Для цих випадків ми використовували метод наближеного розрахунку ВАХ, заснований на ряді ідей, запропонованих у [79]. Метод ґрунтується на співвідношеннях, одержаних уперше Мюллером [82]:

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

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

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 інжекттованих 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

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

звідси

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

Відповідно для коефіцієнта  $\alpha$  одержимо:

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

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

звідси знаходимо, що

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

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

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

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

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 одержимо:

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

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

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

Оскільки  $\alpha$  і  $\beta$  змінюються повільно за зміни  $E_F$ , у першому наближенні можна взяти  $1/\beta = 1 + y$ . Підставивши це значення в співвідношення (2.20), обчислимо  $\beta$ :

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

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) наберуть вигляду

$$U = \frac{n_s e L^2}{\epsilon \epsilon_0} \frac{(n_s + 2n_s' kT + n_s'' (kT)^2)^2}{(2n_s + 3n_s' kT + n_s'' (kT)^2)(n_s + n_s' kT)}, \quad (2.24)$$

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

Як бачимо зі 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 під час оброблення експериментальних ВАХ СОПЗ диференціальним методом, що буде розглянутий нами пізніше. Значення  $n_s''$  можна обчислити, використовуючи або методи чисельного диференціювання функцій, заданих у вигляді таблиці, або використовуючи процедуру побудови кубічного сплайна [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, одержані 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 лише в області найбільшої кривизни кривої досягає 10 %, навіть у разі монорівня, коли похибки розрахунків завжди максимальні. У випадку використання інших розподілів пасток похибка розрахунків кривих значно зменшувалася.

### 2.3. Вплив параметрів локалізованих станів та температури вимірювань на вигляд вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом

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 винятком 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 зазначалося під час обчислень використовувалися значення фізичних констант телуриду кадмію, що наведені в підрисункових написах. Далі з використанням рівнянь (1.10) – (1.11) були одержані теоретичні ВАХ для цих розподілів за різноманітних параметрів пасток ( $E_t$ ,  $N_t$ ,  $\sigma$ ) і температурі вимірювання.

Як бачимо 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 за фіксованої напруги істотно залежать від цих параметрів. Тип розподілу в основному визначає особливості ВАХ при переході від її омичної області до квадратичної ділянки. Так, наприклад, у разі наявності у ЗЗ матеріалу гауссівського розподілу за збільшення його півширини  $\sigma$  кут нахилу кривої на цій ділянці збільшується (рис. 2.4 б). Слабкий вплив на загальний вигляд ВАХ типу пасткового розподілу зумовлений тим фактом, що при моделюванні вибиралися в основному достатньо вузькі розподіли ЛС, характерні для моно- та полікристалічних

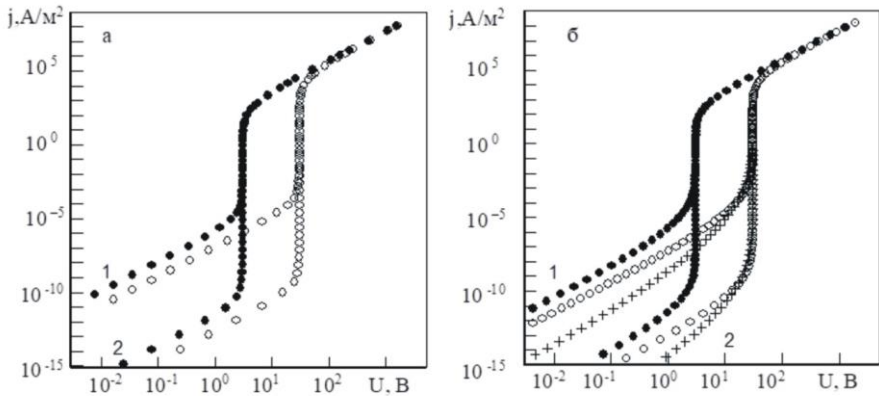


Рисунок 2.4 – ВАХ, розраховані для різних типів розподілу ЛС:  
 а – монорівень з глибиною залягання  $E_t = -0,40$  еВ (1) та  $E_t = -0,57$  еВ (2) (відлік енергії проводиться від краю валентної зони),  $T = 150$  К:  $\bullet - N_t = 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ;  $\circ - N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$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

матеріалів. Під час використання 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 рисунку 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 ( $E_{t1}, N_{t1}, E_{t2}, N_{t2}$ )

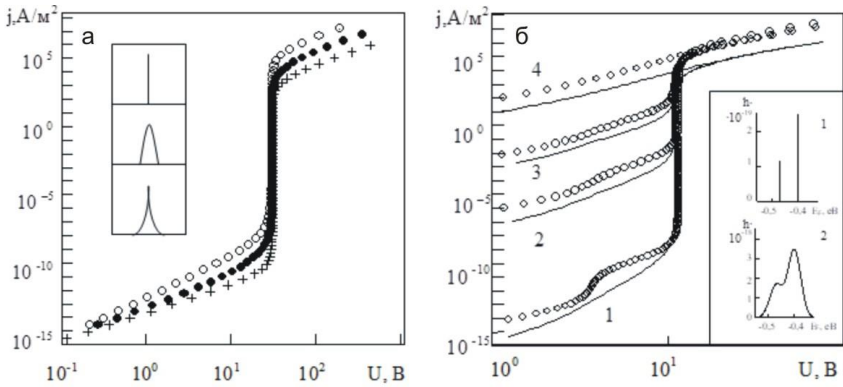


Рисунок 2.5 – ВАХ, розраховані для різних типів розподілу ЛС, наведених на вставці: а –  $T = 150$  К,  $E_l = -0,57$  еВ,  $N_l = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ :

+ – монорівень; • – гауссівський розподіл,  $\sigma = 0,025$  еВ,  $j \cdot 10$ ; о – подвійний експоненціальний розподіл, густина станів описується функцією  $h(E) = N_l [2kT_c] \exp[-|E-E_l|/kT_c]$ ,  $kT_c = 0,025$  еВ,  $j \cdot 100$ ;

б – о – два дискретних рівні з енергією залягання  $E_1 = -0,47$  еВ,  $E_2 = -0,4$  еВ та концентрацією  $N_{l1} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $N_{l2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ , відповідно  $j \cdot 10$ . Суцільна лінія – два гауссівських розподіли  $E_1 = -0,47$  еВ;  $E_2 = -0,4$  еВ,  $N_{l1} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $N_{l2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  еВ. Температура, К: 100 (1), 150 (2), 200 (3), 300 (4)

при моделюванні в першому і в другому випадках обрані однаковими.

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

Рисунок 2.5 наочно демонструє, що особливості ВАХ, зумовлені наявністю у ЗЗ матеріалу різних типів пасткових розподілів, добре помітні лише за низьких температур вимірювань

( $T = 100$  K). За підвищення цієї температури до кімнатної, а саме за таких умов проводиться більшість вимірювань, залежності струм – напруга для розглянутих випадків стають практично однаковими. Оскільки за традиційного підходу (пряма задача експерименту) під час оброблення ВАХ СОПЗ модель пасткового розподілу вибирається, зазвичай, апіорно, можливі принципові похибки.

Це неминуче призводить до істотних похибок за розрахунків таких параметрів глибоких центрів, як їх 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 ІНЖЕКЦІЙНОЇ СПЕКТРОСКОПІЇ (ОБЕРНЕНА ЗАДАЧА ЕКСПЕРИМЕНТУ)

### 3.1. Теоретичні основи методу інжекційної спектроскопії

Як вже зазначалося, інформацію про глибину залягання, концентрацію і характер розподілу пасткових рівнів за енергіями на цей час, зазвичай, 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 істотні недоліки, пов'язані із апріорним завданням моделі розподілу пасток та інтегральним характером співвідношень, що використовують для аналізу ВАХ. Все це призводить до істотного зниження інформативності методу та деякої некоректності одержаних за його допомогою результатів.

Принципово інший підхід запропонований авторами [70], де зроблена спроба одержати співвідношення, що дозволяють реконструювати профіль розподілу пасток безпосередньо з ВАХ СОПЗ на безмодельній основі (обернена задача експерименту). Однак у цій роботі були виведені робочі вирази у вигляді, що, як показали наші дослідження, є непридатними для оброблення реальних експериментальних кривих. У зв'язку з цим, використовуючи підхід, запропонований у [70], одержимо співвідношення, які можна застосовувати для розв'язання оберненої задачі під час оброблення 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 такий 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 визначається наступним співвідношенням

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

Оскільки ВАХ СОПЗ прийнято наводити у подвійних логарифмічних координатах, то рівняння (3.1), (3.2) зручно записати з використанням похідних  $\eta = \frac{d(\ln j)}{d(\ln U)}$ ,  $\eta' = \frac{d^2(\ln j)}{d(\ln U)^2}$ ,  $\eta'' = \frac{d^3(\ln j)}{d(\ln U)^3}$ .

Тоді одержимо такі співвідношення:

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

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

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

Із використанням обернених похідних 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 та Пуассона ми одержали 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. Ці рівняння, як показано нижче, дозволяють одержувати інформацію про розподіл пасток у 3З напівпровідника безпосередньо з експериментальних кривих на безмодельній основі.

Установимо, як із використанням виразів (3.3) і (3.4) або (3.5) і (3.6) може бути реконструйований розподіл пасток у 3З досліджуваного матеріалу. Для визначеності, як було зазначено 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 за кімнатної температури).

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

$$\rho = en_i = e(n_s - n_{s_0}) = e[(n_t + n_f) - (n_{t_0} + n_{f_0})], \quad (3.7)$$

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

Як було показано раніше, напруга, прикладена до зразка, і положення квазірівня Фермі пов'язані між собою співвідношенням (2.13). У результаті за зміни зовнішньої напруги та внаслідок інжекції носіїв заряду з електрода рівень Фермі починає рухатися поміж розподілених у 33 матеріалу ЛС у напрямку краю зони провідності. Таке зміщення  $E_F$  приводить до заповнення пасток носіями і, в кінцевому підсумку, зміні провідності структури. Оскільки напруга і густина струму пов'язані з концентрацією пасток і положенням квазірівня Фермі, виникає можливість сканування енергетичних розподілів ЛС. Ця залежність є фізичною основою методу ІС.

Збільшення концентрації зарядоносіїв  $dn_s$  у зразку за малої зміни положення рівня Фермі задається співвідношенням

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

Концентрація носіїв на глибоких станах може бути обчислена 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 підставлення (3.9) у співвідношення (3.8) одержимо робочий вираз, що 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, за довільних температур задача реконструкції розподілів ЛС зводиться до обчислення 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 з'ясуємо пізніше, перевагу варто надавати виразу (3.9). У загальному випадку розв'язання цієї задачі є досить складним і ми розглянемо його пізніше. Однак у разі низьких температур задача спрощується, оскільки тоді функцію Фермі–Дірака у (3.10) можна замінити на функцію Хевісайда, звідси, нехтуючи  $n_f$ , одержимо

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

Із цього 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 оброблення експериментальних кривих.

Оскільки відповідні співвідношення можна записати у такий спосіб:

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

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

вираз (3.10) набере вигляду

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

Із використанням похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$  легко записати це рівняння також у формі

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

Співвідношення (3.14) також може бути записано лише 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

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

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

Запишемо також цей вираз із 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 одержимо:

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

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

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

Із урахуванням цього одержимо у кінцевому підсумку:

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

Ці 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 одержимо

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

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 є ідентичними. Разом з цим, одночасне використання для оброблення ВАХ виразів, записаних у різному вигляді, дозволяє підвищити достовірність кінцевих результатів, тому що дає можливість деякою мірою компенсувати некоректність, зумовлену числовим диференціюванням експериментальних ВАХ.

Зі співвідношень (3.13), (3.18), так і (3.14), (3.18) або (3.17), (3.18) бачимо, 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 поточково, тому задача зводиться до побудови кривої, що апроксимує експериментальні дані, із наступним диференціюванням її у вузлах. Ця проблема вирішу-

валася нами шляхом побудови згладжувального кубічного сплайна [83–85]. Оскільки чисельне диференціювання є математично некоректною операцією, а похибка диференціювання збільшується за обчислення похідних високих порядків, з'ясовувалася можливість проведення цієї процедури з мінімальною похибкою. Для цього ми використовували методику комп'ютерного моделювання, що передбачала розв'язання спочатку прямої, а потім оберненої задачі експерименту. Розглянемо її більш детально.

Під час розв'язання прямої задачі ми за відомим розподілом пасток у ЗЗ матеріалу (вхідний розподіл) із використанням співвідношень (3.9) (3.10) розраховували 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, будували теоретичні ВАХ СОПЗ. Необхідно зазначити, що операції, що при цьому використовувалися, є математично коректними. Для розв'язання оберненої 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 одержаний розподіл глибоких центрів у ЗЗ матеріалу (вихідний розподіл). Критерієм коректності процедури оброблення ВАХ під час розв'язання оберненої задачі був збіг вхідного і вихідного розподілів ЛС. Результати розрахунків наведені на рис. 3.1.

Як бачимо з рисунка, за використання 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 самий час використання



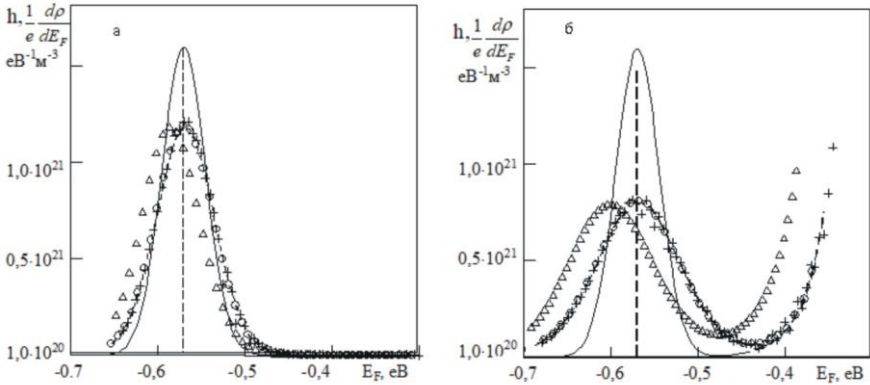


Рисунок 3.1 – Залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  для гауссівського розподілу

ЛС у 33 матеріалу з параметрами  $E_t = -0,57$  eB,  $N_t = 10^{20} \text{ M}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  eB, одержана у результаті оброблення ВАХ СОПЗ із використанням різних методів: суцільна лінія – вхідний розподіл  $h(E)$ ; о – із використанням похідних  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma''$ ; + – за допомогою похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$ ;  $\Delta$  – із використанням співвідношень (3.14), (3.18) за різних температур. Температура, К: 150 (а), 300 (б)

робочих виразів у вигляді (3.29) – (3.30), відомому з літератури [65], призводило до неприйнятної похибки реконструкції форми розподілів пасток. У разі використання співвідношень (3.14), (3.18) в області екстремумів функції  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  також спостерігався певний розкид даних. Подібний недолік однак відсутній, якщо для обчислень застосовувати формули у вигляді (3.17), (3.18).

З'ясуємо причини, що призводять до збільшення похибок результатів у разі використання похідних  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$ . Як відзначалося раніше, у випадку якщо  $U \approx U_{TFL}$ , за малої зміни напруги на ВАХ спостерігається різкий стрибок струму, і внаслідок цього

похідна  $d(\ln j)/d(\ln U)$  може зростати на декілька порядків. Очевидно, що процес чисельного диференціювання в околі цієї точки є нестійким, тому що за практично сталого  $U$  значення похідної змінювалося в інтервалі  $2 < \eta < A$ , при цьому величина  $A$  у разі вузьких розподілів пасток наближалася до нескінченності. У той самий час, оскільки функція  $U(j)$  не має областей 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 випадків монорівня і гауссівського розподілу пасток із глибиною залягання  $E_t = -0,57$  eV і напівшириною  $\sigma = 0,025$  eV.

Із рисунка 3.2 зрозуміло, що у разі диференціювання кривої  $U(j)$  похідна другого порядку практично на всьому інтервалі зміни напруги істотно менша від похідної першого порядку. Аналогічне співвідношення спостерігається і між похідними третього і другого порядків. Можна побачити, що в цьому випадку внесок у остаточний результат похідних високого порядку, що розраховуються з максимальною похибкою, мінімальний. Внаслідок цього загальна похибка розрахунків знижується. Принципово інша ситуація складається при диференціюванні кривої  $j(U)$ . Із рисунка 3.2 бачимо, що в цьому разі 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. Ця процедура дає більш коректні результати, якщо аргумент змінюється з рівномірним кроком, при цьому його значення у вузлах апроксимації повинні бути такими, що зростають

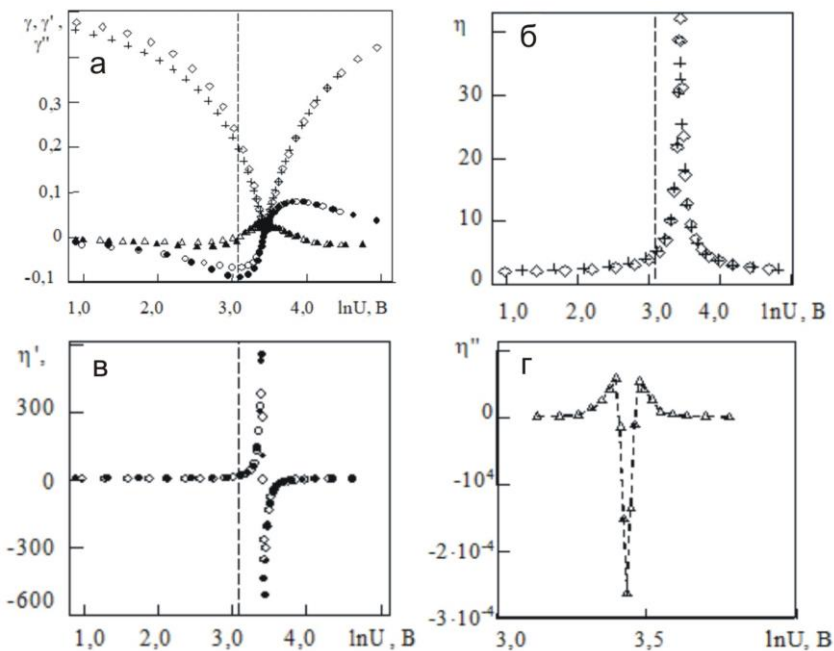


Рисунок 3.2 – Залежність похідних  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\gamma''$  (а) та  $\eta$ ,  $\eta'$ ,  $\eta''$  від  $\ln U$  (б, в, г) для монорівня з параметрами  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  та гауссівського розподілу з параметрами  $E_t = -0,57$  eВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  eВ,  $T = 300$  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

$(x_1 < \dots < x_i < \dots < x_n)$ . У випадку вузьких розподілів пасток за низьких температур для функції  $j(U)$  в області  $U \approx U_{TFL}$ , як показали розрахунки, ця умова виконується не завжди.

Необхідно відзначити, що оскільки для одержання інформації про спектр глибоких ЛС методом ІС потрібне достатньо складне математичне оброблення експериментальних ВАХ СОПЗ, що передбачає чисельне диференціювання, під час вимірювань експериментальних ВАХ повинні бути виконані певні вимоги.

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, за яких сітка вузлів даних у логарифмічному масштабі повинна бути близькою до рівномірної. Третя вимога стосується вибору кроку зміни струму і напруги під час вимірювань. Оскільки напівширина 33 багатьох напівпровідників не перевищує 1 еВ, то сканування енергетичної шкали доцільно проводити з точністю не більше ніж 0,005 еВ, що дозволяє досягти точності у визначенні  $E_t \sim 0,5 \%$  (не гірше точності приладів, що використовують під час вимірювань).

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 цього 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:

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

Із використанням рівняння (3.20), беручи  $dE_F \approx \Delta E_F$ ,  $d(\ln j) \approx \Delta j/j$ , розрахуємо крок зміни струму, що забезпечує визначення глибини залягання пасток із заданою точністю. Для зазначеного вище значення  $\Delta E_F \sim 0,005$  еВ за  $T = 300$  К цей крок становить  $d(\ln j) \approx \Delta j/j \approx 0,1$ .

У результаті аналізу даних комп'ютерного моделювання можна зробити висновки, що дозволяють знизити похибки реконструкції розподілів ЛС методом ІС за його практичного застосування:

- під час зняття експериментальних ВАХ доцільно будувати залежність  $U(j)$ , а не  $j(U)$ , як прийнято традиційно;
- під час математичного оброблення 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 для різних типів розподілів локалізованих станів

Для граничних випадків наявності у ЗЗ матеріалу монорівня або рівномірного розподілу пасток за енергією встановимо, яким чином за відомою залежністю  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  можуть бути визначені

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

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

де  $\delta$  – дельта-функція.

Після підставлення співвідношення (3.21) у вирази (3.9), (3.10) одержимо

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

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

де  $g$  – фактор спінового виродження ЛС, що, як вже відзначалося, звичайно береться таким, що дорівнює 1.

Значення цієї функції в максимумі ( $E_F = E_t$ ) за  $g = 1$  дорівнює

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

звідси

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

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

У разі, якщо у ЗЗ матеріалу наявні ЛС, розподілені за енергіями рівномірно,  $h(E) = AN_t = const$ , одержуємо, що

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

Тобто, концентрація пасток за наявності таких розподілів обчислюється 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 вигляду, їх концентрація визначається площею під кривою  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  і за низьких температур може бути розрахована зі 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 разі монорівня у точці, де квазірівень Фермі збігається з глибиною залягання пасток, із (3.22) одержуємо  $[n_t]_{E_{Fm}} = \frac{N_t}{2}$ .

Звідси

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

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

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

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, якщо  $E_t = E_F$ , із (3.26) можна обчислити співвідношення для розрахунку  $n_t$  і  $N_t$ , аналогічні одержаним 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 інжекційної спектроскопії**

Як було показано раніше, співвідношення (3.14), (3.17), (3.18) дозволяють реконструювати вид пасткових розподілів безпосередньо з ВАХ СОПЗ. Водночас під час їх виведення був зроблений ряд припущень, що 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 здебільшого залежності струм – напруження реальних зразків знімаються за температур, близьких до кім-



натної. При одержанні виразів (3.3), (3.4), (3.17) також вважалося, що омічним струмом через зразок можна знехтувати ( $n_{f0} \ll n_i$ ), фактор спінового виродження ЛС дорівнює одиниці ( $g = 1$ ), а умови знімання ВАХ є стаціонарними. Ці припущення можуть призводити до викривлення інформації, одержаної з ВАХ СОПЗ, зниження роздільної здатності методу, а також обмеження придатності методу ІС.

Цей розділ присвячений вивченню впливу ряду експериментальних факторів, зокрема температури вимірювання, фактора 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 ми використовували процедуру комп'ютерного моделювання, що передбачала розв'язання спочатку прямої, а потім оберненої задачі, описаної вище. За модельні використовували розподіли глибоких центрів, наведені на вставці рис. 2.5 а.

Результати порівняння вхідного і вихідного розподілів пасток для типових моделей ЛС, одержані за різних температур, наведені на рис. 3.3. На цих рисунках вхідні розподіли  $h(E)$  зображені суцільними лініями, у той самий час як розрахункові залежності  $\rho - E_F$  і  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  – штриховими і штрихпунктирними. Оскільки в реальних зразках фактор виродження ЛС може набувати значень  $g = 1/2, 1, 2$ , залежно від зарядового стану пасток розрахунки проводилися як для випадку  $g = 1$  (рис. 3.3 а, б), так і для  $g = 2$  (рис. 3.3 в). Із рисунка бачимо, що залежності  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  мають вигляд розмитих кривих із максимумами, форма яких у разі монорівнів не залежить від значень  $E_t$  і  $N_t$ .

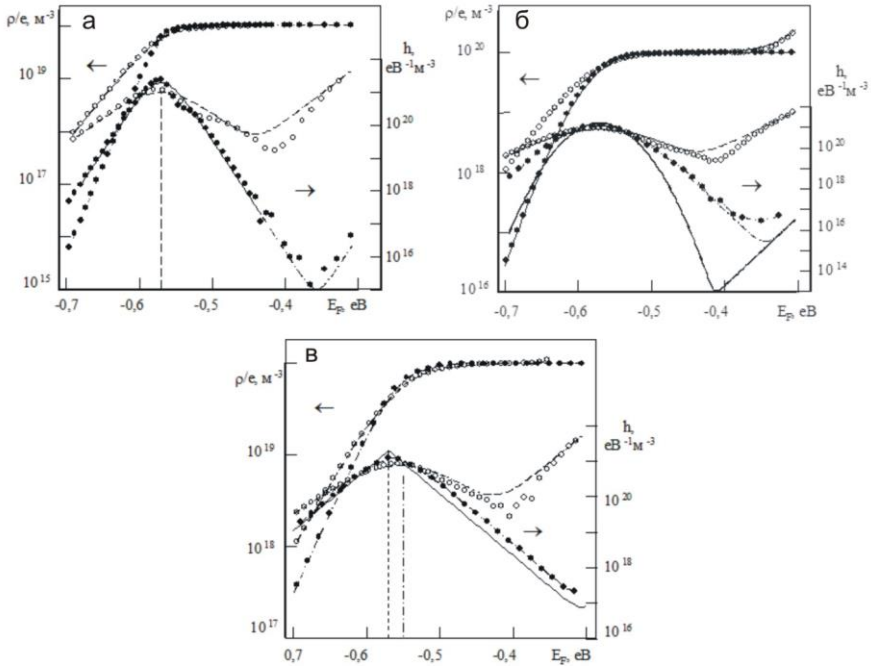


Рисунок 3.3 – Густина об’ємного заряду і розподіл ЛС у 3D матеріалі: суцільна лінія – вхідний розподіл; штрихпунктирна лінія – розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  ( $T = 100$  K); пунктирна лінія – розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  ( $T = 300$  K); ● – реконструйований розподіл ( $T = 150$  K); ○ – реконструйований розподіл ( $T = 300$  K); а – випадок монорівня,  $E_t = -0,57$  eV,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $g = 1$ ; б – випадок гауссівського розподілу  $E_t = -0,57$  eV,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  eV,  $g = 1$ ; в – випадок подвійного експоненціального розподілу  $E_t = -0,57$  eV,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $kT_c = 0,025$  eV,  $g = 2$

Водночас на залежностях  $\rho - E_F$  спостерігали вихід на насичення, якщо квазірівень Фермі перетинає максимум розподілу пасток. Кут нахилу залежності  $\rho - E_F$  на ділянці, де пастки є мілкими, залежить від температури і за її збільшення зменшується.

Як бачимо з рис. 3.3 а, за низьких температур 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, за збільшення температури вимірювання ВАХ їх півширина зростає. Розподіли, відмінні від моноенергетичного, диференціальним методом також 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 за збільшення температури зменшується, у той самий час як площа під кривою залишається незмінною.

Як ми встановили в результаті моделювання (рис. 3.3), використання співвідношень низькотемпературного наближення методу ІС призводить до викривлення форми реконструйованих розподілів пасток порівняно з формою вхідних, особливо за підвищених температур (близьких до кімнатної). При цьому якщо під час обчислень фактор виродження дорівнював одиниці, максимумами вхідного і вихідного розподілів пасток збігаються, однак якщо  $g = 2$  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 Хевісайда, тоді крива  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  безпосередньо дає розподіл ЛС (див. співвідношення (3.11)) за енергією. Реально за довільних температур зв'язок між  $h(E)$  і  $\frac{dn_s}{dE_F}$  задається виразом (3.10), звідси зрозуміло, що крива  $(\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F)$  дозволяє визначити функцію, що описує розподіл носіїв заряду, локалізованих на глибоких центрах. Ця функція за довільних температур вимірювання відрізняється від функції, що характеризує розподіл пасток у 33 напівпровідника  $h(E)$ . Проаналізуємо відмінності.

Припустимо, що у 33 матеріалу розміщений моноенергетичний рівень пасток. Із 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 за підвищення температури вимірювання похибка реконструкції форми монорівня збільшується. Цей висновок підтверджується результатами комп'ютерного моделювання, наведеними на рис. 3.3 а.

У разі, якщо в 33 матеріалу наявні ЛС, розподілені за енергіями рівномірно, із співвідношення (3.25) випливає, що  $n_i(E) = h(E)$ . Таким чином бачимо, що подібні розподіли методом ІС відновляються точно. Похибка, що виникає при відтворенні довільного розподілу пасток, розміщена між цими двома грани-

чними 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  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ . Покажемо, що у разі монорівня похідна  $d\rho/dE_F$  у співвідношенні (3.6) має максимум за  $E_{F \max} = E_t + kT \ln g$ .

Отже, якщо параметр  $g$  для ЛС не відомий, диференціальний метод дозволяє визначити енергію залягання моноенергетичних рівнів із точністю  $\approx kT \ln(g)$  (у випадку матеріалів із двократно виродженою зоною провідності  $\approx kT \ln(4)$ ). Аналогічний висновок можна зробити для інших модельних розподілів пасток. Відзначимо, що похибка обчислення енергетичного положення рівня розглянутим методом залежить від температури вимірювання.

Якщо провести вимірювання залежностей струм – напруга за температур  $T_1$  та  $T_2$  і розрахувати відповідні залежності  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ , то виникає можливість визначення фактора спінового виродження  $g$ , а отже, більш точно зазначити його природу:

$$\ln g = \frac{E_{F2\max} - E_{F1\max}}{k(T_2 - T_1)}, \quad (3.28)$$

де  $E_{F1\max}$ ,  $E_{F2\max}$  – положення максимумів функції  $1/e \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$  за температур  $T_1$  та  $T_2$  відповідно.

Оскільки під час вимірювання ВАХ СОПЗ на реальних зразках сканування розподілу пасток за енергіями відбулося з де-

яким кроком  $\Delta E$ , важливо вибрати інтервал  $\Delta T = T_2 - T_1$  таким чином, щоб величина  $E_{F2max} - E_{F1max}$  була більшою, ніж  $\Delta E$ . Результати відповідних розрахунків наведені у таблиці 3.1. Тут наведені результати розрахунків для різних комбінацій типів розподілів та факторів спінового виродження за різних температур вимірювання. За результатами комп'ютерного моделювання можна зробити висновок, що різниця температур для коректного визначення  $g$  повинна становити приблизно 50 К.

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

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

Звідси обчислюємо концентрацію ЛС за відомим  $g$ :

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

Ми також досліджували вплив наявності власних носіїв заряду у зразку на вигляд функції  $h(E)$ . Оскільки власні носії обумовлюють наявність на залежності  $j-U$  омичного струму за низької напруги, прикладеної до напівпровідника, проводився розрахунок ВАХ із урахуванням цього струму та без його урахування. Потім одержані ВАХ оброблялися відповідно до процедури, описаної вище. Результати моделювання для гауссівського розподілу пасток показали, що у разі, якщо під час оброблення реальних ВАХ не віднімався омичний струм, на залежності  $h(E)$  виникав похибковий максимум в області енергії, що наближено відповідає положенню рівноважного рівня Фермі.

Таблиця 3.1 – Визначення параметрів знімання ВАХ для розрахунку коефіцієнта спінового виродження ЛС  $g$

Тип розподілу	$E_p$ , еВ	$N_p$ , $m^{-3}$	$\sigma$ , 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			

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

Як було показано в попередньому розділі, використання точних співвідношень диференціальної методики, що містять похідні високих порядків (ураховуючи третю), можливе лише для оброблення експериментальних ВАХ, одержаних 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 способів 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 під час обчислення похідних високих порядків, цей спосіб дозволяє використовувати метод ІС для реконструкції профілів розподілів пасток безпосередньо з експериментальних ВАХ СОПЗ із прийнятною точністю. У цьому розділі розглянуті спрощені диференціальні співвідношення методу, а також проведено оцінювання похибок визначення глибини залягання ЛС та їх концентрації, що виникають при використанні цих виразів. Оскільки найбільш прийнятні результати були одержані під час оброблення ВАХ СОПЗ із використанням диференціальних співвідношень у вигляді (3.17), (3.18), ми і застосовували їх для аналізу. При цьому використовували процедури моделювання, докладно описані вище.

Розрахунок проводили для традиційних моделей пасткових розподілів – монорівня і гауссівського. Результати реконструкції пасткових розподілів, одержані з використанням точних диференціальних співвідношень, а також спрощених виразів, у яких нехтують третьою похідною ( $\gamma'' = 0$ ) або другою і третьою



похідними ( $\gamma'' = \gamma' = 0$ ), подані на рис. 3.4, 3.5. У цих випадках робочі співвідношення методу мали такий вигляд:

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

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

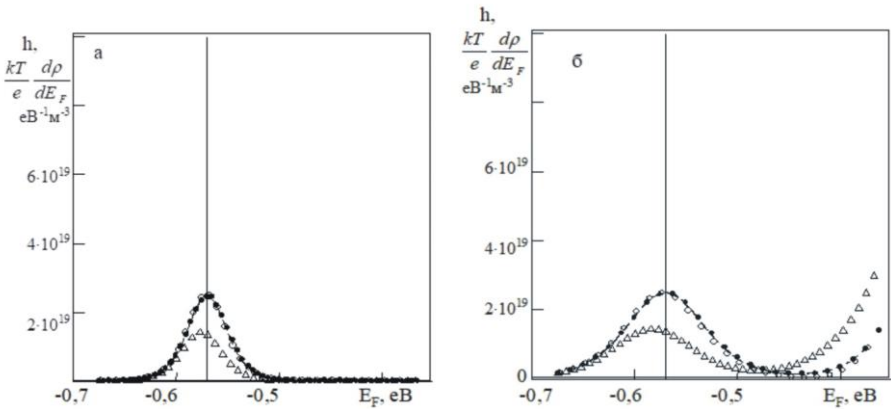


Рисунок 3.4 – Вплив спрощень розрахункових виразів на реконструкцію розподілу пасток для випадку монорівня з параметрами  $E_t = -0,57$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$  залежно від температури  $T = 150 \text{ К}$  (а),  $T = 300 \text{ К}$  (б); • – точні співвідношення; о –  $\gamma' = 0$ ;  $\Delta$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

пунктирна лінія

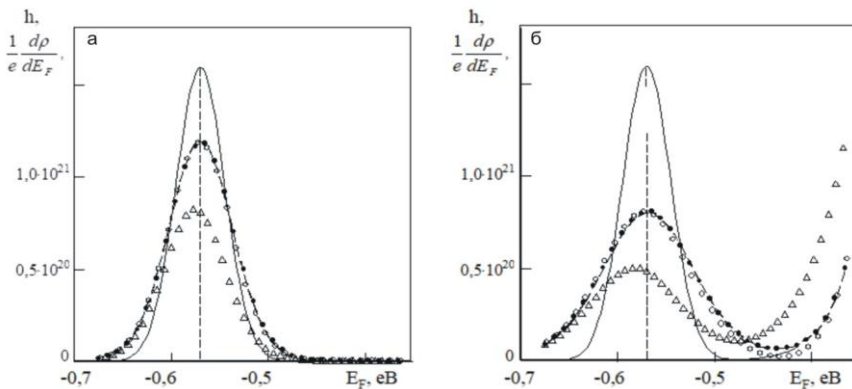


Рисунок 3.5 – Вплив спрощень розрахункових виразів на реконструкцію розподілу пасток для випадку ЛС, що описуються функцією Гаусса з параметрами  $E_t = -0,57$  eB,  $N_t = 10^{20}$  м<sup>-3</sup>,  $\sigma = 0,025$  eB, залежно від температури  $T = 150$  К (а),  $T = 300$  К (б): ● – точні співвідношення;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

Під час моделювання використовували також наближення, в якому бралися коефіцієнти  $(2 - \gamma) = \alpha$  і  $[\gamma + (2 - \gamma)(1 - \gamma)] = \alpha\beta$  у співвідношеннях (3.17), (3.18), що є константами [65]. Ми показали, що значення цих коефіцієнтів розміщені в інтервалах  $1 \leq \alpha \leq 2$ ,  $0 \leq \alpha\beta \leq 2$ , де нижня межа  $\alpha = 1$ ,  $\alpha\beta = 0$  відповідає омичній провідності, а верхня  $\alpha \rightarrow 2$ ,  $\alpha\beta \rightarrow 2$  – граничному заповненню пасток. У разі безпасткового напівпровідника або напівпровідника, що містить лише мілкі ЛС, ці коефіцієнти дорівнюють  $\alpha = 3/2$ ,  $\alpha\beta = 3/4$ . Беручи до уваги, 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 запишемо співвідношення

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

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

Із співвідношення (3.29) можна також помітити, що залежність  $h(E)$  може бути одержана шляхом множення функції  $\frac{1}{\eta-1}$  на параметр, що залежить від прикладеної до зразка напруги  $U$ . Розрахунок цієї функції для різних видів розподілів наведених на рис. 3.6. Відповідно стає зрозуміло, що функція  $\frac{1}{\eta-1}$  у ряді випадків (наприклад, у разі монорівня) може бути використана для визначення глибини залягання пасток, а також їх концентрації, як це зроблено в праці [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 разі нехтування третьою похідною  $\gamma^n$  у виразі (3.17) похибка у визначенні функції  $h(E)$  у точці  $E_F = E_t$  не перевищує 0,4 %. У той самий час в інтервалі  $|E_F - E_t| \approx kT$  ця похибка дещо зростає, але не перевищує 2–4 %.

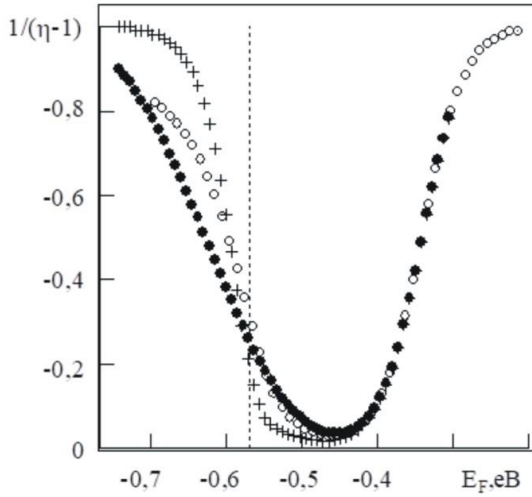


Рисунок 3.6 – Залежність  $1/(\eta - 1)$  від  $E_F$  для різних розподілів з параметрами:  $E_t = -0.57$ ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 300 \text{ К}$ ,  $\times$  – монорівень;  $\bullet$  – гауссівський розподіл;  $\circ$  – подвійний експоненціальний розподіл. Штрихова лінія визначає максимум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

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,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 300$  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 визначенні $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ , %		
$\gamma'' = 0$	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,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  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	1,880
$\alpha_2$	1,380	1,240	1,590
Вид спрощення	Похибка у визначенні $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ , %		
$\gamma'' = 0$	0,28	2,30	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,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,05$  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	1,330	1,610
Вид спрощення	Похибка у визначенні $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$ , %		
$\gamma'' = 0$	0,40	0,70	2
$\gamma' = 0, \gamma'' = 0$	32	26	39
$\alpha_1 = 2, \alpha_2 = 1$	10	6	28

Така низька похибка зумовлена тим фактором, що похідна  $\gamma'$ , як бачимо 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 можна визначити з вимірювань із достатньою точністю, це не позначається на диференціальному обробленні ВАХ на найбільш важливій її ділянці в області, де квазірівень Фермі збігається з глибиною залягання пасток. У разі нехтування у робочих виразах похідною другого порядку похибка у визначенні функції  $h(E)$  у найбільш вагомій області ( $E_F \approx E_t$ ) становить 30–40 %. В обох випадках спрощення не вносять похибку у точність визначення енергетичного положення рівня ЛС.

Ситуація принципово змінюється при використанні для оброблення ВАХ СОПЗ диференціальних співвідношень у вигляді (3.29), (3.30). Як бачимо 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  $E_t$ . Одержані значення глибини залягання ЛС будуть на  $kT$  глибше від істинних, а їх концентрація на 30–50 % менша. Варто зазначити, що навіть у цьому випадку похибка визначення параметрів глибоких рівнів порівнянна з тією, що утворюється під час використання методу ВАХ СОПЗ у його традиційній формі. Відзначимо 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 оброблення експериментальних ВАХ спрощених співвідношень методу ІС, у яких нехтують похідними високих порядків, приводить до похибок визначення параметрів пасток, що у цілому ряді випадків є прийнятними для оброблення кривих,



оскільки похибка визначення  $N_i$  навіть за кімнатної температури не перевищує 30–40 %.

Більшість стрілкових приладів, що досить часто використовують для вимірювання значень струмів і напруги, дозволяють проводити вимірювання з точністю 5 % (5-й клас приладів). Таким чином, використання спрощених співвідношень диференціальної методики, де нехтується третьою похідною, для оброблення таких даних є цілком прийнятним.

### **3.5. Самоузгоджений метод інжекційної спектроскопії**

Істотним 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 Холла. У разі високоомних зразків, для яких можна застосувати метод ВАХ СОПЗ, це зробити досить проблематично.

У той самий 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 цьому розділі розглянемо самоузгоджену модифікацію методу ІС, що у процесі реконструкції розподілів пасток не лише

не потребує будь-яких додаткових вимірювань, а й дозволяє визначити ряд важливих характеристик напівпровідникового матеріалу і конкретного зразка, зокрема рухливість носіїв  $\mu$ .

Незалежний метод визначення енергетичного масштабу під час дослідження ЛС може бути одержаний у такий спосіб [71]. Підставивши у рівняння (3.18) значення для  $E_F$  та  $E_{F_0}$ , обчислимо робоче співвідношення для енергії квазірівня Фермі у вигляді

$$\begin{aligned} E_F - E_{F_0} &= kT \ln \frac{j}{j_{od}^e} - kT \ln \frac{2\eta - 1}{\eta} = \\ &= kT \ln \frac{j}{j_{od}^e} - kT \ln(2 - \gamma), \end{aligned}$$

де  $j_{od}^e$  – величина струму, одержаного екстраполяцією омічного закону (за низької напруги) ВАХ до дійсної напруги, що прикладена до зразка.

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

Із урахуванням вищевикладеного, мікроскопічну рухливість носіїв заряду можна обчислити в результаті спільного розв'язання рівнянь (3.5) і (3.6). Тоді для довільної точки ВАХ СОПЗ одержимо

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

На омічній ділянці ВАХ ( $\eta = 1$ ) це рівняння набере вигляду

$$\mu_{no} = \frac{jL}{N_v U e} \exp\left(\frac{\Delta E_{F_0}}{kT}\right).$$

Із використанням співвідношень (3.3), (3.5), (3.14), (3.17) може бути також одержаний вираз, що дозволить 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 домінувального рівня, тобто рівня, що переважає в статистиці захоплення носіїв заряду пастками, розвиненої у праці [86]. Згідно з цією концепцією для будь-якого положення квазірівня Фермі існують ЛС (домінувальні стани) з енергією  $E_d^*$  (яка у загальному випадку відрізняється від  $E_F$ ), що переважають у статистиці захоплення носіїв заряду, тобто задають не лише положення рівня Фермі, але і концентрацію вільних і захоплених носіїв, але й фактор Ламперта  $\theta$ . Фактично запропонована концепція дозволяє звести задачу про переміщення квазірівня Фермі між розподілених у ЗЗ матеріалу ЛС до задачі, де розглядається моноенергетичний рівень пасток, положення якого збігається з енергією  $E_d^*$ , що змінюється при зміщенні квазірівня Фермі. Положення домінувального рівня за довільного рівня інжекції в зразок визначається співвідношенням

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

$$+ \frac{\gamma^3}{(1-\gamma)(2-\gamma)(1+B)} \frac{d^2 E_{a'}}{d(\ln U)^2}, \quad (3.31)$$

де  $\theta^* = \frac{dn_f / dE_F}{dn_s / dE_F}$ ,  $B = \frac{\gamma'}{(1-\gamma)(2-\gamma)}$  – 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 за різних температур. Тоді враховуючи, що  $\mu \neq f(T)$ , із співвідношення (3.31) можна обчислити положення домінувального рівня енергії  $E_d^*$  за довільної напруги, прикладеної до зразка.

Можливість використання концепції домінувального рівня для незалежного визначення енергетичного масштабу під час дослідження ЛС та розрахунків рухливості носіїв ми перевіряли шляхом комп'ютерного моделювання. Обчислення  $E_d^*$  проводили таким чином. Для вибраної модельної функції  $h(E)$  розраховувалися ВАХ СОПЗ за різних температур поблизу заданої  $T$ . Потім із використанням співвідношень (3.31), (3.32) визначали енергію активації  $E_a$ , а отже, і  $E_d^*$ . Для моделювання були вибрані розподіли пасток, що описуються функцією Гаусса з різною дисперсією  $\sigma$ . Результати розрахунків наведені на рис. 3.7. Глибина залягання пасток та їх концентрація наведені у написах під рисунками. Як бачимо з рис. 3.7, у разі розмитих розподілів пасток ( $\sigma \geq 0,1$  eV) положення домінувального 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 за зменшення температури вимірювання ВАХ і звужується – за її збільшення. Істотне зменшення інтервалу, в якому спостерігається збіг енергій  $E_F$  та  $E_d^*$ , відбувається також за зменшення півширини енергетичних розподілів пасток, що використовувалися під час моделювання. Встановлено, що у переважній більшості різниця між цими енергіями різко зростає, якщо 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.

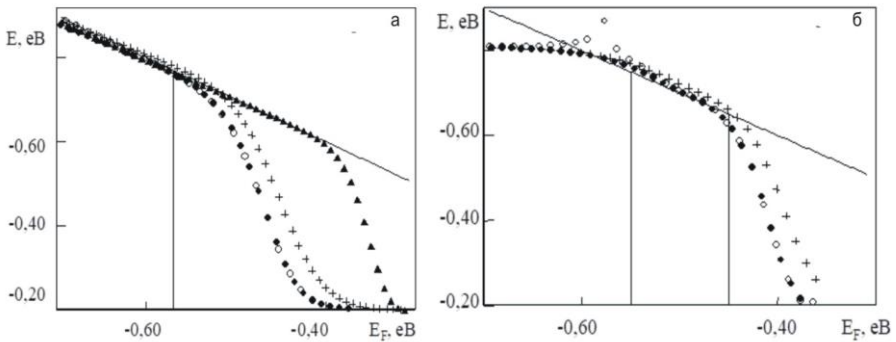


Рисунок 3.7 – Залежність положення енергії активації  $E_a$  (+) та домінувального рівня  $E_d^*$  (o –  $T = 300$  К;  $\sigma - T = 150$  К) від положення рівня Фермі  $E_F$  для різних розподілів ЛС,  $E'_F$  (o) – положення рівня Фермі, розраховане з використанням методу [73] ( $T = 300$  К): гауссівський розподіл із  $E_t = -0,57$  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)

Із наведених результатів стає зрозумілим, що концепція домінуючого рівня енергії дозволяє правильно визначати енергетичний масштаб лише в обмеженому інтервалі енергій. Зазвичай, на цьому інтервалі квазірівень Фермі розміщений усередині розподілу ЛС. У результаті енергетичне положення максимуму розподілу пасток у 33 матеріалу за допомогою цього методу визначається майже точно, у той самий час як реальний профіль відтворюється з викривленням. Відповідно це призводить до помилок 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 бачимо з рисунка, у разі вузьких розподілів пасток метод, запропонований у [72], призводить до значних помилок у визначенні енергетичного профілю ЛС, що робить його використання недоцільним.

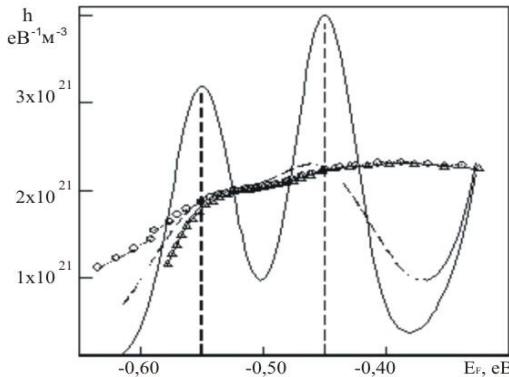


Рисунок 3.8 – Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку двох гаусівських розподілів із параметрами:  $E_{t1} = -0,55$  eВ,  $N_{t1} = 2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{t2} = -0,45$  eВ,  $N_{t2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025$  eВ,  $g = 2$ ,  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $T = 300$  К: вхідний розподіл – суцільна лінія; розрахована залежність  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  – пунктирна лінія; вихідний розподіл, розрахований із використанням  $E_d^*$  –  $\Delta$ ; вихідний розподіл, розрахований із використанням

[73]  $E'_F$  – o

Таким чином, результати розрахунків свідчать про обмеженість підходу, запропонованого в [72–74], особливо у разі вузьких розподілів пасток, характерних для моно та полікристалічних плівок, та високих температур вимірювання.

### **3.6. Високотемпературне наближення методу інжекційної спектроскопії**

Як було показано раніше, використання низькотемпературного наближення призводить до значних похибок при реконструкції форми розподілів пасток методом ІС уже за температури близької до кімнатної (рис. 3.3). У той самий час більшість досліджень параметрів пасток, як вже неодноразово зазначалося, проводили саме за кімнатних температур. У зв'язку з цим виникає необхідність розроблення модифікації методу ІС, що дозволяла б одержати невикривлені профілі розподілу ІС за енергією за будь-якої температури вимірювання ВАХ.

Для визначення енергетичного розподілу пасток ми використовували вирази (3.6), (3.9) та (3.18). За довільних температур 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 разі, якщо відома функція  $n_s$  чи  $dn_s/dE_F$ . Згортка (3.9) для розв'язання цієї задачі краща, оскільки, як встановлено раніше, внаслідок моделювання функція  $n_s$  виходить на насичення за енергій  $E_F \approx E_t$ , а також не містить похідну третього порядку. Для розглянутого випадку ця проблема у цей час не вирішена, хоча подібні задачі виникають, наприклад, під час розв'язання оберненої задачі еліпсометрії та деяких інших випадків [87].

Розглянемо, як можна визначити функцію енергетичного розподілу ІС, використовуючи дані, одержані в результаті застосування для оброблення експериментальних ВАХ СОПЗ дифе-

ренціальної методики. Об'єднуючи рівняння (3.9) і співвідношення (3.5), (3.6), одержимо

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

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

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

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

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 похибкам вихідних даних відповідають малі похибки розв'язання (умова стійкості розв'язку).

Функція  $\varphi(x)$  у нашому випадку задана із похибками, зумовленими таким:

- 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);

- похибками теорії, що 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 за його чисельного розв'язання, у результаті замість істинного розв'язку утворюється так звана знакозмінна «пилка».

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

- апіорі відомо, що розв'язок існує і належить деякій безлічі коректності  $M$ ;

- розв'язок є єдиним у класі функцій, що належать  $M$ ;

- нескінченно малим варіаціям  $\varphi$ , що не виходять за клас  $M$ , відповідають нескінченно малі варіації у.

У нашому випадку на розв'язок не можна накласти жорсткі обмеження, іншими словами, клас можливих розв'язків не є компактом. Такі задачі називають істотно некоректними. Підхід, що дає стійкі розв'язки істотно некоректних задач, розроблений

А. М. Тихоновим [88–90]. У його основу покладене поняття регуляризованого оператора. Використаємо цей підхід для розв’язання рівняння (3.33).

Припустимо, що  $\varphi(x) \in L_2$ ,  $y(x) \in W_2^1$ , і замість точного значення функції  $\varphi(x)$  відоме її наближення  $\bar{\varphi}(x)$  таке, що

$$\|\varphi(x) - \bar{\varphi}(x)\| < \delta,$$

де  $\delta$  – верхня оцінювання похибки правої частини рівняння. Уведемо згладжувальний функціонал

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

де стабілізувальний 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 випливає рівняння Тихонова [88]:

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

$$\text{де } R(t, s) = R(s, t) = \int_a^b K(x, t)K(x, s)dx,$$

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

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

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

Існує декілька способів вибирання параметра регуляризації  $\alpha$  [87, 89, 90]. Вони відрізняються кількістю й характером необхідної додаткової інформації. Одним із найбільш ефективних і детально досліджених є спосіб нев'язки [89]. Відзначимо, що як додаткову інформацію використовують значення верхньої оцінки похибки правої частини рівняння.

Спосіб нев'язки вибору  $\alpha$  полягає в тому, що за  $\alpha$  беруть таке  $\alpha = \alpha_d$ , за якого

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

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

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

$$\Psi(\alpha) = \left\| \alpha \frac{dy_\alpha}{d\alpha} \right\|_Y^2, \quad \text{де } v_\alpha = \alpha dy_\alpha / d\alpha \text{ розв'язок рівняння}$$

$$\alpha v_\alpha - Av_\alpha = Ay_\alpha - F \text{ [91].}$$

Для порівняння переваг і недоліків розглянутих методів вибір параметра регуляризації  $\alpha'$  під час розрахунків здійснювався як із 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 проводили нормування рівняння (3.33). Нормувальним множником обирали значення  $n_{sm}$ , що відповідало найменшій за модулем енергії квазірівня Фермі  $E_{Fm}$ , за якої функція  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F}$  набувала локального мінімуму.

Цю величину ми обчислювали за допомогою рівнянь (3.6), (3.17) і (3.18) таким чином:

- розраховували значення функції  $\frac{1}{e} \frac{d\rho}{dE_F} - E_F$ ;
- знаходили мінімуми цієї функції та визначали енергію квазірівня Фермі  $E_{Fm}$ ;
- обчислювали  $n_{sm}$  при  $E = E_{Fm}$ ;
- одержане значення  $n_{sm}$  використовували як нормувальний множник.

У результаті нормоване співвідношення (3.33) за допомогою чисельного алгоритму (див. додаток) зводили до системи лінійних алгебраїчних рівнянь із тридіагональною матрицею. Одержану систему розв'язували методом Халецького.

Перевіряли коректність запропонованого методу [92–94] реконструкції розподілів пасток із ВАХ СОПЗ за довільних температур шляхом зіставлення вхідних розподілів глибоких ЛС і розподілів, одержаних у результаті послідовного розв'язування прямої, а потім оберненої задачі (вихідний розподіл).

Оскільки для розрахунку теоретичних ВАХ СОПЗ на практиці найчастіше використовують наближені методи, визначали також похибки, що вносять під час вимірювання параметрів глибоких пасток. Для цього водночас із точним методом розрахунку залежностей струм – напруга використовували наближений метод. Цей метод, як з'ясували раніше, дає похибки під час обчис-

лення ВАХ, що не перевищують 5–10 % для різних розподілів пасток.

Результати зіставлення вхідних і вихідних розподілів пасток, одержаних із використанням високотемпературного наближення, наведені на рис. 3.9–3.11.

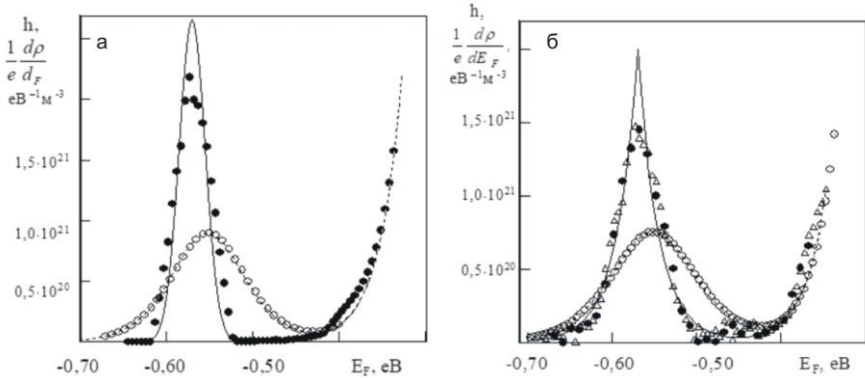


Рисунок 3.9 – Розподіл ЛС у ЗЗ матеріалу для випадку

$E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20}$  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:  $\sigma = 0,015$  еВ; б – подвійний експоненціальний розподіл з параметром  $kT_c = 0,025$  еВ. Вхідний розподіл  $h(E)$  – суцільна лінія; вихідний розподіл: о – розрахунок з використанням низькотемпературної методики; високотемпературне наближення методу ІС: ● – метод квазіоптимального значення  $\alpha$ ; Δ – метод нев’язки

Якщо використовувати точні співвідношення (1.10), (1.11) для розрахунку ВАХ СОПЗ, форма енергетичних розподілів ЛС запропонованим методом відтворюється майже точно навіть у випадку дуже вузьких розподілів, що описуються функцією Гаусса із  $\sigma = 0,015$  еВ. Похибка у визначенні концентрації пасток при цьому не перевищує 3–5 %, тоді як енергію залягання глибоких рівнів (положення максимумів функції  $h(E)$ ) можна визначити точно. У випадку більш розмитих розподілів похибка

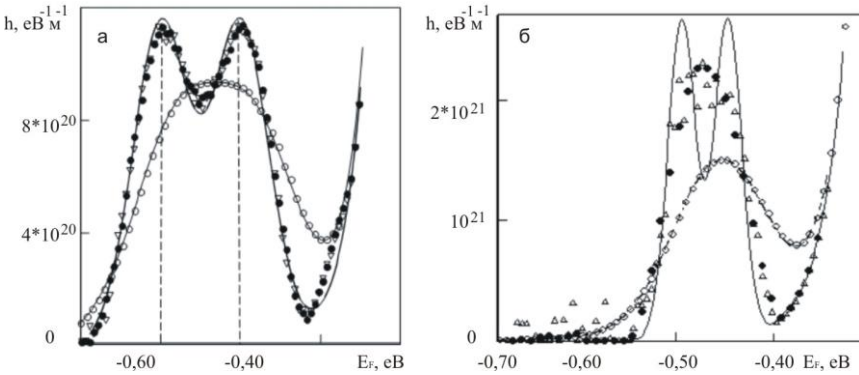


Рисунок 3.10 – Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку двох гаусівських розподілів із параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ К}$ : а –  $E_{i1} = -0,60 \text{ еВ}$ ,  $E_{i2} = -0,50 \text{ еВ}$ ,  $N_i = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ еВ}$ ; б –  $E_{i1} = -0,50 \text{ еВ}$ ,  $E_{i2} = -0,45 \text{ еВ}$ ,  $N_i = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,015 \text{ еВ}$ ; вхідний розподіл – суцільна лінія; о – вихідний розподіл, розрахований за низькотемпературною методикою; вихідний розподіл, розрахований за високотемпературною модифікацією методу ІС: ● – метод квазіоптимального значення параметра  $\alpha$ ,  $\Delta$  – метод нев’язки

відтворення їх форми значно зменшувалася (рис. 3.10) і не перевищувала 1–3 %.

Для порівняння зазначимо, що у разі використання низькотемпературного наближення моноенергетичні рівні відтворюються у вигляді дифузних кривих із півшириною  $\approx 3,5 kT$  ( $\sigma = 0,091 \text{ еВ}$  за кімнатної температури), у той час як інші розподіли реконструюються з розширенням  $\sim 2 kT$  (рис. 3.3). У разі подвійного експоненціального розподілу похибки реконструкції форми у точці  $E_F = E_i$  під час використання запропонованого методу обумовлені відсутністю першої похідної в точці злому кривої  $h(E)$  (рис. 3.2 б).

Результати розрахунків вхідних розподілів ЛС у разі, якщо параметр регуляризації  $\alpha'$  обчислювали з використанням принципу нев’язки й квазіоптимального значення параметра, відріз-

няються 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) під час розв'язання модельних задач. Ці похибки можна задавати лише апіорі під час оброблення реальних ВАХ СОПЗ.

Із рисунка 3.11 також бачимо, що під час оброблення ВАХ наближеними методами (використовували найбільш точний) також виникають похибки при реконструкції функції розподілу

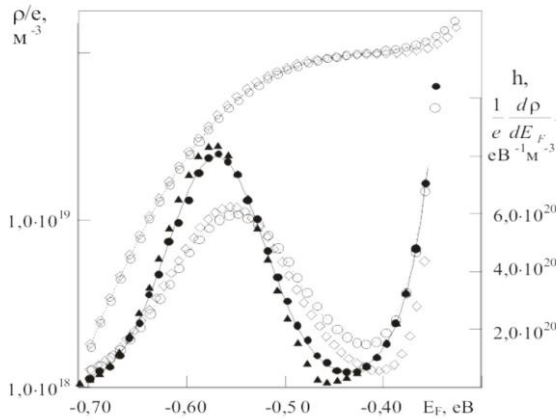


Рисунок 3.11. Густина об'ємного заряду та розподіл пасток у 33 матеріалу, що описуються функцією Гаусса з параметрами:  $E_t = -0,57$  еВ,  $N_t = 10^{20} \text{ м}^{-3}$ ,  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,05$  еВ,  $g = 2$ ,  $T = 300$  К: Вхідний розподіл  $h(E)$  – суцільна 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  $\frac{dn_s}{dE_f}$ , і функції розподілу пасток  $h(E)$ . Ці похибки значні й можуть сягати 15 % у випадку монорівня. Похибки зростають зі зменшенням глибини залягання ЛС у ЗЗ матеріалу. Таким чином, практика використання наближених методів розрахунків ВАХ закладає підґрунтя для одержання некоректних результатів під час визначення параметрів пасток.

Для визначення роздільної здатності високотемпературної модифікації методу ІС за енергіями проводили моделювання для випадку двох рівнів пасток, розміщених на різній глибині в ЗЗ матеріалу. Під час обчислень змінювали глибину залягання ЛС, енергетичну відстань між ними, а також концентрацію 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 й глибини залягання.

Установлено, що для рівнів близьких до дискретних похибка визначення  $E_t$  становить  $\sim (2 \div 3) kT$  і зменшується під час використання більш розмитих розподілів. Якщо монорівні або вузькі гауссові розподіли розміщені за енергіями ближче, вони реконструюються як один розподіл (рис. 3.10 б). Установлено, що роздільна здатність також збільшується, якщо концентрація пасток зростає.

Потрібно зазначити, що цим методом вдавалося виявити енергетичні рівні, що за використання низькотемпературного наближення, зазвичай, реконструюються як один (рис. 3.10 а, 3.12 б).

Ще одним чинником, що знижує роздільну здатність розробленого методу для мілких пасток, є вплив концентрації вільних носіїв, що завжди наявні в реальних зразках. Ця концентрація, крім того, залежить від рівня інжекції носіїв із контакту. На



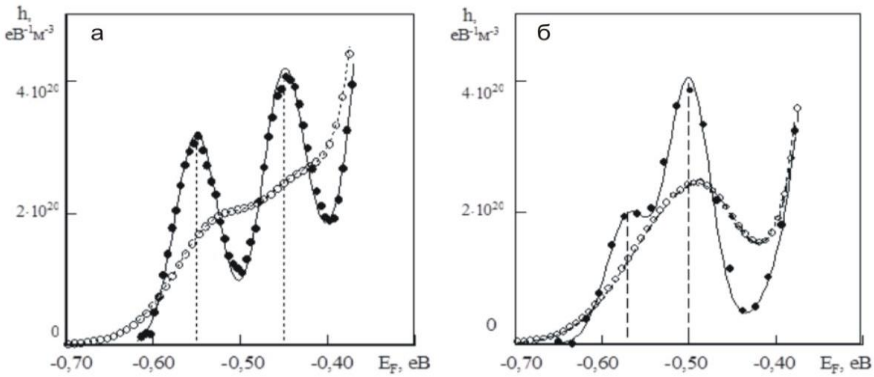


Рисунок 3.12 – Розподіл ЛС у З3 матеріалу для випадку двох гаусівських розподілів із параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ eV}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ К}$ : а –  $E_{I1} = -0,55 \text{ eV}$ ,  $N_{I1} = 2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{I2} = -0,45 \text{ eV}$ ,  $N_{I2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ; 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 параметра  $\alpha$

рисунок 3.13 наведені криві розподілу пасток, розраховані з урахуванням і без урахування концентрації вільних носіїв у матеріалі. Зрозуміло, що дозаповнення пасток вільними носіями передусім у випадку мілких ЛС може приводити 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 розрізняють. Нижню межу  $E_{min}$ , що лімітує застосування вищезгаданого методу, можна визначити із співвідношення:

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

де  $\theta$  – фактор Ламперта.

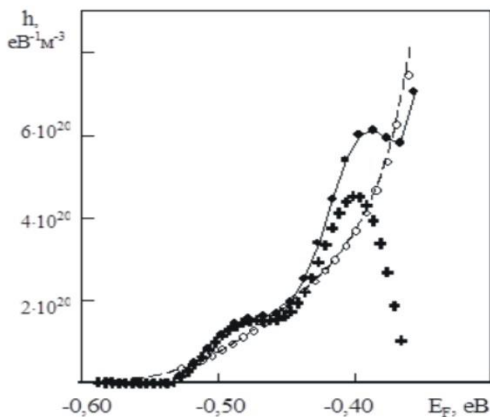


Рисунок 3.13 – Розподіл ЛС у 33 матеріалу для випадку двох гаусівських розподілів із параметрами:  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $\sigma = 0,025 \text{ eV}$ ,  $g = 2$ ,  $T = 300 \text{ K}$ :  $E_{l1} = -0,47 \text{ eV}$ ,  $N_{l1} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $E_{l2} = -0,40 \text{ eV}$ ,  $N_{l2} = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ . 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

Для параметрів пасток і фізичних констант матеріалу, використаних у дослідженнях, ця межа за кімнатної температури становить  $\sim 0,30 \div 0,40 \text{ eV}$  і зменшується під час зниження температури вимірювань і збільшення концентрації ЛС. Таким чином, розглянутий метод, як і традиційну методику ВАХ СОПЗ, можна застосовувати для вивчення достатньо глибоких пасток.

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

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

## РОЗДІЛ 4

### ІНЖЕКЦІЯ НОСІЇВ В УМОВАХ НЕОДНОРІДНОГО ПРОСТОРОВОГО РОЗПОДІЛУ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ

#### **4.1. Основні підходи до визначення параметрів локалізованих станів у напівпровідниках методом аналізу вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом**

Метод, що ґрунтується на аналізі ВАХ СОПЗ за різних температур і освітленості, на сьогодні широко використовують для одержання інформації про параметри ЛС у високоомних органічних і неорганічних напівпровідникових матеріалах [17, 30, 95–103]. На цей час існує два основних підходи для аналізу ВАХ.

Загально визнаний підхід базується на розв'язанні так званої прямої задачі експерименту. У цьому разі параметри ЛС з експериментальних ВАХ СОПЗ одержують шляхом їх порівнювання з теоретичними кривими, розрахованими з припущення, що в ЗЗ напівпровідника наявні деякі модельні розподіли пасток носіїв заряду [1, 17]. Зазвичай, задачу вдається розв'язати для найпростіших випадків – моноенергетичного [25], однорідного [42], експоненціального [44], подвійного експоненціального [104] і гауссівського [47, 48] розподілів пасток за енергіями в наближенні слабкого або сильного заповнення ЛС [1, 17]. Цей підхід має принципові недоліки, що докладно розглядають у [93, 105]. Вони приводять до істотного зменшення інформативності прямого методу, а також деякої некоректності результатів, одержаних за його допомогою. Незважаючи на це, цей підхід продовжують використовувати для дослідження ЛС дотепер [100–103].

Принципово інший підхід, позбавлений недоліків загально відомого, – це метод ІС для оброблення ВАХ СОПЗ, запропонований і розвинений у працях [65, 68–69, 73, 74, 93, 105–108]. Він

базується на розв'язуванні зворотної задачі експерименту. Метод ІС дозволяє знайти функцію  $h(E)$ , що описує енергетичний розподіл ЛС у 33 досліджуваних зразків, безпосередньо з експериментальних ВАХ шляхом їх диференціального оброблення. Відповідні вирази ми навели вище та у працях [68–69, 73, 74, 105–108]. У результаті виникає можливість одержання найбільш повної та коректної інформації про основні параметри ЛС у матеріалі, такі як їх глибина залягання ( $E_t$ ) і концентрація ( $N_t$ ). Можливості, межі застосування й роздільну здатність методу ІС докладно розглядають у [93, 105].

Необхідно зазначити, що при обох підходах до аналізу ВАХ зазвичай вважають, що просторовий розподіл ЛС у зразках однорідний [17, 21, 24, 42, 44, 46, 48, 63, 65, 67, 69, 73, 74, 93, 95–99, 101–108]. Це припущення придатне для монокристалічних об'ємних матеріалів, але його не використовують для полікристалічних або аморфних плівок, отриманих вакуумною конденсацією чи іншими методами. Добре відомо, що в цьому разі поблизу підкладки формується перехідний шар із підвищеним вмістом дефектів, що можуть бути пастками [110].

Додаткові ЛС також виникають на міжфазових поверхнях напівпровідник – метал або напівпровідник – напівпровідник [111], що є обов'язковим елементом приладових структур. Відповідно концентрація ЛС у зразках змінюватиметься за товщиною. Просторова неоднорідність матеріалу може істотно вплинути на вигляд ВАХ СОПЗ і призвести до некоректності визначення параметрів ЛС у напівпровідникових шарах.

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

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

вали в праці [17]. Автори вважали, що функцію, яка описує розподіл ЛС, можна розбити на дві частини, що залежать лише 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 описували експоненціальною функцією або функцією Гаусса з максимумом на одному чи двох електродах. Ці функції мають 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 катода;  $L$  – товщина зразка;  $A$ ,  $B$  і  $x_0$  – деякі константи, що характеризують просторовий розподіл пасток.

Аналіз показав, що врахування просторової неоднорідності зразків не приводить до зміни виду виразів, що описують ВАХ СОПЗ і напругу заповнення пасток  $U_{TFL}$ , однак реальну товщину зразків у цьому разі потрібно замінити деякою ефективною, яку визначуть 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 Гаусса;  $m = l = \frac{T_c}{T} = \frac{d(\ln j)}{d(\ln U)} - 1$  –

для енергетичного розподілу, що описується експонентою.

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

У цьому разі для довільного енергетичного розподілу ЛС можна записати закон подібності:  $j/L (L/L_{ef}) = f[U/L^2 \cdot (L/L_{ef})^2]$ . У подальшому автори [17] розраховували залежності  $d_{ef}/d$  від  $d/x_0$  для різних значень сталих  $A$ ,  $B$ ,  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $x_0$ . Деякі з них демонструє рис. 4.1.

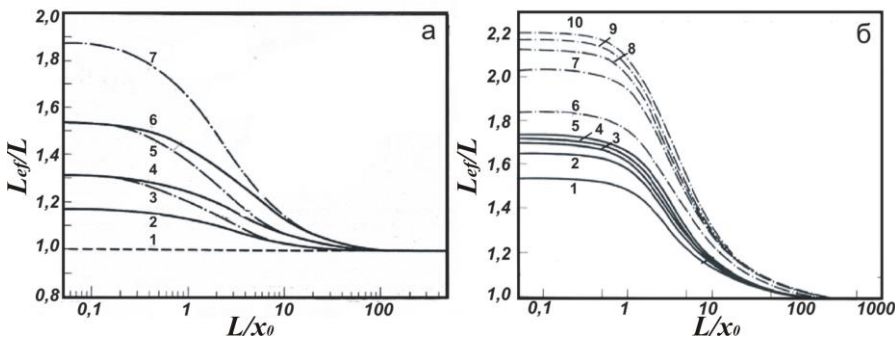


Рисунок 4.1 – Залежність  $L_{ef}/L$  від  $L/x_0$  для пасток з експонентним розподілом рівнів за енергією  $i$  в просторі (співвідношення 1.1), при  $l = 2$  (а); гауссівським розподілом рівнів за енергією  $i$  у просторі (співвідношення 1.2) (б) [17]:  $S(x) = 1$  (1);  $A = 0,5$  (2);  $A = 1$  (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)

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

Потрібно зазначити, що оскільки функції  $S(x)$  у виразах (4.1)–(4.2) ненормовані на одиницю, одержані авторами [17] залежності більшою мірою відображають зміну середньої концен-

трації 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 й приповерхневими ЛС із перших принципів для окремих випадків розраховували в [112].

Експериментально наявність пасток, розподілених у просторі, в плівках органічних напівпровідників, 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 за  $T = 333$  К. Аналіз ВАХ свідчить, що густина струму  $j$  через зразки була пропорційною  $U^3$ . Це свідчить про експоненціальний розподіл пасток за енергією всередині 33 матеріалу, водночас параметр  $l$  дорівнював 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 локалізованих станів методом аналізу вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом**

Електричні властивості напівпровідникових матеріалів значною мірою залежать від наявності глибоких пасток, здатних захоплювати вільні носії заряду. Дослідження ЛС у ЗЗ цих речовин – актуальне наукове завдання, оскільки вони зумовлюють такі важливі параметри матеріалу, як час життя носіїв заряду, їх довжину вільного пробігу та інше, а отже, й експлуатаційні характеристики напівпровідникових приладів, таких, наприклад, як сонячні елементи, фотодетектори створені на їх основі.

Як зазначали, для дослідження ЛС у високоомних матеріалах на сьогодні широко використовують метод, що ґрунтується на аналізі ВАХ у режимі СОПЗ [97, 100, 103, 113]. Так, ZnTe і CdS були одними з перших матеріалів, у яких спостерігали інжекційні струми [1]. Водночас інформацію про параметри глибоких пасток одержують шляхом порівнювання експериментальних ВАХ СОПЗ із кривими, розрахованими теоретично за допомогою припущення, що в напівпровіднику наявні деякі модельні розподіли ЛС [1, 17]. Під час інтерпретування ВАХ СОПЗ також вважають, що зразки, які вивчаються, просторово однорідні [1]. Це припущення придатне у разі монокристалічних об'ємних матеріалів, але його не можна використовувати для полікристалічних чи аморфних плівок, отриманих вакуумною конденсацією або іншими методами. У цьому випадку біля підкладки формується перехідний шар із підвищеною кількістю дефектів, що можуть бути пастками. Саме такий механізм росту, наприклад, властивий конденсації плівок сполук  $A_2B_6$  на неорієнтованих підкладках [114, 115].

До просторової неоднорідності зразків можуть також приводити операції, пов'язані з їх післяростовим обробленням, такі

як відпалювання, травлення та інше. Такі процедури звичайні під час виготовлення сонячних елементів, фотодетекторів та інших приладів електроніки на основі гетеропереходів [116].

Додаткові ЛС обов'язково виникають на міжфазових поверхнях напівпровідник – метал або напівпровідник – напівпровідник, що є обов'язковим елементом приладових структур [126]. Наприклад, приповерхневі стани з концентрацією, що може сягати  $10^{11} - 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , виникають у гетеропереходах на основі сполук  $\text{A}_2\text{B}_6$  [126].

Таким чином, оскільки вимірювання параметрів пасток у напівпровідниковому матеріалі проводять у багат шаровій структурі, нехтування приповерхневими станами, як це роблять у класичних працях [1, 97, 100, 103, 113], фізично неприпустиме. Досліджувані напівпровідникові плівки майже завжди просторово неоднорідні. Це може істотно змінити вигляд кривих струм – напруга й призвести до некоректності визначення параметрів ЛС з ВАХ СОПЗ.

У зв'язку з вищезазначеним, у цьому розділі ми аналізуємо вплив неоднорідності просторового розподілу пасток на вигляд ВАХ СОПЗ і надійність визначення параметрів ЛС із них у напівпровідникових шарах.

#### **4.4. Вольт-амперні характеристики струмів, обмежених просторовим зарядом неоднорідних матеріалів**

Рівняння, що описують ВАХ СОПЗ плоско-паралельних напівпровідникових зразків із пастками й струмознімальними електродами, один із яких забезпечує інжекцію носіїв заряду в матеріал, можна одержати шляхом сумісного розв'язання системи рівнянь (1.12)–(1.13) [1]:

У 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 вважають однорідним, тоді з рівнянь (1.12) і (1.13), у разі якщо  $h(E, x) = h(E)$ , можна одержати такі співвідношення для розрахунку ВАХ СОПЗ гомогенних зразків [117]:

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

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

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.

Повну концентрацію носіїв у матеріалі можна визначити із співвідношення  $n_s^h(L) = \int_E n_s^h(E, L) dE$ . Далі використовуватимемо низькотемпературне наближення [74, 105], тоді функцію Фермі – Дірака можна замінити на функцію Хевісайда й  $n_s(E, L) \sim h(E, L)$ .

Зазвичай під час обчислень ВАХ коефіцієнти  $\alpha$  і  $\beta$  у співвідношеннях (4.4) і (4.5) беруть сталими [65, 117], але більш точна теорія [118] свідчить, що вони є функціями густини струму й напруги:

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

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

Далі другою похідною  $\gamma'$ , що істотно менша від першої  $\gamma$  [105], будемо нехтувати, тоді  $\beta = 1 - \gamma$ . Оскільки похідна  $\gamma$  в режимі СОПЗ під час збільшення напруги зміщення  $U$ , прикладеної до зразка, змінюється від 0,5 до 0, легко побачити зі співвідношень (4.6) – (4.7), що ці параметри на квадратичній ділянці ВАХ набувають значень  $\alpha = 1,5$ ,  $\beta = 0,5$ , у 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 лише 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 зазначають у [17], для довільного енергетичного розподілу ЛС можна записати 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.

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

Ефективну товщину для напівпровідника з пастками, розподіленими за енергією експоненціально, або на «хвостах» розпо-

ділів іншого виду, з використанням коефіцієнтів  $\alpha$  і  $\beta$  визначають таким 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 разі просторово однорідних матеріалів, якщо  $S(x) = const = 1$ , їх ефективна товщина збігається 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 ми показали в [114], ураховуючи неоднорідність напівпровідника за об'ємом у випадку експоненціальних енергетичних розподілів або на «хвостах» розподілів іншого вигляду співвідношення (4.4) і (4.5) наберуть вигляду:

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

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

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) і (4.12) відрізняються від аналогічних виразів (4.4), (4.5), одержаних із припущення просторової однорідності матеріалу, наявністю коригувальних коефіцієнтів  $\delta_1$  та  $\delta_2$ .

Коефіцієнти  $\delta_1$  і  $\delta_2$  можна розрахувати з використанням таких 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 пас-ток.

Водночас для просторово однорідних зразків  $\delta_1 = \delta_2 = 1$ .

Із використання виразів (1.9), (4.11) і (4.12) у низькотемпературному наближенні [74, 105] легко одержати основні співвідношення методу ІС для випадку негомогенних зразків:

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

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

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

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 і неоднорідних шарів.

Таким чином, задачу врахування впливу існування розподілу ЛС за товщиною зразків зводять до визначення параметрів  $\delta_1$  і  $\delta_2$  залежно від вигляду функції  $S(x)$ .

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

Ми виконали розрахунки ВАХ СОПЗ і коригувальних коефіцієнтів  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  для найбільш реалістичних енергетичних і просторових розподілів пасток у напівпровідникових сполуках  $A_2B_6$  (ZnTe, CdTe, ZnS, ZnSe та ін.). Енергетичний розподіл ЛС у 3D матеріалу описувався експоненціальною або гауссівською функцією, оскільки саме такі розподіли зазвичай простежують у полікристалічних та аморфних плівках напівпровідників, отриманих різними методами [1, 17, 42, 100]. Вважали також, що матеріал просторово неоднорідний і містить об'ємні пастки, концентрація яких стала за товщиною зразка, й приповерхневі пастки з максимумом густини на одному з електродів. Розподіл ЛС за товщиною тоді можна описати функцією

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

або

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

де  $S_0$  – описує внесок 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. Ми розглянули випадки: коли матеріал однорідний зі сталою концентрацією об'ємних пасток (рис. 4.2, крива 1); ЛС наявні лише на поверхні зразка, а об'ємних пасток немає (криві 2, 3); і, нарешті, найбільш загальний випадок, коли присутні як об'ємні, так і приповерхневі ЛС (криві 4, 5).

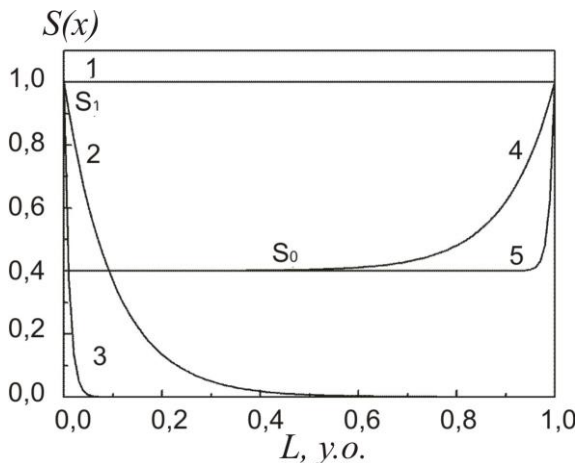


Рисунок 4.2 – Просторовий розподіл ЛС, що враховує наявність об'ємних ( $S_0$ ) і приповерхневих станів ( $S_1$ ) на катоді (2, 3) або аноді (4, 5). Наведені випадки: 1 –  $L/r \rightarrow 0$ , – матеріал є однорідним; 2 –  $L/r = 10$ ; 3 –  $L/r = 100$  – ЛС наявні лише на поверхні зразка:  $S_0 = 0$  – об'ємних пасток немає; 4 –  $L/r = 10$ ; 5 –  $L/r = 100$  – ЛС наявні лише на поверхні зразка:  $S_0 = 0,4$

Далі будемо вважати, що технологія оброблення 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 його можна вважати однорідним (рис. 4.2, крива 1). Якщо



$L \gg r$ , маємо ЛС, розміщені безпосередньо на поверхні напівпровідника (рис. 4.2, криві 3, 5).

Під час розрахування коефіцієнтів  $\delta_1$  і  $\delta_2$  ми нормували функцію  $S(x)$  на одиницю:  $S(x) = S_0 + S_1 = 1$ . Водночас параметри  $S_0$  і  $S_1$  вибирали з таких міркувань. Зазвичай концентрація об'ємних пасток у сполуках  $A_2B_6$  становить  $N_t = 10^{13} - 10^{15} \text{ см}^{-3}$  [1, 100, 103, 113]. Якщо вважати, що в поверхневому шарі матеріалу товщиною 10 нм виникає одна пастка на  $10^4 - 10^5$  атомів, одержимо 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 проводили для двох крайніх випадків  $\alpha = 1,5$ ,  $\beta = 0,5$  і  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$ , 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. Під час моделювання, як і раніше, ми використали значення параметрів глибоких станів і фізичні константи, властиві напівпровідникам групи  $A_2B_6$  (ZnTe, CdTe та ін.) [119]. Одночасно для вибраних енергетичних і просторових розподілів пасток за допомогою співвідношень (1.12), (1.13), (4.4)–(4.6) розраховували ВАХ СОПЗ. У цьому разі енергетичний розподіл пасток задавали гауссівською функцією

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

час моделювання враховували зміну нахилу кривих струм – напруга в подвійних логарифмічних координатах і відповідно коефіцієнтів  $\alpha$  і  $\beta$  в процесі заповнення пасток розподілених за енергією. Для цього використовували таке співвідношення [74]:

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

Типові ВАХ СОПЗ, одержані для зразків із неоднорідним та однорідним розподілами пасток, ілюструє рис. 4.3.

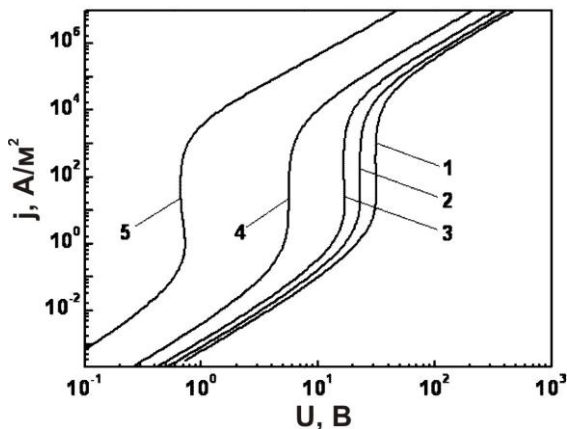


Рисунок 4.3 – Вольт-амперні характеристики, розраховані для однорідних і неоднорідних за товщиною плівок ZnTe: 1 – однорідний розподіл пасток; максимум концентрації поверхневих станів на катоді ( $2 - d/r = 1$ ,  $4 - d/r = 10$ ); на аноді ( $3 - d/r = 1$ ,  $5 - d/r = 10$ ). Наведені розрахунки для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

Як свідчать розрахунки, неоднорідність розподілу пасток за товщиною зразка приводить до істотної 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 глибину залягання пасток визначають із невеликою похибкою.

Результати моделювання свідчать, що в деякому діапазоні напруги струм через просторово неоднорідний зразок істотно

залежить від полярності напруги зміщення. Виникає ситуація, коли у випадку симетричної структури метал – напівпровідник – метал можна спостерігати асиметричні ВАХ. Подібні ВАХ СОПЗ спостерігали в багатьох експериментальних дослідженнях автори [1, 17, 112], а також ми для структур Cr/ZnTe/Cr [120–122]. Проведені розрахунки свідчать, що цю асиметрію може обумовлювати просторова неоднорідність зразків, пов'язана з особливостями їх механізму росту, а також різні режими отримання струмознімальних контактів до напівпровідника і відповідно різна концентрація пасток на міжфазовій межі.

Різний вплив приповерхневих ЛС, розміщених поблизу катода й анода, на напругу заповнення пасток  $U_{TFL}$  і відповідно вигляд ВАХ СОПЗ можна пояснити з використанням таких міркувань. Зразок із приповерхневими пастками, у який здійснюють монополярну інжекцію носіїв, можна розглядати як плоский конденсатор, що заряджається напругою зміщення. Ємність пристрою визначають просторовим розподілом пасток. Якщо пастки розміщені поблизу катода, ємність конденсатора мала, оскільки  $C \sim L^{-1}$ , відповідно зовнішня напруга, необхідна для заповнення цих пасток, велика ( $U_{TFL} \sim C^{-1}$ ). Іншими словами, заряд не інjektується в об'єм зразка, поки прикладена напруга не приведе до заповнення всіх приповерхневих пасток, і ця напруга велика (рис. 4.3, криві 2, 4).

Якщо приповерхневі ЛС розміщені поблизу анода, ємність конденсатора, що утворюється зарядженими пастками, навпаки, велика, оскільки  $L \rightarrow 0$ . Відповідно заповнення цих пасток відбувається вже за малої напруги зміщення (рис. 4.3, криві 3, 5). Зміна стану пасток водночас слабо впливає на електростатику структури й не запобігає інжекції носіїв у об'єм матеріалу, тому провідність структури визначають монополярною інжекцією в об'єм напівпровідника. Різниця в заповненні пасток, розміщених

біля різних електродів, безпосередньо пояснює асиметрію ВАХ СОПЗ неоднорідних зразків.

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

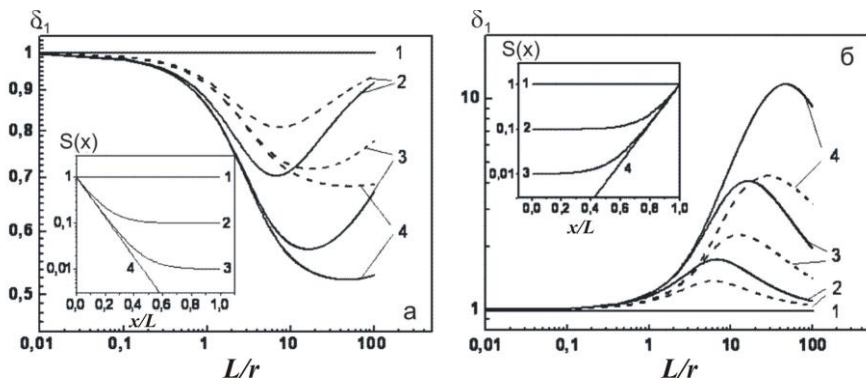


Рисунок 4.4 – Коефіцієнт  $\delta_1$ , розрахований для різних відносних внесків об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а) та аноді (б): 1 –  $S_1/S_0 = 0$ ; 2 –  $S_1/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^2$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha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

Як бачимо, залежності  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  від  $L/r$  мають вигляд кривих із максимумом. Це пов'язано з тим, що за збільшення відношення  $L/r$  розподіл пасток спочатку стає все більш неоднорідним за товщиною зразка, а потім знову наближається до однорідного, але вже з іншою концентрацією пасток. Відповідно коригувальні коефіцієнти  $\delta_1$  і  $\delta_2$  спочатку збільшуються, а потім зменшуються.

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

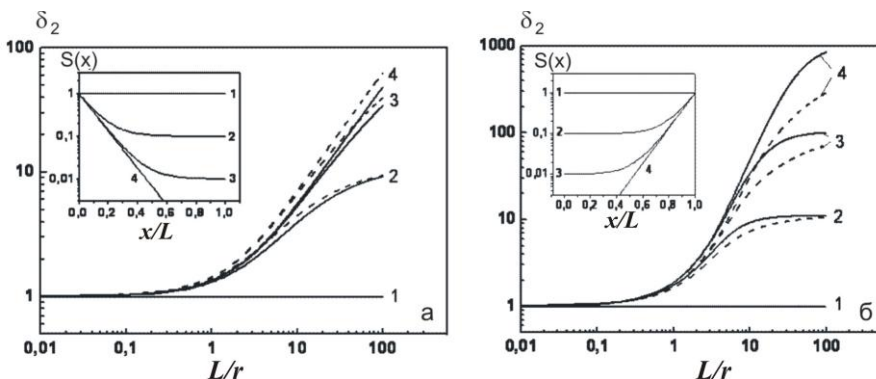


Рисунок 4.5 – Коефіцієнт  $\delta_2$ , розрахований для різних відносних вкладів об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а) та аноді (б): 1 –  $S_I/S_0 = 0$ ; 2 –  $S_I/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_I/S_0 = 10^2$ ; 4 –  $S_I/S_0 = 10^3$ . Штрихові лінії  $\alpha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

Порівнявши співвідношення (4.4), (4.11) і використавши вираз (1.9), можна одержати:

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

Як бачимо з рис. 4.4, якщо просторовий розподіл пасток не враховувати, виникає систематичне зміщення енергетичного положення пасток. За кімнатної температури і  $S_I/S_0 = 10^3$  це зміщення може досягати 0,01–0,015 еВ у разі, 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  $E_t$  істотно знижуються під час зменшення відношення  $S_I/S_0$  і температури дослідження ВАХ. Величина зміщення енергії залягання пасток також залежить від виду їх енергетичного розподілу й збільшується у разі «вузьких» за ене-

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

Як впливає із співвідношень (4.5) і (4.12), у низькотемпературному наближенні коефіцієнт  $\delta_2$  є відношенням точного значення повної концентрації пасток на аноді до теоретично визначеного без урахування можливої неоднорідності зразків, що досліджують,  $-h^{inh}(L)/h^h(L) \sim n_s^{inh}(L)/n_s^h(L) = \delta_2$ . Це відношення може досягати  $10^2-10^3$ , відповідно таких самих значень можуть досягати і похибки щодо визначення  $N_t$  (рис. 4.5). Вплив просторової неоднорідності більш виражений, якщо максимум концентрації приповерхневих станів знаходиться на аноді, а розподіл пасток близький до моноенергетичного.

#### **4.6. Врахування приповерхневих станів, розміщених поблизу обох поверхонь зразка**

У попередньому розділі ми розглянули випадок, коли приповерхневі ЛС розміщені лише біля однієї поверхні напівпровідникового зразка. Такий стан плівки реальний, але його можна одержати лише шляхом спеціального оброблення (пасивації) однієї поверхні зразка. Однак найбільш поширеним є випадок, коли приповерхневі стани наявні біля обох поверхонь напівпровідникового матеріалу. Розподіл ЛС за товщиною тоді можна описати функцією

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

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

Під час подальших розрахунків ми робили ті самі припущення, що і раніше.

У разі коли  $L \ll r_1$ ,  $L \ll r_2$  і  $S_1 = S_2$ , глибокі пастки майже однорідно розподілені за товщиною зразка, таким чином, його можна розглядати як просторово однорідний. Якщо  $L \gg r_1$ ,  $L \gg r_2$ , маємо ЛС, розміщені безпосередньо на поверхні напівпровідника. При моделюванні, як і раніше, будемо вважати, що  $r_1 = r_2 = r$ . Отримані розподіли пасток, що описуються виразами із різним відношенням  $L/r$ , наведені на рис. 4.6.

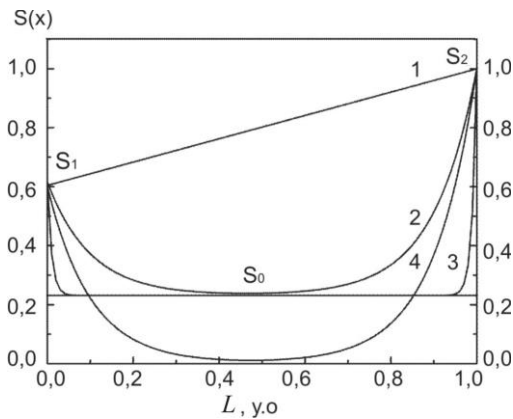


Рисунок 4.6 – Просторовий розподіл пасток, що враховує наявність об’ємних ( $S_0$ ) і приповерхневих станів на катоді ( $S_1$ ) та аноді ( $S_2$ ). Наведені випадки 1 –  $L \ll r$ ; 2 –  $L/r = 10$ ,  $S_0 \neq 0$ ; 3 –  $L/r = 100$ ,  $S_0 \neq 0$  – ЛС наявні лише на поверхні зразка; 4 –  $L/r = 10$ ,  $S_0 = 0$  – об’ємні пастки відсутні

Під час моделювання ми розглянули основні фізично можливі випадки: коли концентрація ЛС змінюється лінійно на міжелектродній відстані (рис. 4.6, крива 1); ЛС наявні лише біля поверхонь зразка, а об’ємних пасток немає (крива 4); і, нарешті, найбільш загальний випадок, коли наявні як об’ємні, так і приповерхневі ЛС біля обох поверхонь зразка (криві 2, 3).

Під час обчислення коефіцієнтів  $\delta_1$  і  $\delta_2$  ми нормували функцію  $S(x)$  на одиницю:  $S(x) = S_0 + S_1 + S_2 = 1$ . Знову, як і раніше, розрахунки проводили для двох крайніх випадків:  $\alpha = 1,5$ ,

$\beta = 0,5$  і  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1$ , що відповідають моноенергетичним і рівномірно розподіленим за енергією пасткам. Типові ВАХ СОПЗ зразків із неоднорідним та однорідним просторовими розподілами пасток ілюструє рис. 4.7 [115].

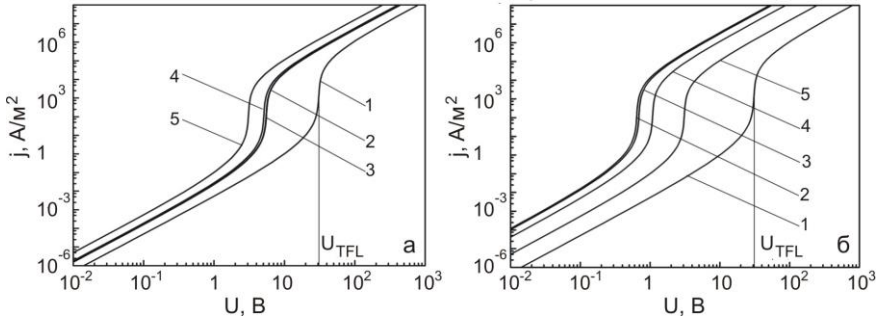


Рисунок 4.7 – ВАХ, розраховані для однорідних (1) і неоднорідних ( $d/r = 10$ ) за товщиною плівок ZnTe: максимум концентрації приповерхневих станів на катоді (а): 2 –  $S_2/S_0 = 0$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 3 –  $S_2/S_0 = 10$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 4 –  $S_2/S_0 = 10^2$ ,  $S_1/S_0 = 10^3$ ; 5 –  $S_2/S_0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

Зі співвідношень (4.11), (4.12) випливає, що похибки знаходження параметрів пасток у просторово неоднорідних зразках визначає величина, що дорівнює усередненій за товщиною зразка густині ЛС. Тому ми розраховували цю величину залежно від різних відносних внесків об'ємних і приповерхневих станів. Відповідні залежності наведені на рис. 4.8 і 4.9.

Однак найбільш повну картину впливу неоднорідності матеріалу на надійність визначення параметрів пасток дають ре-



зультати обчислень коефіцієнтів  $\delta_1$  і  $\delta_2$ , наведені на рис. 4.10, 4.11.

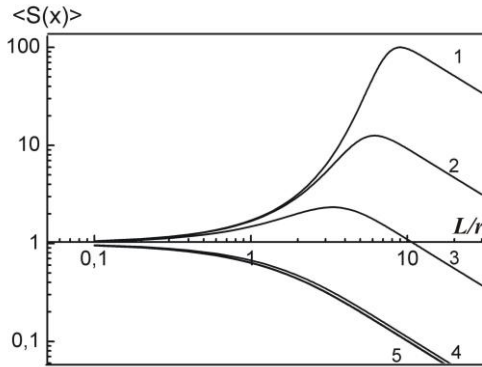


Рисунок 4.8 – Усереднена за товщиною зразка густина ЛС, розрахована для різних відносних внесків приповерхневих станів на інжектувальному й колектувальному контактах. Під час розрахування вважали, що об’ємних пасток немає:  $S_0 = 0$ , 1 –  $S_1/S_2 = 10^3$ , 2 –  $S_1/S_2 = 10^2$ ; 3 –  $S_1/S_2 = 10$ ; 4 –  $S_2/S_1 = 10$ ; 5 –  $S_2/S_1 = 10^3$

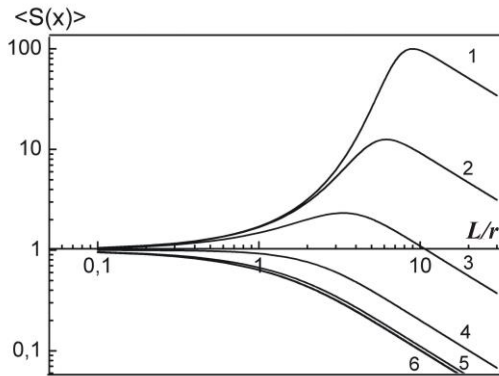


Рисунок 4.9 – Усереднена за товщиною зразка густина глибоких пасток, розрахована для різних відносних внесків об’ємних і приповерхневих станів. 1 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2 = 0$  (приповерхневі стани лише на інжектувальному електроді); 2 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^3$ ,  $S_2/S_0 = 10^2$ ; 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 лише на колектувальному електроді)

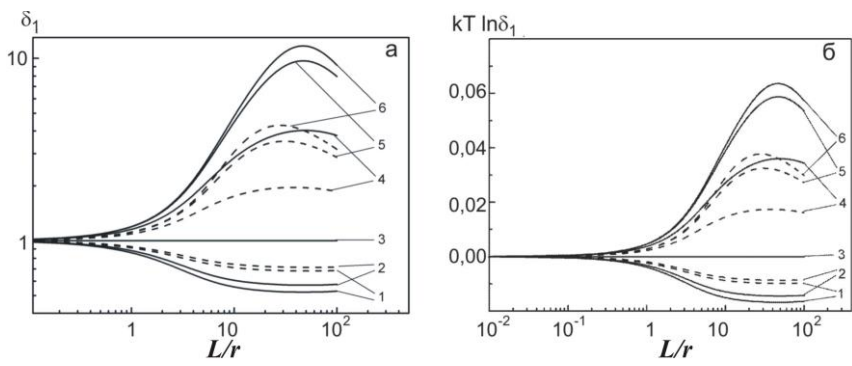


Рисунок 4.10 – Коефіцієнт  $\delta_1$  і  $\Delta E = k T \ln \delta_1$ , розрахований для різних відносних внесків об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації станів на катоді (а): 1 –  $S_2/S_0 = 0, S_1/S_0 = 10^3$ ; 2 –  $S_2/S_0 = 10^2, S_1/S_0 = 10^3$ ; 3 –  $S_2/S_0 = 10^3, S_1/S_0 = 10^3$  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  $\alpha = 2, \beta = 1$

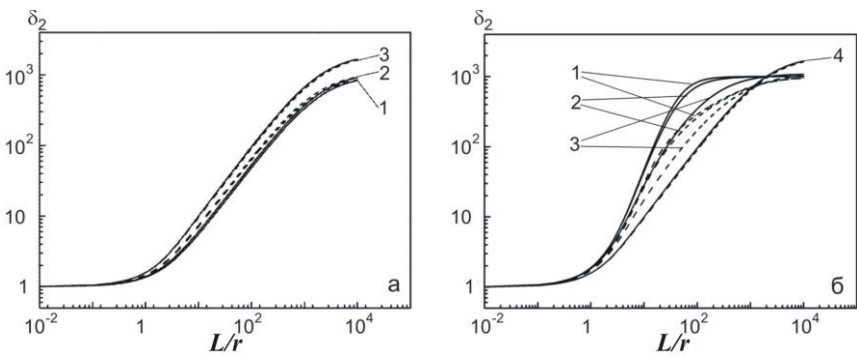


Рисунок 4.11 – Коефіцієнт  $\delta_2$ , розрахований для різних відносних внесків об'ємних і приповерхневих станів. Максимум концентрації станів на катоді (а): 1 –  $S_1/S_0 = 0, S_2/S_0 = 10^3$ ; 2 –  $S_1/S_0 = 10, S_2/S_0 = 10^3$ ; 3 –  $S_1/S_0 = 10^2, S_2/S_0 = 10^3$ ; 4 –  $S_1/S_0 = 10^3, S_2/S_0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

Розрахунки зміщення положення ЛС у ЗЗ матеріалу за кімнатної температури наведені на рис. 4.10 б.

Як свідчить аналіз одержаних результатів, наявність приповерхневих станів біля обох поверхонь зразка приводить до ефектів, подібних розглянутим раніше, коли ЛС були наявні лише поблизу однієї поверхні, але є й деякі відмінності. Так із рис. 4.10 бачимо, що відбувається ефект своєрідного компенсування впливу приповерхневих ЛС, розміщених поблизу анода та катода. 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, цієї похибки немає. Аналогічний ефект спостерігаємо й для коефіцієнта  $\delta_2$ .

## РОЗДІЛ 5

### КЛАСИФІКАЦІЯ МЕХАНІЗМІВ ЗАРЯДОПЕРЕНЕСЕННЯ У НАПІВПРОВІДНИКАХ

#### 5.1. Ідентифікація механізму зарядоперенесення в досліджуваних структурах

Одним з основних факторів, що ускладнює одержання достовірної інформації про параметри ЛС у 3З напівпровідників методом ВАХ СОПЗ, є наявність конкуруючих і супутніх монополярній інжекції механізмів зарядоперенесення (подвійна інжекція, бар'єрна електропровідність, польова іонізація рівнів, джоулів розігрів і т. ін.), що приводять до якісно ідентичних залежностей струм – напруга: степеневі за напругою ділянки, які розділяють стрибки струму ( $I \sim U^\eta$ , де  $\eta \geq 2$ ). Більше того монополярна інжекція носіїв із контакту може відбуватися в інтервалі напруженості полів ( $E_e = 10^4\text{--}10^6$ ) В/м, де проявляється багато високопольових процесів (ефект Френкеля, Пула, Шоттки та інше), що маскують або змінюють особливості експериментальних ВАХ. Наряду з об'ємними механізмами зарядоперенесення, струм у зразках можуть визначати також контактні явища на межі поділу метал – напівпровідник, оскільки досліджувані об'єкти багаточарові. У результаті коректну інформацію про енергетичну структуру напівпровідників під час аналізу ВАХ із використанням математичного апарату теорії ІС можна одержати лише однозначним визначенням механізму зарядоперенесення в досліджуваних структурах як СОПЗ. Така ідентифікація у загальному випадку досить трудомістка, тому, зазвичай, під час оброблення ВАХ СОПЗ її не проводять.

У багатьох працях визначення механізму зарядоперенесення, що обумовлює проходження наскрізного струму через зразки на основі плівок сполук  $A_2B_6$  (CdTe), здійснювали як шляхом

досліджування залежності густини струму й координат характерних точок ВАХ від міжелектродної відстані [17], так і за допомогою методу ІС, розробленого в межах узагальненої теорії інжекційно-контактних явищ у напівпровідниках [24, 53–60], й ідей, запропонованих у працях [123, 124]. Метод спектроскопії дозволяє шляхом сумісного аналізу  $j - U$ ,  $\eta - U$  і  $\frac{d \lg \eta}{d \lg U} - U$  зале-

жностей розрізнити супутні й конкуруючі механізми зарядоперенесення в структурах, а також виділяти серед них високопольові.

Під час експериментального дослідження та ідентифікації високопольових процесів у напівпровідниках на сьогодні виробили деякі стандартні методи аналізу результатів, що полягають в обробленні даних 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 в зразках, що й свідчить про реалізацію саме цього механізму. Але фактично така лінеаризація залежностей струм – напруга в будь-якому з відмічених масштабів може бути результатом розкладання в ряд Тейлора функції на вузькому інтервалі зміни аргументу, що може призвести до помилкових висновків. Ще одним із недоліків такого аналізу є те, що багато високопольових механізмів проявляється практично за одних і тих самих значень напруженості електричного поля, що потребує наведення експериментальних даних відразу в декількох масштабах. Це ще більше ускладнює аналіз ВАХ із використанням стандартних прийомів.

Принципово інший спосіб ідентифікації високопольових процесів за експериментальними ВАХ пропонують у праці [123]. Для випадку дрейфового наближення й реалізації монопо-

лярної провідності автори показують, 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 генерування носіїв у  $c$ -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

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

Водночас представлення будь-якої ВАХ, що розглядали автори [123], 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 $J(U)$	Параметр апроксимації		
		$t$	$q$	$l$
Залежність перетину захоплення від величини 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 Шотткі	$U^{3/4} e^{\sqrt{\beta U}}$	0	-3/4	+1/2
Зміна рухомості полем	$U^2$	0	0	0
	$U$	1	0	0
Тунелювання за участі фононів	$U e^{\beta U^2}$	0	1	2
	$e^{\beta U^2}$	1	1	2
Ефект Пула (Хілла)	$e^{\beta U}$	1	0	1
Тунелювання бар'єра, 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 випливає вимірювальна формула для високовольтної 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 в координатах  $\lg \eta - \lg U$  усі високопольові механізми будуть апроксимуватися лінійною залежністю зі значеннями  $l$ , наведеними в таблиці 5.1. Таким чином виникає можливість ідентифікувати відповідні високовольтні механізми серед інших, а в деяких випадках одночасно визначити тип високопольового механізму.

Для подальшого уточнення домінувального механізму, що визначає струм у досліджуваних структурах, автори [24] розраховували коефіцієнт  $Q$ , що є відношенням концентрації ефективного об'ємного заряду зразка ( $\rho_a$ ) до ефективної концентрації носіїв ( $n_a$ ) поблизу анода. Співвідношення для визначення коефіцієнта  $Q$ , яке ми одержали з використанням рівнянь (4.3) - (4.4), має вигляд:

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

де  $\theta$  – параметр Ламперта.

Цей вираз, на відміну від запропонованого у [24], можна застосувати для розрахунку  $Q$  у довільній точці ВАХ.

У точках екстремумів ( $\eta_{ext}$ ) на залежності  $\eta - \lg U$  це співвідношення спрощується й набуває вигляду, наведеного в [24]:

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



Необхідно відзначити, що коефіцієнт  $Q_{ext}$  ввели з використанням безмодельних співвідношень, які можна застосовувати для широкого класу об'ємних механізмів зарядоперенесення. Аналогічні теоретичні коефіцієнти  $Q_{ext}$ , автори [24] розраховували для найбільш важливих механізмів зарядоперенесення, що можуть реалізовуватися в реальних зразках, таких як подвійна інжекція, бар'єрна електропровідність та інші, з використанням найбільш загальних моделей розподілу пасток у 33 напівпровідника. У результаті встановили, що коефіцієнт істотно залежить від механізму зарядоперенесення в структурі й змінюється від значень  $10^{-5}$  (для чисто плазмового режиму проходження струму) до  $10^3$  і вище для режиму СОПЗ.

На рисунку 5.1 наведено якісну діаграму теоретично розрахованих значень  $Q_{ext}$  для різних механізмів об'ємної електропровідності [24]. Зіставлення експериментально визначених за областю екстремуму ступеня на залежності  $\eta - \lg U$  значень  $Q_{ext}$  із діаграмою, зображеною на рисунку 5.1, дозволяє безпосередньо під час аналізу ВАХ виключати деякі механізми зарядоперенесення в досліджуваних структурах. Оскільки коефіцієнт  $Q_{ext}$  дорівнює одиниці для лінії, що визначає граничний (безпастковий) струм монополярної інжекції для зразка із заданою геометрією й відомими значеннями  $\epsilon\mu$ , то всі стрибки струму, що спостерігаємо на ВАХ і які знаходяться нижче від цієї лінії, дають значення  $Q_{ext} > 1$ , вище – дробові значення коефіцієнта дискримінації. У зв'язку з тим, що для досліджуваних систем із шаром CdTe значення струму на ділянках його швидкого зростання були меншими, ніж максимально можливий безпастковий струм, для уточнення механізму зарядоперенесення перевірялося виконання критеріїв реалізації механізмів ПІ й БЕ [24]:



Рисунок 5.1 – Якісна діаграма значень коефіцієнта дискримінації залежно від домінуючого механізму зарядоперенесення в 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 ми використовували для ідентифікації механізму зарядоперенесення в структурах водночас із залежностями струм – напруга, були одержані шляхом чисельного диференціювання ВАХ у кожній експериментальній точці за допомогою ЕОМ. Програма, що використовувалася, також передбачає обчислення коефіцієнта дискримінації  $Q_{ext}$  у точках екстремуму залежності  $\eta - \lg U$  відповідно до співвідношення (5.6).

## 5.2. Ідентифікація струмів, обмежених просторовим зарядом серед інжекційних процесів

Використання теоретичних уявлень, розвинених у [24], дозволило нам водночас з ідентифікацією інжекційних процесів серед подібних за проявами на ВАХ більш тонко ідентифікувати механізми зарядоперенесення серед можливих інжекційних механізмів.

Як впливає з [24, 59, 60], усім теоретично дослідженим авторами режимам інжекції властива наявність характерних екстремумів ступеня на залежностях  $\eta - \lg U$ , а також специфіка асимптотик  $\eta(U)$  в областях більш низької і більш високої напруги. Побудована в [24] діаграма, з використанням якої у цій праці здійснювали ідентифікацію різних бездифузійних режимів інжекції на експериментальних ВАХ, наведена на рис. 5.2.

Фіксування екстремумів ступеня ВАХ, одержаних під час досліджування плівок CdTe, а також конкретизація режиму інжекції в досліджених структурах дозволили авторам для режимів постійного поля, значної та граничної інжекції, що були у ряді випадків реалізовані експериментально, визначити об'ємні й контактні параметри напівпровідників відповідно до методик, описаних у [24].

Під час реалізації в зразках режиму значної інжекції були визначені густина об'ємного заряду ( $\rho_a$ ) і концентрація вільних носіїв заряду ( $n_a$ ) на аноді за різних напруг. Також розраховані параметри пасткових центрів, що відповідають 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  $\eta$  ці автори одержали такі рівняння, що дозволяють знайти відповідні величини:



Рисунок 5.2 – Екстремуми й асимптоти ВАХ для різних бездифузійних режимів зарядоперенесення в структурах [24]

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

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

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

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

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

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

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

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

Згідно з [24, 60] у разі, якщо величини  $n_{o\bar{o}}$ , одержані із співвідношення (5.15) і за значеннями  $\sigma$  на омічній ділянці ВАХ структур близькі, необхідно вважати виявлені розподіли ЛС у зразку широкими порівняно з  $kT$ . Якщо є розбіжність цих величин, розподіли пасток за енергіями досить вузькі, тоді їх можна моделювати дельта-функціями. У цьому разі можна ввести поправку до величини концентрації пасткових рівнів з урахуванням їх 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 із використанням співвідношень (5.9–5.15) описана в [24, 60].

Необхідно відзначити, що методика, запропонована в [24, 55–57, 60] для оброблення ВАХ у режимі СОПЗ під час деталі-

зації спектра ЛС, використовує додаткові модельні уявлення про характер розподілу пасток за енергіями, що істотно знижує інформативність і надійність методу в цій модифікації.

Цього не відбувається під час використання методу ІС, що є безмодельним і дозволяє визначити форму розподілу пасток за енергіями безпосередньо з експериментальних ВАХ.

Для зіставлення з результатами, одержаними з використанням методу ІС, ми також оброблювали ВАХ СОПЗ за допомогою модельних уявлень, розвинених у [17]. При цьому вважали, що розподіл пасток є моноенергетичним або описується експоненціальною функцією. Ця методика добре відома й докладно описана, наприклад у [1, 17]. Під час розрахунків параметрів пасток нами використовувались такі значення сталих речовини:  $\varepsilon = 10,6$ ;  $N_V = 1,79 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ;  $N_C = 7,93 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Ураховувалася 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 нами на модельних моноенергетичних зразках методом Холла, вона становила  $\mu \approx 30 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ .

Ідентифікацію контактних механізмів зарядоперенесення в зразках проводили перебудуванням відповідних ВАХ у масштабі  $\lg I - U$  з подальшим визначенням коефіцієнта ідеальності цієї характеристики відповідно до методики, описаної в [125–126].

## РОЗДІЛ 6

### ДОСЛІДЖЕННЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ПЛІВКАХ ХАЛЬКОГЕНІДІВ У РАМКАХ КВАЗІХІМІЧНОГО ФОРМАЛІЗМУ

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

Важливим фактором, що визначає структурно залежні властивості сполук  $A_2B_6$ , є наявність дефектів структури різного типу, що здебільшого заряджені. Дефекти кристалічної структури зазвичай поділяють на точкові, одно-, дво- й тривимірні [127]. До першого типу належать вакансії ( $V_A$ ,  $V_B$ ), міжвузлові атоми ( $A_i$ ,  $B_i$ ), антиструктурні дефекти ( $A_B$ ,  $B_A$ ) і домішкові атоми у вузлах ( $C_A$ ,  $C_B$ ) і міжвузлях ( $C_i$ ) кристалічної ґратки. Проте для широкозонних матеріалів (крім CdTe) антиструктурні дефекти не типові і виникають головним чином під дією іонізуючого випромінювання [128]. Точкові дефекти (ТД) у халькогенних сполуках можуть бути одно- й двозарядженими. Кожний заряджений власний дефект створює в ЗЗ напівпровідника ЛС з енергією  $\Delta E_i$ , що може знаходитися як поблизу зони провідності (валентної зони), і тоді дефект є донором (акцептором), так і в її глибині, і тоді він є пасткою для носіїв заряду, або рекомбінаційним центром. В умовах мінімізації кількості протяжних дефектів, структурнозалежні властивості халькогенідних сполук переважно визначають їх власні ТД. Вплив пасток і рекомбінаційних центрів на електричні характеристики напівпровідникових матеріалів розглянуті в [5, 128–131]. Варто відзначити, що, незважаючи на велику кількість досліджень ТД у халькогенідах цинку й кадмію, єдиної думки щодо природи електрично-активних дефектів як для області високих тисків пари металу, так і халькогену дотепер не існує [5, 128].

До другого типу дефектів кристалічної структури належать гвинтові й крайові дислокації, що можуть знаходитися як в об'ємі кристалів, так і утворювати малокутові межі областей когерентного розсіювання (ОКР). Третій тип вмщує ДП, двійники, межі зерен і поверхню кристалів і плівок. Нарешті, до четвертого типу належать пори й включення сторонніх фаз (преципітати). Усі ці дефекти структури значно впливають на фізичні характеристики реальних кристалів і плівок сполук  $A_2B_6$ , створюючи в ЗЗ матеріалу водночас із ТД велику кількість ЛС з різними енергіями залягання [5].

## **6.2. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у CdTe в рамках квазіхімічного формалізму**

### **6.2.1. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у монокристалах CdTe**

За умов мінімізації кількості протяжних дефектів електрофізичні та оптичні властивості плівок халькогенідів, а отже, й експлуатаційні характеристики приладів електроніки на їх основі визначає ансамбль ТД. Особливо важлива оптимізація спектра ЛС у шарах, що використовують як матеріал активних до випромінювання приладів електроніки: детекторів жорсткого випромінювання, фотоприймачів, сонячних елементів тощо [5, 128].

Необхідність цілеспрямованого керування електрофізичними властивостями кристалів і плівок халькогенідів цинку й кадмію для приладового використання обумовила значний інтерес до вивчення дефектної структури цих матеріалів залежно від технологічних умов їх одержання й подальшого післяростового термооброблення [4, 5, 131]. Однак необхідно констатувати, що на сьогодні механізми дефектоутворення та спектр енергетичних рівнів ТД у ЗЗ бінарних сполук вивчені недостатньо, а ідентифікація більшості ЛС спірна [4, 5, 128, 129,



132–134]. Особливо не визначено є ситуація з вивченням процесів дефектоутворення в CdTe, оскільки, на відміну від інших сполук цієї групи, водночас із дефектами Шотткі та Френеля за підґратками металу й халькогену тут можуть виникати антиструктурні дефекти [5, 133–135]. Саме тому CdTe був обраний основним об'єктом наших досліджень.

Розвиток уявлень про дефектну структуру сполук  $A_2B_6$  відбувається шляхом моделювання ансамблю ТД у матеріалі й порівнювання одержаних результатів з експериментальними даними. Стан високотемпературної рівноваги дефектів при цьому зазвичай визначають ґрунтуючись на аналізі залежностей концентрації вільних носіїв у халькогеніді від температури відпалювання зразків  $T_p$ , тиску пари компонентів сполуки під час післяростових відпалів ( $P_{Cd}$ ,  $P_{Te_2}$ ) чи активності домішки (в легованому матеріалі). Розрахунок ансамблю ТД у матеріалах, зазвичай, проводять з використанням квазіхімічного формалізму.

Для дослідження рівноважного стану ансамблю ТД монокристалів CdTe під час їх термічного відпалювання в парі кадмію ми застосовували моделі, що на сьогодні є найбільш обґрунтованими й такими, що добре узгоджуються з експериментальними результатами [4, 5, 133, 136].

Перша модель, яку використовували під час моделювання, відповідає традиційним уявленням про дефектну структуру CdTe [136], вона враховує такі 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 використали під час розрахунків ансамблю ТД згідно з цією моделлю брали з [137].

Друга модель ураховує 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]. Її запропонував Черн, а в подальшому розвинули й широко використовували під час моделювання Фочук, Фреїк та

інші автори [139–145]. Константи квазіхімічних реакцій при цьому відповідають наведеним у працях [139, 140]. Звернемо увагу, що в цій моделі нехтують антиструктурним дефектом  $Te_{Cd}$ , хоча, за даними праць [5, 133, 135], саме цей донорний дефект ( $Te_{Cd}^+$  чи  $Te_{Cd}^{2+}$ ) є центром, що компенсує власні акцептори  $Te_i^-$  (або еквівалентні центри  $V_{Cd}^-$ ) в області високого надлишкового тиску телуру, утримуючи концентрацію дірок в матеріалі сталою.

Ми запропонували підхід, що дозволяє перенести акцент із вибору моделі власних дефектів у CdTe на правильне визначення їх ентальпій утворення й іонізації [146–148]. Використовуючи такий підхід, вдається врахувати всі можливі дефекти, що можуть існувати в матеріалі. Якщо при цьому константи квазіхімічних реакцій розраховані правильно, відповідна система рівнянь адекватно опише експериментальні дані. Фактично цей підхід модельно незалежний, його можна використовувати для опису стану дефектів у монокристалах і плівках CdTe, ZnTe або інших сполук  $A_2B_6$ . Раніше такий підхід не могли широко використовувати у зв'язку з обмеженими можливостями комп'ютерної техніки.

Таким чином, під час моделювання процесів дефектоутворення в CdTe ми враховували найбільш повний спектр власних ТД. До того ж передбачали можливість утворення дефектів із різними зарядовими станами як за аніонною, так і катіонною підґратками, а також враховували існування антиструктурного дефекту  $Te_{Cd}$  у різних зарядових станах. Єдиний дефект, який ми не брали до уваги, -  $Cd_{Te}$ , оскільки його існування в матеріалі малоймовірне [5, 133, 135]. Відповідно під час моделювання вважали, що у CdTe виникають такі дефекти: ( $Cd_i^0, Cd_i^{2+}, V_{Te}^0, V_{Te}^+, V_{Te}^{2+}, V_{Cd}^0, V_{Cd}^-, V_{Cd}^{2-}, Te_i^0, Te_i^-, Te_{Cd}^{2+}$ ).

Неважко помітити, що на відміну від праць [139, 140], ми враховували, крім заряджених, ще й нейтральні дефекти та відповідно розраховували їх концентрацію. Це дає додаткові можливості порівняння результатів моделювання з експериментом, наприклад, дозволяє оцінити область гомогенності телуриду кадмію, розрахувати деякі структурні характеристики дефектного матеріалу та ін.

Порівняння результатів моделювання проведеного в більшості праць [4, 5, 131, 136–140] з експериментальними даними ускладнюється у зв'язку з тим, що зазвичай реакції дефектоутворення записують для випадків рівноваги ТД із газовою фазою при високих температурах, у той час як значна кількість фізичних методів дозволяє визначити глибину залягання рівнів ТД у ЗЗ охолодженого напівпровідникового матеріалу (при кімнатній температурі). Тому ми записували квазіхімічні реакції таким чином, щоб можна було використати праці, в яких визначали енергії залягання рівнів заряджених дефектів, положення яких слабко залежить від температури. Це дає можливість об'єднати дві області дослідження ТД у матеріалі: квазіхімічну теорію та спектроскопію глибоких ЛС включаючи результати ІС. Тобто можна використати інформацію, яку ми одержали, про енергію залягання власних точкових дефектів у ЗЗ халькогенідних матеріалів.

Умовно найбільш загальний варіант, що описує процеси дефектоутворення в матеріалі, який ми використовували для розрахунків концентрації ТД, далі будемо називати третьою моделлю, хоча реально підхід є безмодельним і, як уже зазначали, враховує всі можливі види дефектів у сполуці.

У деяких випадках використовувались і інші моделі дефектоутворення в CdTe. Ми узагальнили їх у праці [148]. Моделювання проводили в інтервалі тиску пари кадмію й температур відпалювання, що є типовими під час оброблення

реальних монокристалів. Квазіхімічні реакції, що описують вибрані для розрахунків моделі, зведені в табл. 6.1.

Під час використання моделі власних дефектів, запропонованої у працях [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 самій таблиці наведені значення термодинамічних параметрів, що використовували під час розрахунків констант квазіхімічних реакцій.

У системі рівнянь, що застосовували для розрахунку ансамблю ТД у телуриді кадмію, співвідношення в 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 й дірки;  $n$ ,  $p$  – їх концентрація;  $T_p$  – температура відпалювання монокристала.

Під час розрахунків ми використали два різних набори значень енергії залягання ЛС ТД у ЗЗ матеріалу згідно з [145] і [133, 134]. Не зазначені в літературних джерелах константи квазіхімічних реакцій розраховували за методикою, описаною в [149], водночас вважали, що ефективна маса електронів становить  $m_n^* = 0,11 \cdot m_0$ , а маса дірок –  $m_p^* = 0,83 \cdot m_0$  [149]. Під час розрахунків враховували також залежність ширини ЗЗ матеріалу від температури  $E_g$  (eV) =  $1,605 - 4,9 \cdot 10^{-4} T$ .

Сумісне розв'язування систем рівнянь, наведених у рядках 1–8, 9–15 та 9–23, для трьох різних моделей відповідно дає

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> )	$\Delta H$ , $\Delta E$ , eB	[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	$n + [V_{Cd}^-] + 2 \cdot [V_{Cd}^{2-}] + [Te_i^-] = p + 2 \cdot [Cd_i^{2+}] + [Cd_i^+] + 2 \cdot [V_{Te}^{2+}] + [V_{Te}^+] + 2 \cdot [Te_{Cd}^{2+}]$				

можливість визначити концентрацію ансамблю ТД у матеріалі для випадку їх повної рівноваги через константи квазіхімічних рівнянь  $K$  і парціальний тиск пари кадмію  $P_{Cd}$  або температуру відпалювання зразків  $T_p$ . Розрахунки проводили як чисельними методами, так і аналітично. У результаті розв'язування систем рівнянь ми в аналітичному вигляді одержали вирази для визначення концентрації електронів у монокристалах, наведені в [146–148].

Як вже вказувалося, більшість вимірювань провідності й концентрації носіїв заряду в зразках CdTe проводять за температур, близьких до кімнатної, хоча самі монокристали вирощують за високих температур. Унаслідок цього реальний стан ансамблю ТД у напівпровіднику відповідатиме їх частковій рівновазі за деякої проміжної температури. Це ще більше стосується плівкових зразків, швидкості охолодження яких набагато більші, ніж у монокристалів. У цьому разі 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 подібних праць ми не виявили.

Під час розрахунків концентрації власних ТД у загартованому матеріалі до систем рівнянь, що описують рівноважний стан дефектів, додавали нові рівняння. Для першої моделі дефектоутворення ці додаткові рівняння матимуть 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 за повної рівноваги.

У разі використання системи квазіхімічних реакцій, що відповідають другій моделі, описати процеси гартування неможливо, оскільки рівняння 9–15 в таблиці 6.1 визначають лише рівноважні процеси між твердою фазою й насиченою парою під час відпалювання монокристала. Відповідно розрахунок дефектного стану матеріалу в разі його гартування за цією моделлю не проводили.

Для визначення ансамблю ТД у рамках третьої моделі дефектоутворення до рівнянь (6.1) і (6.2) необхідно додати такі 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'язання розширених таким чином систем рівнянь дозволяє розрахувати концентрацію ТД у загартованих зразках залежно від технологічних параметрів вирощування й відпалювання монокристалів, а також температури їх подальшого дослідження.

Як і для випадку повної рівноваги, крім чисельних розрахунків, ми в [146, 147] одержали аналітичні вирази, що визначають концентрацію вільних носіїв заряду у швидко охолодженому матеріалі через константи квазіхімічних рівнянь. Результати чисельного розрахунку концентрації ТД і носіїв заряду в телуриді кадмію залежно від  $P_{Cd}$  для випадку повної рівноваги й гартування з використанням трьох моделей наведені у [146–147].

Рисунок 6.1 показує залежність концентрації власних ТД від температури відпалювання ( $N - 10^3/T$ ) кристалів CdTe для трьох різних моделей за  $P_{Cd} = 600$  Па. Зміна концентрації

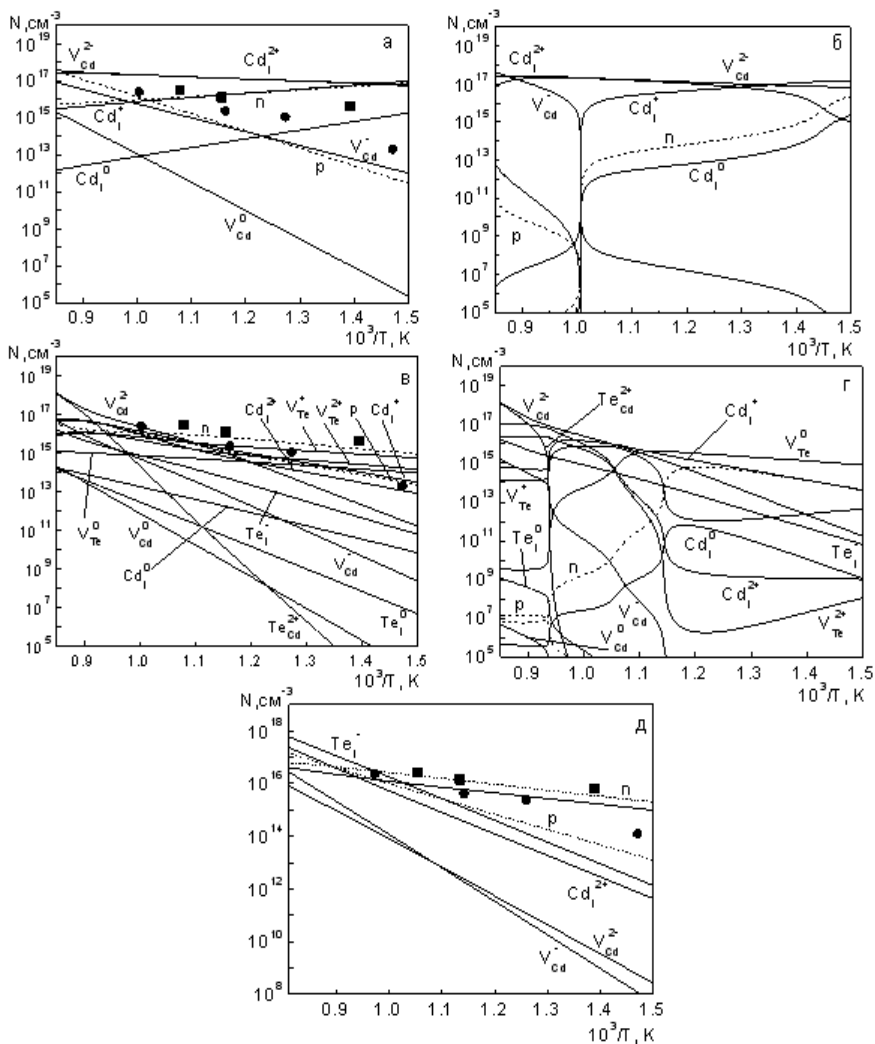


Рисунок 6.1 – Залежність концентрації власних ТД та носіїв струму від температури відпалювання кристалів CdTe при  $P_{Cd} = 600$  Па. Перша модель дефектів: повна рівновага (а); гартування (б). Третя модель дефектів: повна рівновага (в); гартування (г). Друга модель дефектів: повна рівновага (д); експериментальні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



вільних електронів  $n$  від температури відпалювання зразків (модель 2) за різних тисків пари кадмію наводиться у [151], там також наведені експериментальні результати визначення концентрації носіїв заряду в матеріалі згідно з працею [152].

Оскільки основним параметром телуриду кадмію, що визначають експериментально, й який можливо порівняти з результатами моделювання, є його холівська концентрація носіїв заряду, у праці, використовуючи співвідношення  $n_H = n - p$ , де  $p = K_i/n$ , ми розрахували цю величину залежно від тиску пари кадмію під час відпалювання матеріалу. Відповідні залежності холівської концентрації зарядоносіїв від  $P_{Cd}$  для різних моделей дефектоутворення та швидкості охолодження зразків наводяться на рис. 6.2.

Крім того, згідно з результатами моделювання були побудовані тривимірні залежності  $n_H$  від тиску металу й температури в процесі відпалювання (рис. 6.3). Це, у свою чергу, дозволило встановити технологічні параметри, що відповідають зміні типу провідності монокристалів під час термооброблення.

Результати розрахунків ансамблю ТД у CdTe за першою моделлю дозволили встановити, що в області досліджених надлишкових тисків кадмію переважальними дефектами в матеріалі є міжвузлові атоми кадмію –  $Cd_i^{2+}$ . Під час подальшого збільшення  $P_{Cd}$  домінувальними стають однозаряджені дефекти  $Cd_i^+$ . Водночас концентрація незаряджених дефектів цього типу значно нижча, ніж заряджених.

В області низьких тисків кадмію структурно-чутливі властивості напівпровідника визначають вакансії  $V_{Cd}^-$  та  $V_{Cd}^0$ . Оскільки заряджені міжвузлові атоми кадмію є донорами, а заряджені вакансії – акцепторами, під час зменшення  $P_{Cd}$  у процесі відпалювання халькогеніду відбувається зниження

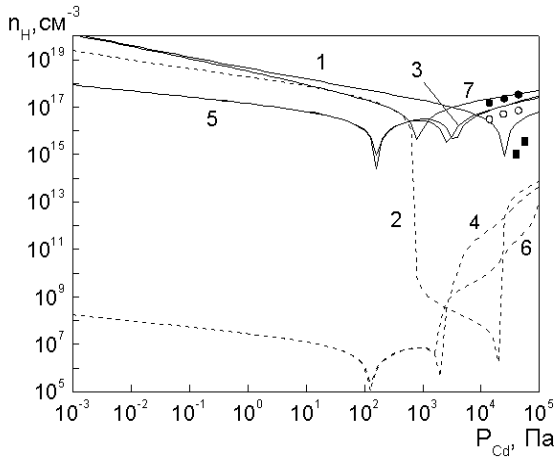


Рисунок 6.2 – Порівняння результатів розрахунків  $n_H$  з експериментальними даними: 1 – повна рівновага; 2 – гартування: модель дефектів [144]; 3, 4, 5, 6 – модель дефектів [133, 135]: 3, 4 – набір констант [145]; 5, 6 – набір констант [139]; 7 – друга модель, повна рівновага.  $T_p = 1173$  К. Експериментальні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

концентрації електронів із подальшою інверсією типу провідності матеріалу з  $n$  на  $p$ . В області малих тисків кадмію під час зменшення  $P_{Cd}$  провідність CdTe зростає внаслідок збільшення в матеріалі концентрації дірок. Гартування зразків приводить до істотної зміни стану ансамблю ТД у матеріалі, в результаті в деякому діапазоні тисків кадмію його опір збільшується майже на вісім порядків. Значення відповідних тисків і ширину цього діапазону визначає температура відпалювання CdTe.

При зменшенні  $T_p$  інтервал тисків кадмію, де халькогенід стає напівізолювальним, розширюється та зміщується в область менших  $P_{Cd}$ . Крім того, на залежності  $n_H - P_{Cd}$  спостерігається область тисків, де концентрація носіїв зменшується не так

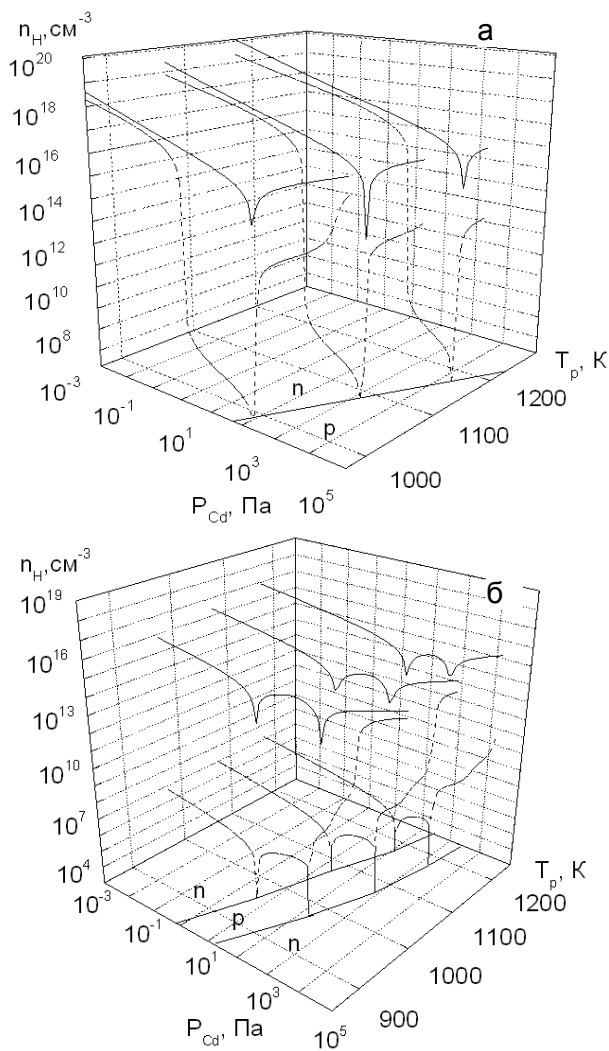


Рисунок 6.3 – Залежність холлівської концентрації носіїв заряду від тиску пари кадмію та температури відпалювання за повної рівноваги дефектів та при гартуванні: перша модель дефектів (а); третя модель – (б). На рисунку позначені області, що відповідають різним типам провідності матеріалу

значно (у двічі – утричі порівняно з матеріалом у рівноважному стані), а сам матеріал має проміжну провідність.

Для другої моделі дефектоутворення характерним є домінування дефектів за підґраткою телуру –  $Te_i^-$  ( $P_{Cd} < 10^3$ – $10^4$  Па) та  $V_{Te}^{2+}$  ( $P_{Cd} > 10^3$ – $10^4$  Па). Лише за високих температур відпалювання ( $T_p > 1073$  К) і високих тисків кадмію ( $P_{Cd} > 10^4$  Па) переважальним дефектом стає міжвузловий  $Cd_i^{2+}$ . Необхідно зазначити, що результати, які ми одержали, добре корелюють із даними моделювання, наведеними в працях [139, 140, 143].

Розрахунки ансамблю ТД згідно з третьою моделлю показали [146–148], що в області високих тисків кадмію структурночутливі властивості матеріалу визначаються міжвузловими атомами  $Cd_i^{2+}$  (у невеликому інтервалі технологічних параметрів –  $Cd_i^+$ ), тоді як за малих  $P_{Cd}$  дефектами, що домінують, є  $V_{Cd}^{2-}$  та  $Te_{Cd}^{2+}$ . Одночасно концентрація останніх дефектів при зменшенні  $P_{Cd}$  збільшується дуже швидко, виходячи за межі області гомогенності матеріалу, що у дослідженому діапазоні температур становить  $10^{19}$ – $10^{20}$  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 суперечить результатам роботи [139, 140], але повністю збігається 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 напівізолювальний матеріал може бути використаний як базовий для створення високоефективних датчиків  $\gamma$  та  $X$ -випромінювання.

Необхідно зазначити, що третя модель, як перша і друга, передбачає зміну провідності матеріалу з  $n$  на  $p$  при зменшенні  $P_{Cd}$ . Встановлено, що відповідні значення критичних тисків кадмію збільшуються при зростанні температури відпалювання матеріалу. При цьому тиски, за яких відбувається інверсія провідності напівпровідника, передбачені двома моделями, є досить близькими. Це саме 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 відпалювання телуриду кадмію під великим 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].

Зазначимо, що утворення CdTe  $n$ -типу провідності під час відпалювання в парі телуру спостерігалось експериментально у праці [155], але автори досліджували матеріал, легований хлором. Зміну типу провідності монокристала за низьких тисків пари кадмію вони пояснюють саме утворенням антиструктурного дефекту  $Te_{Cd}^{2+}$ . Наші розрахунки, однак, свідчать, що у багатьох випадках концентрація цих дефектів,

необхідна для зміни типу провідності халькогеніду з  $p$  на  $n$ , лежить за межами гомогенності напівпровідника.

Із рисунка 6.3 бачимо, що під час використання відмінних одна від одної моделей дефектоутворення та наборів констант квазіхімічних рівнянь, запропонованих авторами [4, 5, 133, 135], за високих тисків парів кадмію спостерігається досить гарна кореляція між результатами моделювання та експериментальними значеннями  $n$ . Це цілком зрозуміло, оскільки відповідні константи квазіхімічних рівнянь були одержані внаслідок оптимізації розв'язку багатofакторної задачі саме в області високих значень  $P_{Cd}$ . У матеріалі, збагаченому телуром, між даними, розрахованими за різними моделями, помітні великі розбіжності, що дозволяє зробити вибір найбільш достовірних із них.

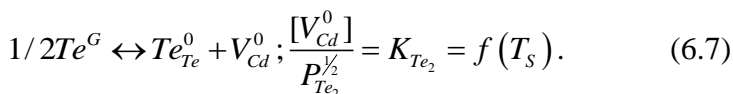
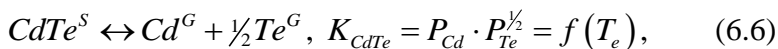
### **6.2.2. Квазіхімічний опис ансамблю точкових дефектів у плівках CdTe для випадків повної рівноваги та гартування**

Під час дослідження процесів дефектоутворення у монокристалах CdTe було виявлено, що моделі дефектоутворення з відповідними наборами констант квазіхімічних рівнянь, які ми використали, досить добре описують експериментальні дані [136, 137, 153, 154, 156]. Але умови одержання та післяростового оброблення монокристалів істотно 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 під час їх відпалювання за надлишкового 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 різними дефектами.

Таке адаптування можна здійснити за рахунок виявлення зв'язку між температурою випарника  $T_e$  та тиском пари кадмію і телуру, утворених унаслідок дисоціації халькогеніду під час його випаровування (добре відомо [157], що сполуки  $A_2B_6$  випаровуються неконгруентно). 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 за температури підкладки  $T_s$ .

Тоді для описання стану повної рівноваги власних дефектів у плівках CdTe можуть бути використана система квазіхімічних рівнянь, наведена у таблиці 6.1, однак її необхідно доповнити двома додатковими співвідношеннями. Перше з них описує випаровування сполуки за температури випарника  $T_e$  і враховує її дисоціацію при переході з твердої фази у пару. Друге рівняння характеризує рівновагу пара телуру – конденсат з утворенням власних дефектів у плівці CdTe за температури осадження (підкладки)  $T_s$ .



Необхідно зазначити, що ці рівняння можна записати з використанням значень рівноважного тиску як металу  $P_{Cd}$ , так і халькогену  $P_{Te}$ . При цьому перехід від значень парціального тиску кадмію до тиску телуру та навпаки у реакціях (6.11–6.12) можна здійснити відповідною зміною константи квазіхімічних рівнянь [4, 148].

Розв'язання нової системи квазіхімічних рівнянь проводили за методикою, використаною та апробованою для монокристалів. Результати моделювання ансамблю ТД у плівках CdTe залежно від температури випарника  $T_e$  за різних температур підкладки  $T_s$  для розглянутих вище моделей дефектоутворення подані в наших працях [146–147]. Ансамбль власних дефектів у плівках виявився подібним до одержаного у разі 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 К) засвідчують, що при збільшенні  $T_e$  відбувається насичення плівки металом, при цьому домінуючим дефектом донорного типу залежно від вибору моделі стає  $Cd_i^{2+}$  (перша модель) або вакансії телуру  $V_{Te}^{2+}$  (друга модель),  $V_{Te}^+$  (третя модель). Унаслідок цього напівпровідник при  $T_e > (950–1\ 000)$  К має  $n$ -тип провідності.

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

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

Встановлено, що концентрація нейтральних дефектів у плівках CdTe виявилася істотно нижчою від концентрації заряджених, тому нею у більшості випадків можна знехтувати.



Зниження  $T_s$  в умовах їх рівноваги ТД приводить до зменшення концентрації власних дефектів та вільних зарядоносіїв у шарах.

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

У разі використання другої моделі одержані результати подібні до вищенаведених: за високих температур випарника основними дефектами у CdTe є двозаряджені міжвузлові атоми кадмію ( $Cd_i^{2+}$ ), тоді як за 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 малого тиску кадмію і при розрахунках за третьою моделлю. При підвищенні температури випарника та відповідно тиску кадмію основними дефектами стають двозаряджені міжвузлові атоми кадмію ( $Cd_i^{2+}$ ) за низьких температур підкладки ( $T_s < 700 K$ ) та однозаряджені – за високої.

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

Усі три моделі передбачають, що плівки CdTe, одержані за температур випарника більших ніж  $T_e = 900\text{--}970 K$ , незалежно від температури підкладки, завжди мають  $n$ -тип провідності.

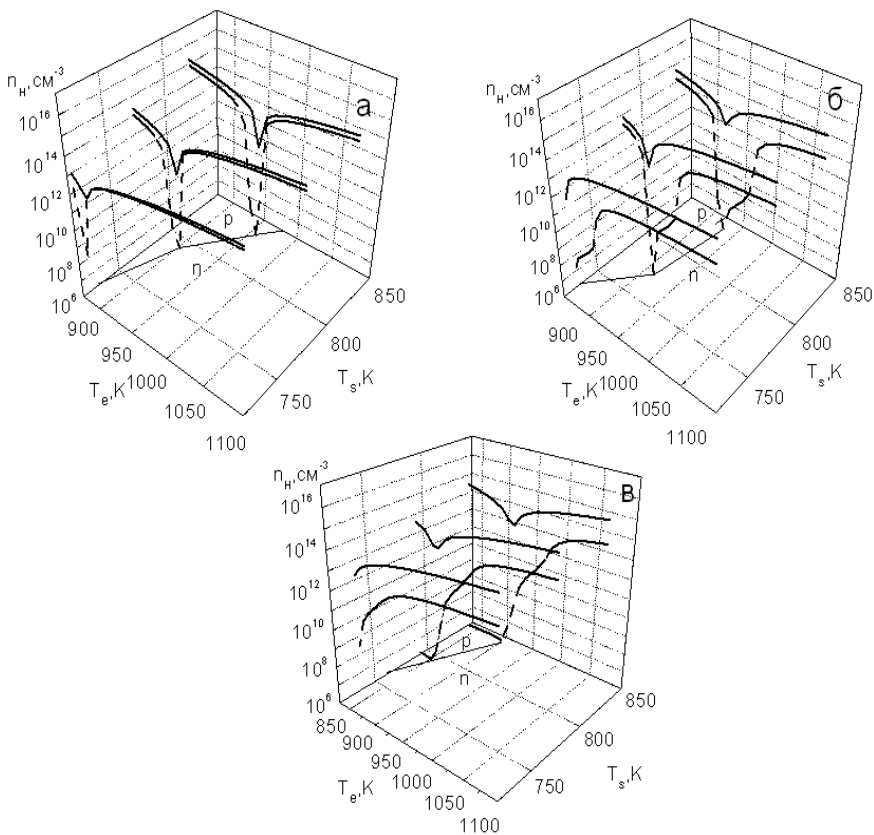


Рисунок 6.4 – Залежність холлівської концентрації вільних носіїв заряду в плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  та підкладки  $T_s$ : перша модель дефектів (а), друга модель (б), третя модель (в). Суцільна лінія – випадок повної рівноваги дефектів; штрихова – їх гартування

У разі повільного охолодження такі плівки повинні бути достатньо високоомними, оскільки концентрація носіїв у них в основному не перевищує  $10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Лише за нижчих температур  $T_e$  можна одержати плівки  $p$ -типу (рис. 6.4). При цьому температура, що відповідає області зміни провідності, знижується при зменшенні  $T_s$ . Це обумовило вибір діапазону

зміни температур випарника  $T_e = (873-1023 \text{ K})$ , який ми використовували під час нанесення плівок CdTe у КЗО, оскільки за таких умов можна одержати плівки як  $n$ -, так і  $p$ -типу провідності.

Гартування плівок приводить до збільшення їх опору від двох (перша модель) до десяти і більше разів (друга та третя моделі). При цьому згідно з розрахунками з використанням новітніх моделей існує широка область технологічних параметрів, де такі плівки стають напівізолювальними. 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 істотно впливає на концентрацію вільних носіїв у плівках  $p$ -типу провідності, хоча вона також дещо знижується. Згідно з третьою моделлю 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 проведення розрахунків концентрації власних та домішкових дефектів у різних матеріалах із «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 із газової фази нейтральних дефектів, а потім розглядаються процеси їх іонізації у твердому тілі залежно від положення рівня Фермі,

який визначається як власними дефектами, так і легувальними та неконтрольованими домішками.

Для випадку повної рівноваги концентрацію будь-якого ТД можна виразити через термодинамічні потенціали процесу дефектоутворення так [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,  $B$  – Те.

Розрахунок значень  $E$ ,  $U^{vib}$ ,  $S^{vib}$  у цих рівняннях зводиться до моделювання взаємодії дефектів із кристалічною ґраткою матеріалу методом “*ab initio*”, тобто виходячи лише з квантово-механічних і термодинамічних параметрів атомів  $Cd$  та  $Te$  [158]. Порівняння та аналіз констант, наведених різними дослідниками, ми провели 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;  $N(X_d^{z+})$ ,  $N(X_a^{z-})$  – концентрація донорів та акцепторів відповідно.

Енергію іонізації акцепторів, як і положення рівня Фермі при подальшому моделюванні будемо відраховувати від верху валентної зони, а донорів – від дна зони провідності. Фактори

спінового виродження рівнів візьмемо такими, що дорівнюють  $g = 2$  для однозаряджених донорних дефектів та  $g = 1/2$  – для акцепторних, для двозаряджених центрів – відповідно до [2,3, 5].

Для визначення найбільш адекватних наборів термодинамічних параметрів дефектоутворення та апробації запропонованого математичного алгоритму ми спочатку розраховували ансамбль ТД у монокристалах CdTe та порівнювали одержані результати моделювання з наявними розрахунковими та експериментальними даними [136–145, 152–155].

Моделювання стану ТД із використанням підходу, що базується на використанні параметрів дефектоутворення знайдених «*ab initio*», зводиться до розрахунку концентрацій нейтральних дефектів за співвідношеннями (6.8)–(6.13) із використанням термодинамічних параметрів, наведених у табл. 6.2.

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). Внаслідок цього, одержані залежності концентрації ТД та холлівської концентрації вільних носіїв струму у монокристалах CdTe від тиску пари металу (рис. 6.7, 6.8). На цих рисунках для порівняння також наведені результати моделювання за тих самих технологічних умов, ансамблю ТД із 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 дефектів лише  $Te_{Cd}^0$  в області високих тисків телуру має значну

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	

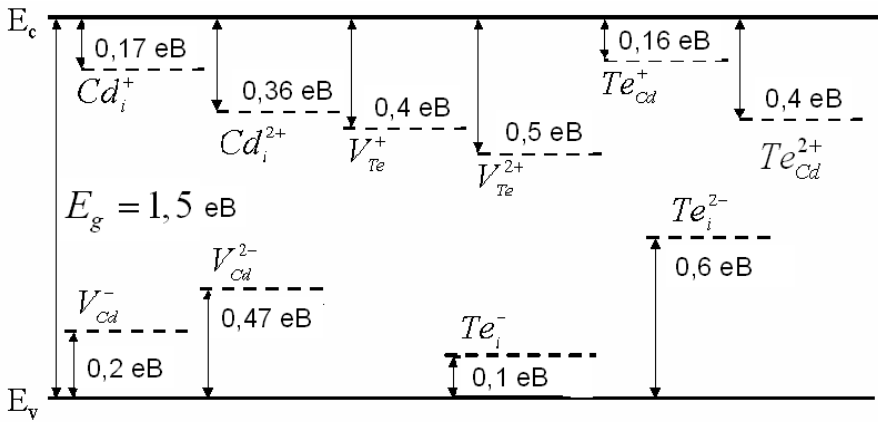


Рисунок 6.5 – Положення енергетичних рівнів власних ТД у 33 CdTe, що використані під час моделювання

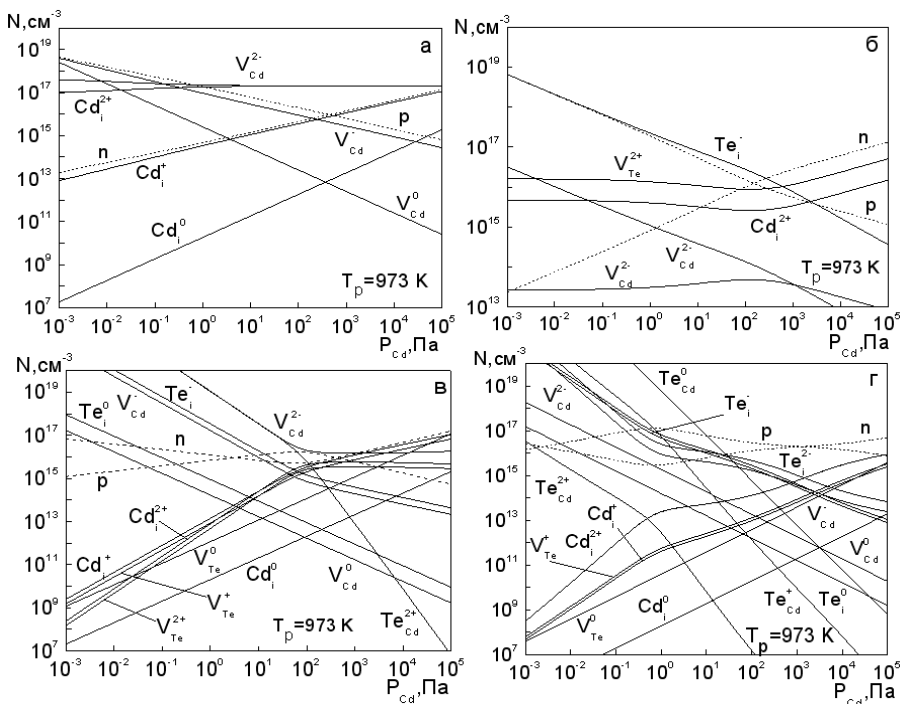


Рисунок 6.6 – Залежність концентрації ТД у монокристалах CdTe від  $P_{Cd}$  у разі повної рівноваги дефектів: розрахунки згідно з традиційним підходом – модель дефектів і константи квазіхімічних рівнянь [4, 137] (а); модель дефектів та константи квазіхімічних рівнянь [139] (б); повний спектр дефектів [151] (в); розрахунки з використанням даних, одержаних «*ab initio*» [5, 133, 145] (г)



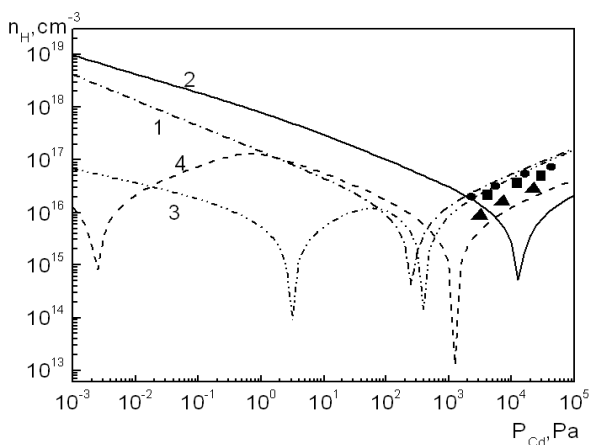


Рисунок 6.7 – Залежність холлівської концентрації носіїв у монокристалах CdTe від  $P_{Cd}$ ,  $T_p = 973$  К: розрахунки згідно з традиційним підходом: 1 – модель дефектів та квазіхімічні рівняння [4]; 2 – модель дефектів та квазіхімічні рівняння [139]; 3 – повний спектр ТД [151]; 4 – розрахунки «*ab initio*» [133, 135]. Експериментальні дані: ● – [136], ▲ – [5], ■ – [153]

концентрацію, іншими нейтральними ТД можна знехтувати. Як бачимо з рис. 6.7 існує досить істотна різниця між результатами моделювання ансамблю ТД із використанням традиційного підходу та з використанням даних, одержаних “*ab initio*”.

Необхідно зазначити, що наші розрахунки при використанні відповідних параметрів і за тих самих технологічних умов повністю збігаються, наприклад, із 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 та експериментальними даними. В області високих тисків телуру, на жаль, експериментальні результати практично не відомі. Однак саме у цій області між розрахунками, виконаними

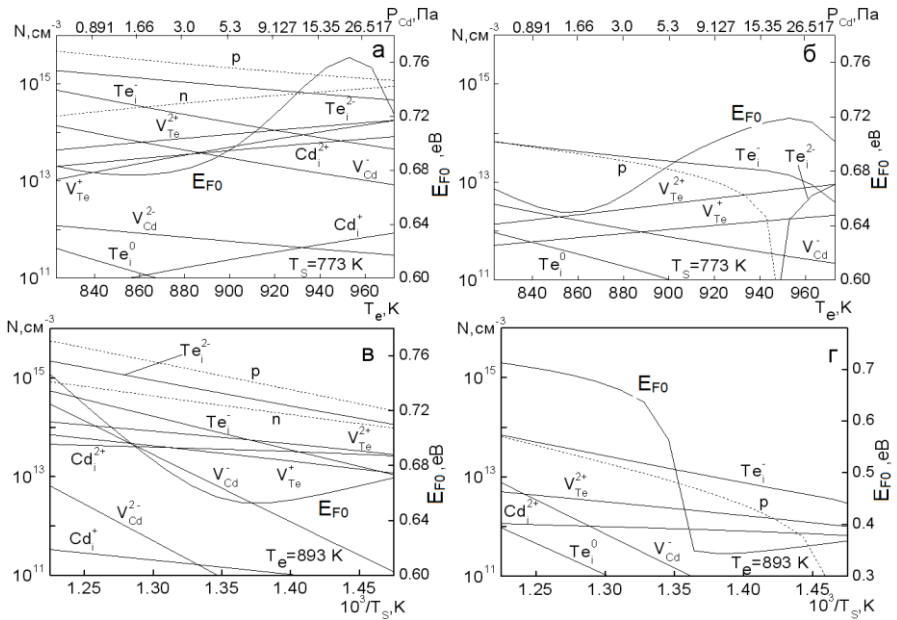


Рисунок 6.8 – Залежність концентрації ТД у плівках CdTe від  $T_e$  ( $P_{\text{Cd}}$ ): повна рівновага (а), гартування (б); та  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г). Розрахунки проведені згідно з даними Фочука [139, 140] про глибини залягання рівнів ТД у 3З матеріалу

за різними моделями, помітні великі розбіжності, що дозволяє зробити вибір найбільш достовірних із них.

Моделювання показало, що кінцевий результат, значною мірою визначається вибраними термодинамічними параметрами утворення відповідних дефектів та глибиною залягання їх енергетичних рівнів у 3З матеріалу. Однак у наш час ці параметри, визначені різними авторами методом “*ab initio*”, істотно відрізняються один від одного [151]. Це пов’язане з тим, що ці автори при розрахунках використовують різні підходи та наближення, а сам метод у наш час не дає абсолютно точних результатів.

Після апробації на монокристалах метод, що ґрунтується на використанні термодинамічних параметрів дефектоутворення, розрахованих «*ab initio*», ми застосували для моделювання стану ТД у плівках CdTe. При цьому згідно зі співвідношеннями (6.6) та (6.7) враховували дисоціацію молекул CdTe при його випаровуванні у КЗО за температури випарника.

При розрахунках використані термодинамічні параметри утворення нейтральних ТД, розраховані «*ab initio*» у [133, 135], які достатньо експериментально підтверджені у праці [5].

Для моделювання спектра заряджених ТД використовували декілька наборів значень енергій залягання ЛС у ЗЗ матеріалу: нами взяті дані Фочука [139, 140]; результати дослідження ТД методом ЕПР [128, 162, 163]; набір параметрів, складений за результатами розрахунків енергій іонізації ТД «*ab initio*» Веєм [160, 164]. Цей вибір був обумовлений таким. Результати Фочука базуються на великій кількості експериментальних даних і перевірені шляхом моделювання процесів дефектоутворення у монокристалах CdTe. Однак, як і у більшості інших праць ідентифікацію дефектних станів у [139, 140] не проводили, а відповідну глибину залягання енергетичного рівня присвоювали тому чи іншому дефекту апіорно.

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 одержати методом позитронної анігіляції [165]. Саме тому під час моделювання використовували ці дані.

Нарешті, під час моделювання ансамблю ТД був використаний набір енергій іонізації ТД, розрахованих Веєм [160, 164], як такий, що є найбільш достовірним серед теоретичних результатів.

Енергетичні положення рівнів залягання дефектів, що використовувались під час 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]. Їх аналіз свідчать, що використання різних значень  $\Delta E_i$  приводить до істотної різниці у кінцевій концентрації власних дефектів у плівках. Так, під час використання глибини залягання ЛС ТД за Фочуком (рис. 6.9) домінувальними дефектами, як у свіжосконденсованих, 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 в усьому інтервалі зміни технологічних параметрів, який ми розглядали. Плівки, крім того, повинні бути високоомними з концентрацією носіїв заряду, що не перевищує  $n = 10^{15} - 10^{16} \text{ см}^{-3}$  у свіжосконденсованих шарах і  $10^{13} - 10^{14} \text{ см}^{-3}$  у загартованих. Ці концентрації вільних носіїв відповідають заляганням рівня Фермі поблизу середини ЗЗ матеріалу.

Використання під час моделювання ансамблю ТД глибини залягання ЛС, одержаних методом ЕПР, приводить до кардинальних відмінностей у кінцевій картині. Роль домінувальних дефектів у плівках при  $T_e < 853 \text{ K}$  тепер виконують вакансії кадмію  $V_{Cd}^{2-}$ , які є акцепторами, а за більш високих температур –  $V_{Te}^{2+}$ , які є донорами. Навпаки, при  $T_s > 780 \text{ K}$  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 в усьому вивченому інтервалі режимів конденсації.

Таблиця 6.3 – Енергії залягання ЛС власних ТД, що використані під час моделювання

$E, \text{eV}$										Посилання
$E_{v+}$				$E_{c-}$						
$V_{Cd}^-$	$V_{Cd}^{2-}$	$Te_i^-$	$Te_i^{2-}$	$Cd_i^+$	$Cd_i^{2+}$	$V_{Te}^+$	$V_{Te}^{2+}$	$Te_{Cd}^+$	$Te_{Cd}^{2+}$	
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	–	–	–	–	$E_{v+} + 0,20$	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	Ця монографія

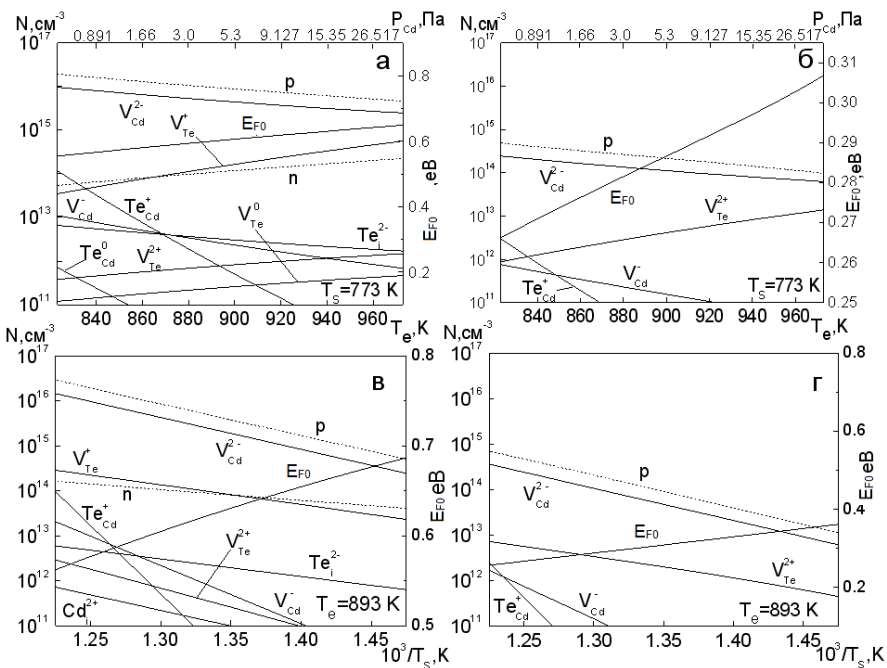


Рисунок 6.9 – Залежність концентрації ТД у плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  ( $P_{Cd}$ ): повна рівновага (а), гартування (б) та температури підкладки  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г). Розрахунки проведені з використанням енергій іонізації власних дефектів, одержаних Веєм [160, 164]

Результати розрахунків, проведених із використанням енергій залягання ЛС власних дефектів, одержаних Веєм [160, 164], наведені 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.

Експериментальні дослідження засвідчують, що плівки CdTe здебільшого є високоомними з концентрацією носіїв заряду, що не перевищує  $(10^8 - 10^{12}) \text{ см}^{-3}$ . Вони в основному

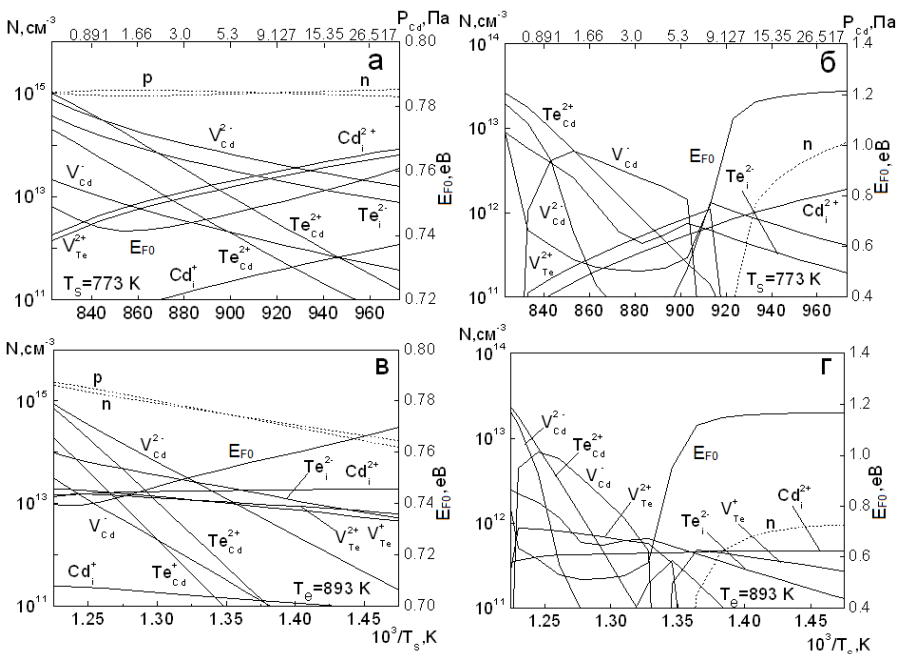


Рисунок 6.10 – Залежність концентрації ТД в плівках CdTe від температури випарника  $T_e$  ( $P_{Cd}$ ): повна рівновага (а), гартування (б) та температури підкладки  $T_s$ : повна рівновага (в), гартування (г).

Розрахунки проведені з використанням набору енергій іонізації, розробленого у даній монографії

мають  $p$ -тип провідності, але, поряд з цим, можуть бути одержані й конденсати з електронною провідністю. Ці концентрації вільних носіїв відповідають положенню рівноважного рівня Фермі поблизу середини ЗЗ матеріалу ( $E_{F0} = 0,57-0,62$  еВ). Але, як бачимо з рис. 6.9–6.10, використання під час моделювання даних про глибину залягання ЛС ТД авторів [5, 133, 135, 160, 164] забезпечує низьку концентрацію вільних носіїв струму, що є характерною рисою плівок CdTe, лише у вузькому інтервалі режимів конденсації шарів. Таким чином, використання під час моделювання енергій рівнів залягання власних дефектів, одержаних за допомогою 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 ми розробили на підставі аналізу експериментальних досліджень, проведених у цій науковій праці, та результатів, одержаних іншими авторами (табл. 6.3).

Проведені розрахунки свідчать, що домінуючими дефектами у плівках за високих температур підкладки є  $V_{Cd}^{2-}$  та  $Te_{Cd}^{2+}$  ( $T_s > 770$  К), тоді як при більш низьких температурах –  $Cd_i^{2+}$ . Переважання залежно від температури підкладки донорних чи акцепторних дефектів забезпечує зміну типу провідності плівок при  $T_s \sim 740$  К. Крім того, розрахунки свідчать про наявність досить низької концентрації вільних носіїв заряду  $10^7$ – $10^{12}$  см<sup>-3</sup> у швидко охолоджених плівках, що відповідає експериментальним результатам.

Таким чином, у цьому розділі були визначені умови одержання низькоомних та напівізолювальних плівок CdTe різного типу провідності, придатних для використання як базові шари СЕ та фотодетекторів (низькоомні плівки) або детекторів жорсткого випромінювання (напівізолювальні матеріали).

### **6.3. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у сульфіді цинку в рамках квазіхімічного формалізму**

#### **6.3.1. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у монокристаллах ZnS із використанням параметрів дефектоутворення, розрахованих «*ab initio*»**

Процеси дефектоутворення у монокристаллах ZnS є малодослідженими, а праці, присвячені вивченню цих процесів у плівках, нам не відомі зовсім.



Для дослідження стану ансамблю ТД у кристалах і плівках ZnS ми використали підходи, описані вище. Під час моделювання застосовували модель дефектоутворення, запропоновану 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 враховує міжвузлові атоми за підґраткою халькогеніду та антиструктурні дефекти.

На першому етапі, з метою вибору найбільш адекватних констант квазіхімічних рівнянь, що дають відповідність між теоретичними і експериментальними результатами, ми розрахували ансамбль ТД у монокристалічних зразках ZnS. У разі 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 лише вакансії та міжвузлові атоми цинку та вакансії сірки.

$$n + [V_{Zn}^-] + 2[V_{Zn}^{2-}] = p + [V_S^+] + 2[V_S^{2+}] + [Zn_i^+] + 2[Zn_i^{2+}]. \quad (6.20)$$

Під час моделювання також враховували температурну залежність ширини ЗЗ зони бінарної сполуки ZnS у вигляді  $E_g(T) = E_g(0) - 5,263 \cdot 10^{-4} \cdot T$  [1, 150, 166, 167].

Енергію іонізації всіх заряджених дефектів, як і енергію рівня Фермі при подальших розрахунках відраховували від дна зони провідності. Фактори спінового виродження рівнів брали такими, як і для дефектів у CdTe.

Як енергії іонізації заряджених ТД під час моделювання ми використали дані четвертої моделі Морозової (IV у таблиці 6.4).

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]

При розрахунках концентрації власних дефектів у випадку гартування напівпровідника до системи рівнянь, що описують рівноважний стан дефектів, додавалися нові рівняння, які мають такий 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 разі повної рівноваги.

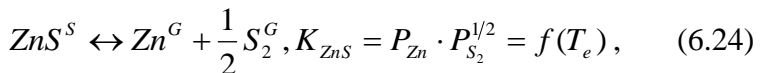
Результати числового розрахунку концентрації ТД, носіїв заряду та положення рівня Фермі у монокристалах ZnS залежно від  $P_{Zn}$  для випадків повної рівноваги дефектів та їх гартування наведені у [168].

Аналіз одержаних даних свідчить про достатньо добре узгодження наших результатів із результатами моделювання Морозової [130]. Більше того, ці результати узгоджуються з експериментальними даними визначення концентрації вільних носіїв заряду в монокристалічному матеріалі. Це підтверджує реалістичність вибраної нами моделі дефектоутворення, констант квазіхімічних реакцій, а також енергії іонізації власних дефектів.

### **6.3.2. Розрахунок ансамблю точкових дефектів у плівках ZnS для випадків повної рівноваги та гартування**

Під час дослідження процесів дефектоутворення у монокристалах ZnS було виявлено, що модель дефектоутворення з відповідним набором констант квазіхімічних рівнянь, яку ми використали, досить добре описує експериментальні дані [130]. Це дозволяє застосувати її для розрахунку ансамблю ТД у 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 такого вигляду:



$$\frac{1}{2} S_2^G \leftrightarrow S_S^0 + V_{Zn}^0, \quad \frac{[V_{Zn}^0]}{P_{S_2}^{1/2}} = K_{S_2} = f(T_S). \quad (6.25)$$

Під час моделювання ансамблю ТД у плівках, як і для монокристалів, розглядали два крайніх випадки: повної рівноваги і гартування дефектів.

Розв'язували модернізовану систему квазіхімічних рівнянь за методикою, що застосовувалася у випадку вивчення процесів дефектоутворення у монокристалах. Однак при розрахунках ансамблю ТД у плівках використовували уточнені з використанням методів фотолюмінесценції, вимірювання ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$ -залежностей значення енергій активації дефектів. Відповідні значення глибини залягання енергетичних рівнів власних дефектів ( $\Delta E_n$ ) наведені у таблиці 6.4. Результати розрахунку ансамблю ТД у плівках ZnS залежно від температури випарника  $T_e$  за різних сталих температур підкладки  $T_s$  наведені на рис. 6.11. На рисунку 6.12 наведені результати моделювання рівноваги дефектів залежно від температури підкладки  $T_s$  за різних сталих температур випарника  $T_e$ . Інтервали температур  $T_e$ ,  $T_s$ , використаних під час моделювання, відповідали реалізованим експериментально.

Як бачимо з рисунків, концентрація вільних носіїв заряду, ТД і положення рівня Фермі в плівках істотно залежать від їх умов нанесення. В усьому дослідженому діапазоні фізико-технологічних умов конденсації домінувальними ТД у шарах, як не загартованих, так і загартованих, є  $V_{Zn}^-$  та  $Zn_i^{2+}$ . Крім того, у помітній концентрації у повільно охолоджених плівках наявні двозаряджені вакансії цинку  $V_{Zn}^{2-}$ , тоді як у загартованих шарах спостерігаються міжвузлові однозаряджені атоми цинку  $Zn_i^+$ . Усі нейтральні ТД мають концентрацію істотно нижчу, ніж заряджені, і їх наявністю у сполуці можна знехтувати.

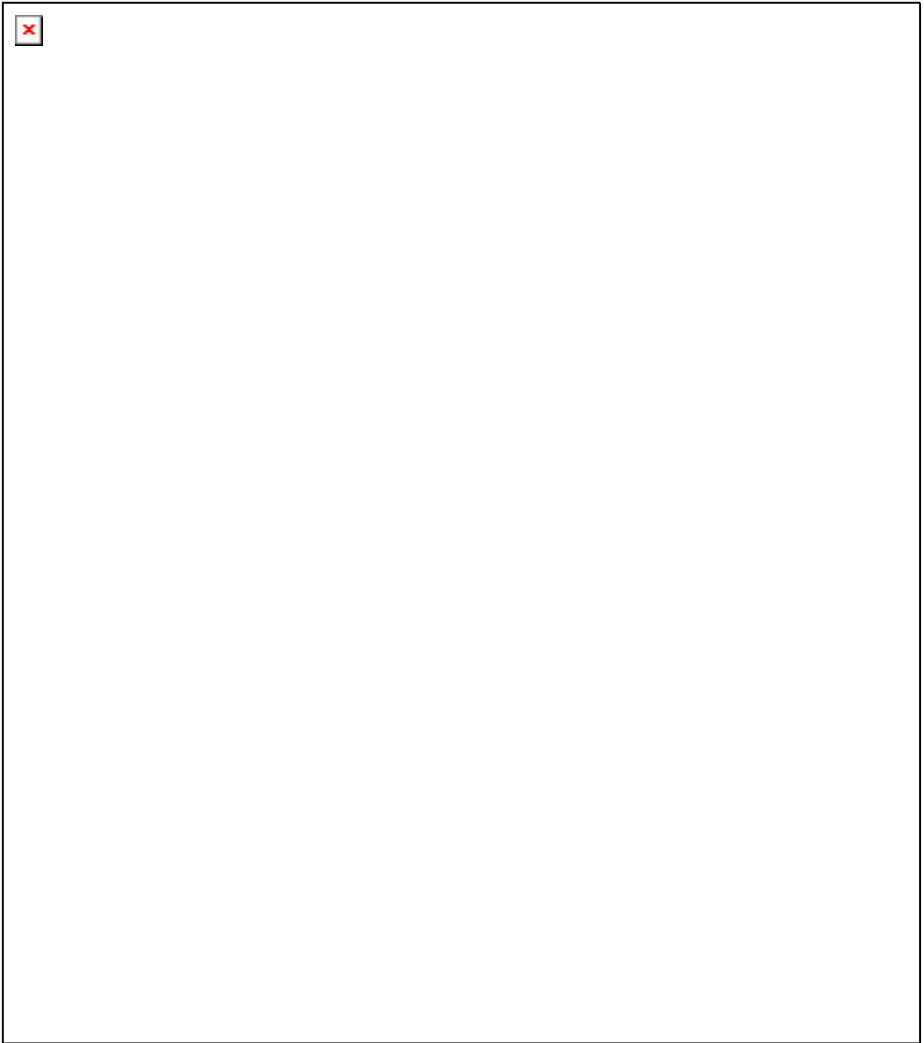


Рисунок 6.11 – Залежність концентрації власних ТД, носіїв струму та енергії Фермі в плівках ZnS від температури випарника  $T_e$  за різних температур підкладки  $T_s$  (623 К (а, б); 773 К (в, г); 973 К (д, є)): повна рівновага (а, в, д); гартування до  $T = 293$  К (б, г, є)

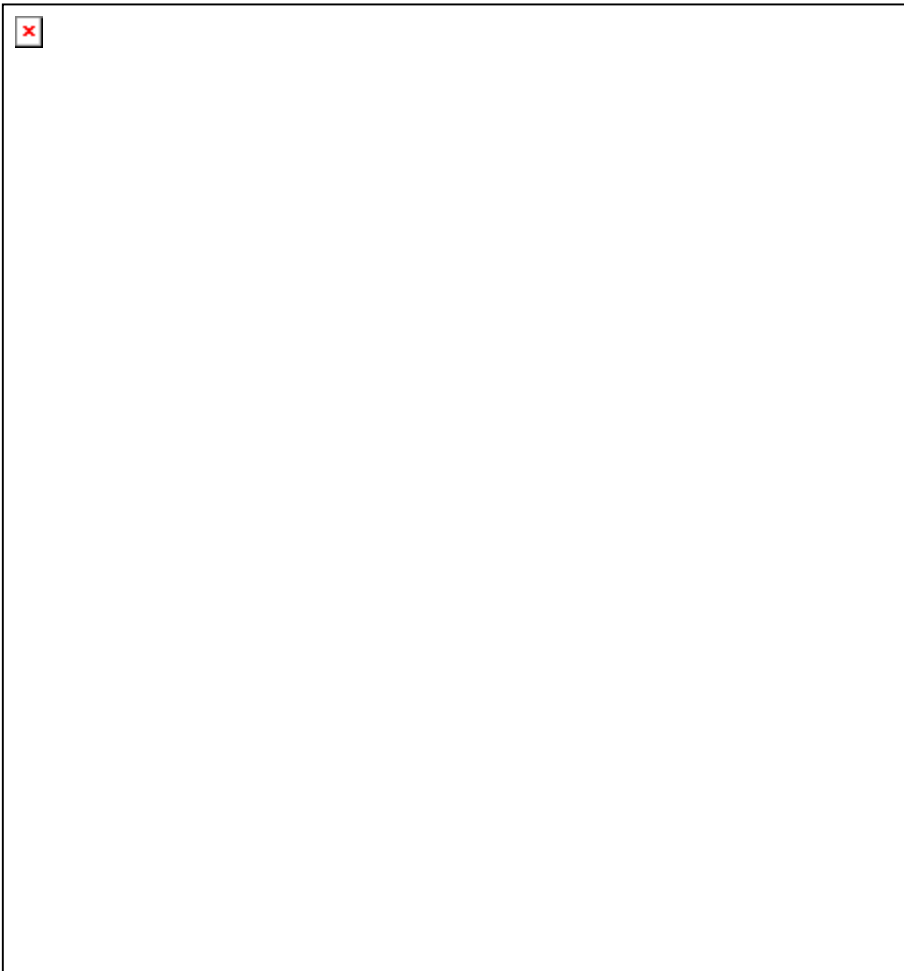


Рисунок 6.12 – Залежність концентрації ТД у плівках ZnS від зворотної температури підкладки  $10^3/T_s$  за різних температур випарника  $T_e$  (1 223 К (а, б); 1 373 К (в, г); 1 473 К (д, є)): повна рівновага (а, в, д); гартування до  $T = 293$  К (б, г, є)

Як свідчать результати розрахунків, практично в усьому інтервалі температур конденсації плівки ZnS мають електронний тип провідності. Лише у вузькому інтервалі температур підкладки при  $T_s < 600\text{--}550$  °С та при встановленні рівноважного

стану дефектів можуть бути одержані 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 сульфїду цинку завжди мають електронний тип провідності.

Як бачимо 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 із даними, які одержали ми й інші автори під час вимірювання провідності плівок ZnS [172–176].

Результати моделювання ансамблю ТД у плівках ZnTe та ZnSe наведені нами у працях [121, 177]. Одночасно були використані моделі дефектоутворення, запропоновані у [4, 130]. Як зазначалося раніше, вони є значно простішими, ніж використані, для вивчення процесів дефектоутворення у телуриді кадмію, тому для розрахунків ми брали програмний комплекс, який застосовувався для плівок CdTe.

## РОЗДІЛ 7

### ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ ЛОКАЛІЗОВАНИХ СТАНІВ У НАПІВІЗОЛЮВАЛЬНИХ СПОЛУКАХ $A_2V_6$

#### 7.1. Загальна характеристика вольт-амперних характеристик та $\sigma$ – $T$ -залежностей плівок халькогенідів

##### 7.1.1. Вольт-амперні характеристики багатошарових структур на основі плівок ZnTe

Використання плівок халькогенідів у ряді приладових структур потребує вивчення їх електрофізичних характеристик, як-от питомого опору, концентрації та енергії залягання пасток та глибоких рекомбінаційних центрів тощо.

Методика одержання 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 ми вимірювали темнові ВАХ сендвіч-структур – струмопровідна підкладка – плівка – верхній струмознімальний контакт за різних температур вимірювання. Крім того, досліджували залежності провідність – температура на омичній, а у ряді випадків квадратичній ділянках ВАХ. Енергії залягання донорних (акцепторних) центрів у плівках знаходили із залежностей  $\lg \sigma = f(10^3/T)$ , враховуючи той факт, що вони описуються рівнянням Арреніуса.

Для дослідження енергетичного спектра ЛС ТД у плівках сполук ми також застосували метод, що базується на аналізі ВАХ у режимі СОПЗ. Із [1, 17–21] відомо, що нелінійності і стрибки струму на ВАХ дозволяють визначити такі важливі характеристики пасток, як їх енергія залягання у 33 напівпровідника ( $E_t$ ) та концентрація ( $N_t$ ). Для одержання інформації про параметри ЛС ми поряд із традиційним



модельним підходом використовували 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 напівізолювальних матеріалів, якими внаслідок свого високого опору є тонкі шари сполук  $A_2B_6$ .

Типові ВАХ, виміряні за різних температур, багаточисельних структур, де плівки  $ZnTe$  були одержані за різних фізико-технологічних умов конденсації, побудовані у подвійних логарифмічних координатах, наведені на рис. 7.1. На цьому рисунку також подані  $\sigma$ – $T$ -залежності, зняті на омічній ділянці кривих струм – напруга.

Як бачимо з рисунка 7.1, залежності провідність–температура низькотемпературних конденсатів містять дві – три лінійні ділянки, кут нахилу яких до осі  $T$  (рис. 7.1 а) зменшується зі зменшенням температури вимірювання. Такі особливості  $\sigma$ – $T$  залежностей є характерними для матеріалу, який містить декілька видів акцепторних домішок із різною енергією активації. У випадку  $ZnTe$ , який має  $p$ -тип провідності, вигляд цих залежностей визначається саме акцепторними домішками. Дещо інший вигляд мають  $\sigma$ – $T$ -залежності високотемпературних 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 компенсованих матеріалів [2, 3]. Вплив компенсації починає проявлятися за достатньо низьких температур 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.

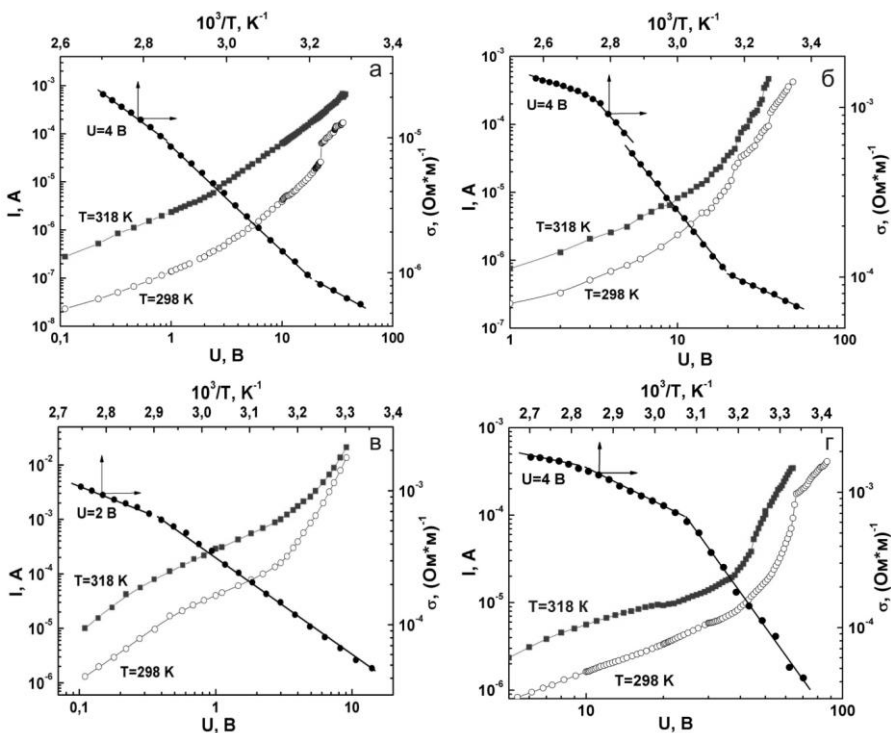


Рисунок 7.1 – Типові ВАХ структур Cr/ZnTe/Ag, виміряні за різних температур, та залежності  $\lg \sigma - 1/T$ , одержані на омичній ділянці ВАХ. Плівки одержані при  $T_e = 973$  К та  $T_s$ : 673 К (а), 773 К (б), 823 К (в), 873 К (г)

Більш докладну інформацію про параметри ЛС в напівпровідникових плівках ZnTe можна одержати, знімаючи температурні залежності провідності на омичній та квадратичній ділянках ВАХ [1, 9, 23]. Кут нахилу прямих до осі  $1/T$  на квадратичній ділянці дозволяє безпосередньо знайти енергію залягання пасток, при цьому виявляються більш мілкі рівні, оскільки глибокі – заповнені носіями заряду, інжекттованими у матеріал із контакту. Відповідні ВАХ і  $\sigma - T$ -залежності симетричних структур Cr/ZnTe/Cr наведені на рис. 7.2.

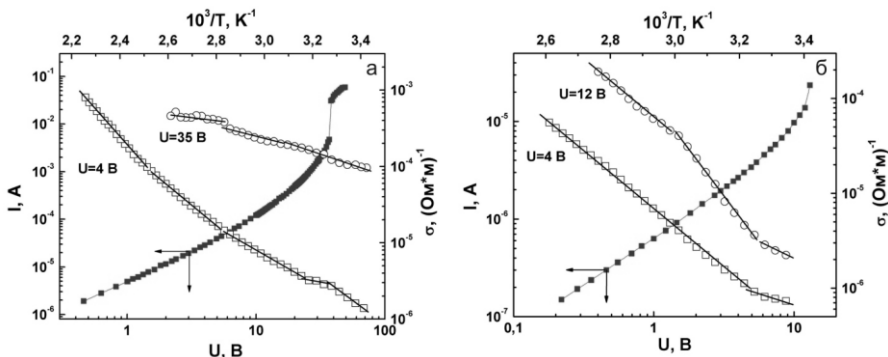


Рисунок 7.2 – Типові ВАХ структур Cr/ZnTe/Cr, виміряні за кімнатної температури та залежності  $\log \sigma - 1/T$ , одержані на омичній і квадратичній ділянках ВАХ. Плівки ZnTe, одержані при  $T_e = 973$  К і  $T_s$ : 623 К (а); 723 К (б)

Як показали наші дослідження, вигляд ВАХ багат шарових структур метал – напівпровідник – метал визначається умовами конденсації плівок халькогеніду, їх кристалічною структурою та матеріалом верхнього і нижнього струмознімальних контактів.

Установлено, що у разі структур Cr/ZnTe/Ag за різної полярності напруги зміщення, їх ВАХ були несиметричними. При цьому коефіцієнт випрямлення при  $U \sim 0,5$  найчастіше становив 3–5. Прямому напряду відповідала негативна полярність на верхньому струмознімальному контакті. Такі особливості ВАХ свідчать про утворення в структурі потенціального бар'єра 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 проходженням СОПЗ. Цей ефект є нетривіальним і потребує пояснення.

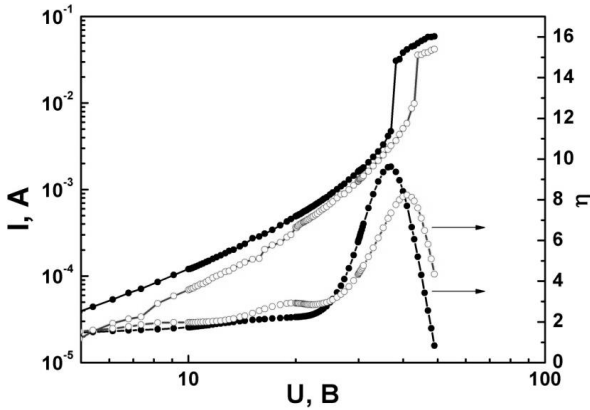


Рисунок 7.3 – Типова ВАХ СОПЗ багат шарової структури Cr/ZnTe/Cr у подвійних логарифмічних координатах при прямій (·) та оберненій (–) полярності напруги зміщення та результати її диференціювання. Плівка ZnTe одержана при  $T_e = 973$  К та  $T_s = 623$  К

Раніше, за допомогою моделювання, ми показали, що асиметрія ВАХ за великої напруги зміщення може бути обумовлена просторовою неоднорідністю зразків, пов'язаною з наявністю приповерхневих ЛС або розподілом пасток за товщиною зразків.

На ВАХ високотемпературних конденсатів ZnTe, в області високої напруженості поля, спостерігалось декілька лінійних ділянок із різним нахилом до осі напруги. Зазвичай, виділялися ділянки із залежністю струму від напруги видів:  $I - U$ ,  $I - U^2$ ,  $I - U^{3-5}$ ,  $I - U^{8-10}$ . У ряді випадків після суперлінійних ділянок спостерігалася 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 переходили у низькоомний стан. Перехід високоомних зразків у низькоомний стан при цьому здебільшого 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 графіка визначає кут нахилу кривої струм – напруга у подвійному логарифмічному масштабі до осі напруги. Залежності  $\eta - \log U$  ми одержали шляхом знаходження похідної у кожній експериментальній точці ВАХ СОПЗ. Як вже зазначалося, математично задача зводилася до побудови згладжувального кубічного сплайна, що апроксимує експериментальні дані та його диференціювання у вузлах.

Вигляд одержаних ВАХ за високої напруги зміщення є характерним для монополярної інжекції носіїв, але оскільки згідно з [1, 24] існують інші механізми струмоперенесення через зразки, що призводять до якісно подібних залежностей струм – напруга, ми проводили додаткову їх ідентифікацію згідно з процедурою, описаною раніше. Для цього здійснювався сумісний аналіз залежностей  $\lg I - \lg U$ ,  $\eta - \lg U$  та  $\log \eta - \lg U$ . Це дозволило ідентифікувати відповідні високовольтові механізми зарядоперенесення у зразках серед інших, а у деяких випадках визначити їх тип.

Для подальшого уточнення домінуючого механізму струмоперенесення через базовий шар ZnTe ми в екстремальних точках залежності  $\eta - \lg U$  розраховували коефіцієнт дискримінації  $Q_{ext}$  та порівнювали його з коефіцієнтами, характерними для інших механізмів [24]. Для цього використовували програми, розроблені у [178]. Унаслідок розрахунків з'ясувалося, що практично в усіх випадках  $Q_{ext} > 10^6 - 10^7$ , що істотно перевищує значення  $Q_{ext}$ , характерні для польової іонізації пасток, а також бар'єрного механізму зарядоперенесення у матеріалі. Це відповідно до [24] свідчить про те, що екстремуми на залежностях  $\eta - \lg U$  обумовлені заповненням пасток, розміщених у плівках ZnTe, носіями

заряду, інжектіваними 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 одержані при  $T_s > 573$  К, були обумовлені саме механізмом СОПЗ.

Вигляд ВАХ низькотемпературних конденсатів ZnTe часто визначався механізмом Пула – Френкеля [180], який виникає при зниженні термічної енергії іонізації мілких кулонівських центрів за наявності зовнішнього електричного поля. Унаслідок цього зростає ймовірність вивільнення носіїв заряду, захоплених ЛС. Відомо, що густина інжекційного струму при цьому описується виразом [179], який лінійнується у координатах  $\lg I/U - U^{1/2}$ . Саме така залежність і спостерігалася експериментально. Це свідчить про наявність у зразках високої концентрації достатньо мілких ЛС.

У подальшому ми обробляли лише ВАХ, вигляд яких був обумовлений інжекційними струмами. На таких кривих, ділянці стрімкого зростання струму, зазвичай, передує ділянка з майже квадратичною залежністю  $I$  від  $U$  (рис. 7.1 – 7.3). Це є характерним для СОПЗ у разі наявності у зразках мілких пасток [1].

На кривих  $\eta - \lg U$ , одержаних унаслідок оброблення ВАХ СОПЗ, зазвичай спостерігалася 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  $\eta - \log U$  виявлялись практично горизонтальні ділянки з майже сталим нахилом  $\eta > 2$ . Особливості ВАХ у першому і другому випадках можна пояснити наявністю у зразках ряду моноенергетичних або близьких до моноенергетичних пасток із різною глибиною

заягання і концентрацією, або наявністю експоненціального (чи іншої форми) розподілу ЛС за енергією. Особливі точки ВАХ СОПЗ та суперлінійні ділянки у подальшому були використані нами для розрахунку параметрів пасток у матеріалі, омічні ділянки – для розрахунку питомої провідності шарів ZnTe, що становила  $\sigma = (10^4 - 10^5) \text{ Ом} \cdot \text{м}$ .

Результати вивчення енергетичного спектра пасток у плівках ZnTe можна 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. В області температурної активації провідності звичайно спостерігалось 2–3 лінійні ділянки, з нахилу яких визначали енергію активації провідності. Розрахунки цієї енергії проводили відповідно до виразів, характерних для некомпенсованих або компенсованих напівпровідників, залежно від вигляду залежності  $\lg \sigma - 1/T$  [2, 3, 13, 14]. Необхідно зазначити, що ми [180], як і автори [181], спостерігали зміну провідності досліджуваних зразків під час їх відпалювання у процесі знімання  $\sigma - T$ -залежностей. Зазвичай стабілізація властивостей плівок ZnTe спостерігалась після другого відпалювання до 373 К, саме після цього визначалися параметри ЛС у матеріалі.

### **7.1.2. Вольт-амперні характеристики багатошарових структур на основі плівок CdTe**

Дослідження плівок інших халькогенідів здійснювали аналогічно до того, як це було описано для шарів ZnTe. Типові ВАХ від багатошарових структур, де плівки CdTe одержані за різних фізико-технологічних умов конденсації, наведені на рис. 7.4. Як показали дослідження, вид цих ВАХ, як і у випадку плівок ZnTe, визначався умовами конденсації базового матеріалу, його кристалічною структурою, матеріалами струмознімальних контактів.

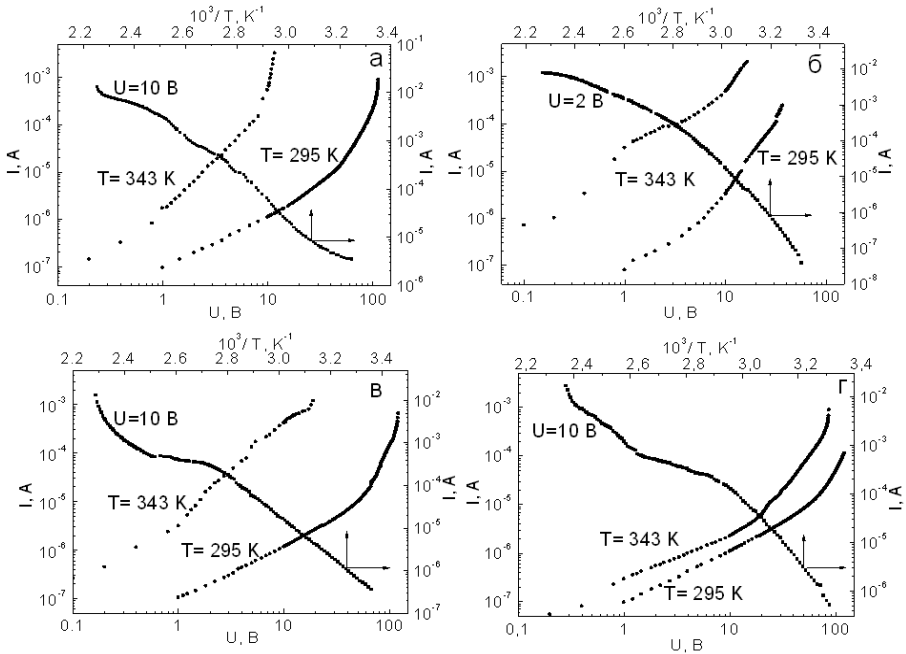


Рисунок 7.4 – Типові ВАХ структур Ag/CdTe/Mo, виміряні за різних температур  $T$  та  $\log \sigma - 1/T$  залежності, одержані за напруги  $U$ . Плівки CdTe одержані при  $T_e = 893$  K та  $T_s$ : 773 K (а); 748 K (б); 723 K (в); 673 K (г)

Установлено, що у випадку дослідження структур Ag/CdTe/Mo за малої напруги зміщення і різної полярності їх ВАХ були майже симетричними. При цьому коефіцієнт випрямлення при  $U \sim 0,5$  В не перевищував 5, а здебільшого становив 1,1–2,0. Прямому напрямку відповідала негативна полярність на верхньому струмознімальному контакті. ВАХ структур In/CdTe/Mo при прямому зміщенні в основному були подібні до залежності струм – напруга сендвіч-структур Ag/CdTe/Mo, але за зворотної напруги на ВАХ спостерігалися сублінійні ділянки, що свідчить про випрямлення струму у



зразках внаслідок існування запірного шару.

На ВАХ високотемпературних конденсатів за негативної полярності на верхньому контакті спостерігалось декілька лінійних ділянок із 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). Методику диференціювання ВАХ ми описали раніше.

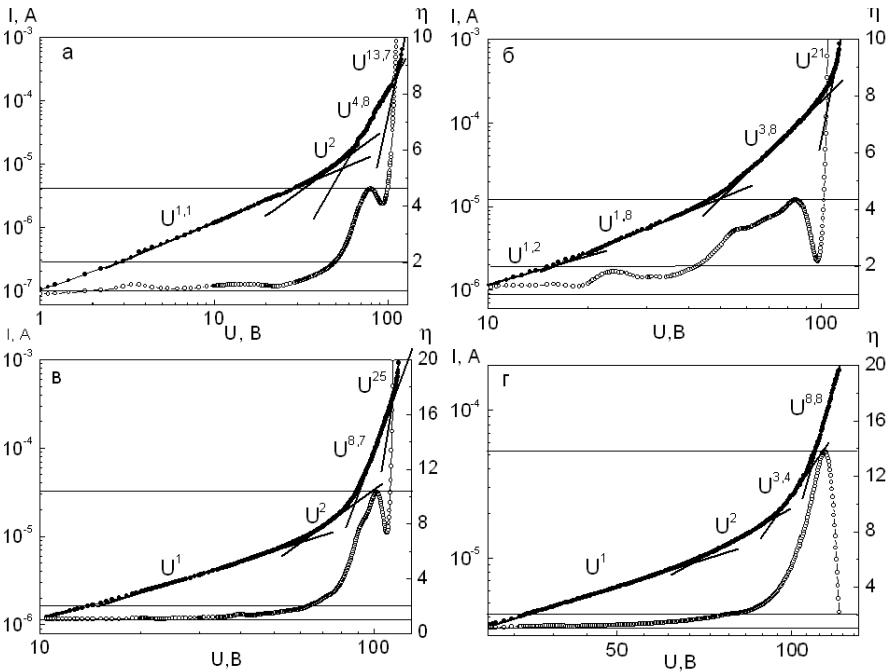


Рисунок 7.5 – ВАХ СОПЗ багатшарових структур Ag/CdTe/Mo у подвійних логарифмічних координатах і результати їх диференціювання. Плівки CdTe, одержані при  $T_e = 893$  К і різних  $T_s$ :

723 К (а); 773 К (б); 798 К (в); 823 К (г)

Вигляд ВАХ досліджених зразків у разі зміни полярності та

величини напруги зміщення  $U$ , як показано у [182, 183], можна пояснити у рамках діодної моделі за наявності високого послідовного опору діода. У цьому разі за низьких напруг струм через багат шарову структуру обмежується збідненим шаром на межі поділу плівка CdTe – провідна підкладка, а за високих напруг – 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  $\text{TeO}_2$ , що дуже швидко утворюється на поверхні CdTe за винесення плівок на повітря, що встановлено нами раніше.

Вигляд одержаних ВАХ за високої напруги зміщення є характерним для монополярної інжекції носіїв, але для уточнення механізму зарядоперенесення ми проводили додатковий аналіз кривих, аналогічний до того, що здійснювався для плівок ZnTe. Залежності  $\lg \eta - \lg U$ , що 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 з коефіцієнтами, характерними для інших механізмів зарядоперенесення, наведені у таблиці 7.1, однозначно свідчать, що особливості цих ВАХ обумовлені саме механізмом СОПЗ.

Високопольові механізми зарядоперенесення (ефект Пула – Френкеля чи інші) у плівках CdTe, як свідчить аналіз залежностей  $\lg \eta - \lg U$ , спостерігалися лише за напруги, близької до переходу структур у низькоомний стан. Перехід високоомних зразків у низькоомний стан під час цього здебільшого, як і для плівок ZnTe, був незворотним.

Як уже зазначалося, подальшому обробленню піддавалися лише ВАХ, вигляд яких обумовлений СОПЗ [9, 23, 184]. На кривих  $\eta - \lg U$ , одержаних унаслідок оброблення ВАХ СОПЗ,

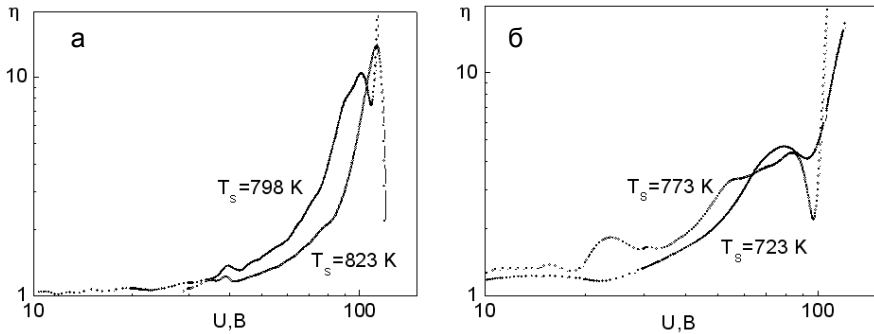


Рисунок 7.6 – Залежності  $\log \eta - \log U$ , що використовувалися для ідентифікації режимів перенесення у багатошарових структурах Ag/CdTe/Mo, з базовим шаром CdTe, одержаним при  $T_e = 893$  К та за різних температур підкладки  $T_s$

Таблиця 7.1 – Результати ідентифікації механізмів зарядоперенесення через зразки

Режим конденсації плівки	Номер максимуму	$U, В$	$\eta$	$Q_{BE}$	$Q_{PI}$	$Q_{ext}$	Механізм зарядоперенесення
$T_s = 723$ К, $T_e = 893$ К	1	79,5	4,6	6,4	18,5	1 980 460,4	СОПЗ
$T_s = 748$ К, $T_e = 893$ К	1	14,4	3,9	15,9	15,5	259 767,3	СОПЗ
	2	32,3	6,3	81,8	25,3	131 352,7	СОПЗ
$T_s = 773$ К, $T_e = 893$ К	1	84,3	4,3	4,4	17,3	1 075 780,9	СОПЗ
$T_s = 798$ К, $T_e = 893$ К	1	102,3	10,3	625,6	41,1	1 766 607,7	СОПЗ
$T_s = 823$ К, $T_e = 893$ К	1	113,7	13,8	6 721,8	55,1	2 872 623,4	СОПЗ

від структур із шаром CdTe, зазвичай, спостерігалось 1–4 максимуми. Їм на  $I - U$ -залежностях відповідали ділянки стрімкого зростання струму, обумовлені заповненням пасток. У цих точках  $\eta_{ext}$  найбільш часто набувало значення 4–8.

На залежності  $\eta - \lg U$  також виявлялися ділянки з майже постійним нахилом  $\eta > 2$ . Як уже зазначалося, такі особливості ВАХ можна пояснити наявністю у зразках ряду моноенергетичних або близьких до моноенергетичних пасток із різною глибиною залягання і концентрацією або наявністю експоненціального (чи іншої форми) розподілу ЛС за енергією.

Як показано раніше та у працях [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 знаходилася згідно з положенням максимуму на залежності  $h(E)$ , а концентрація визначалася за площею під кривою (дивись співвідношення (3.25) – (3.26)). Для оброблення експериментальних даних ми в основному використовували низькотемпературне наближення методу ІС [178, 186, 187]. При цьому застосовували як точні, так і спрощені співвідношення методу. Ми використовували також модельні уявлення, розвинуті у [1, 17], що ґрунтуються на параболічній апроксимації ступеня ВАХ. Це дозволило нам істотно підвищити достовірність одержаних результатів, а також уникнути похибок, пов'язаних із некоректністю операції диференціювання, що використовується під час оброблення ВАХ. Деякі результати реконструкції енергетичного розподілу пасток у зразках із використанням методу ІС наведені на рис. 7.7.

Результати вивчення енергетичного спектра 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 бачимо з цього рисунка, для досліджених сендвіч-структур в області високих температур має місце активаційна залежність провідності, яка при зниженні  $T$  переходить у безактиваційну.

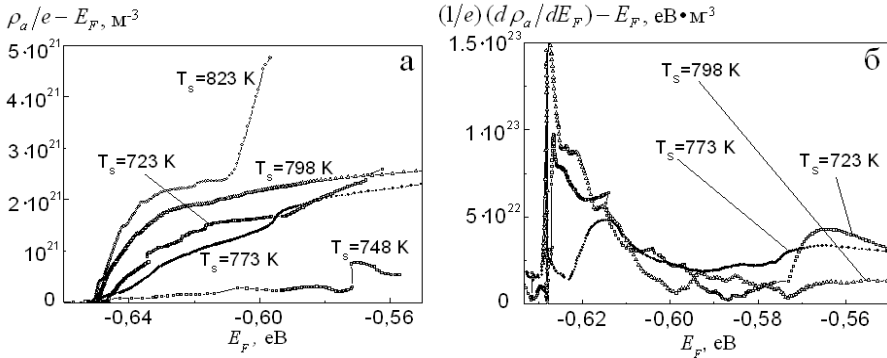


Рисунок 7.7 – Типові диференціальні криві  $\rho_a/e - E_F$  (а) та  $\frac{1}{e} \frac{d\rho_a}{dE_F} - E_F$  (б), одержані внаслідок оброблення ВАХ СОПЗ

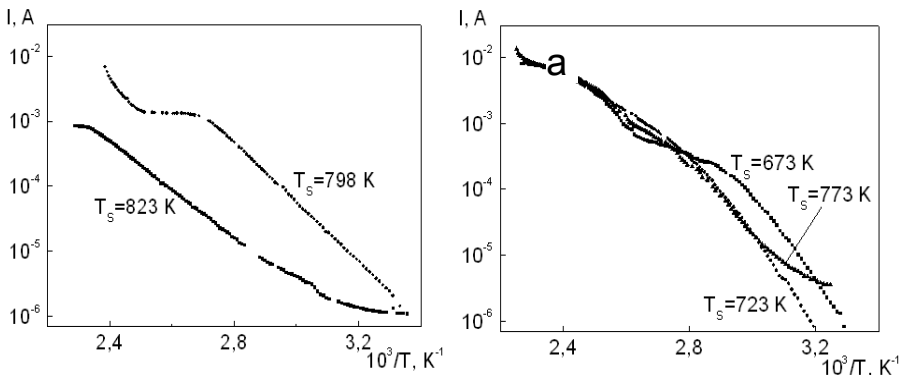


Рисунок 7.8 – Типові залежності  $\log \sigma - 1/T$  зняті на омичній ділянці ВАХ сендвіч структур Ag/CdTe/Мо. Плівки CdTe, одержані при  $T_e = 893$  K та за різних температур підкладки  $T_s$

В області температурної активації провідності спостерігалось 2–4 лінійні ділянки, розділені ділянкою насичення домішок, де нахил лінії визначався температурною залежністю рухливості носіїв. Енергію активації провідності ми визначали на кожній лінійній ділянці кривої  $\lg \sigma - 1/T$  ( $\lg \sigma T^{-3/2} - 1/T$ ). Розрахунки активаційної енергії проводили у відповідно до виразів, характерних для некомпенсованих або компенсованих напівпровідників, залежно від вигляду функції  $\lg \sigma - 1/T$  [13, 14].

### **7.1.3. Вольт-амперні характеристики 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 набувати 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 омічній ділянці кривих струм – напруга плівок ZnS, одержаних за різних фізико-технологічних умов конденсації, наведені на рис. 7.9.

Встановлено, що ВАХ високотемпературних конденсатів ZnS у подвійному логарифмічному масштабі були подібними до таких від плівок ZnTe та CdTe. На цих залежностях спостерігалось декілька лінійних ділянок із різним нахилом до осі напруги:  $I - U$ ,  $I - U^2$ ,  $I - U^{3-7}$  та  $I - U^{9-11}$ . Як зазначалося раніше, така зміна кутів нахилу ВАХ при підвищенні напруги зміщення є характерною для заповнення моноенергетичних

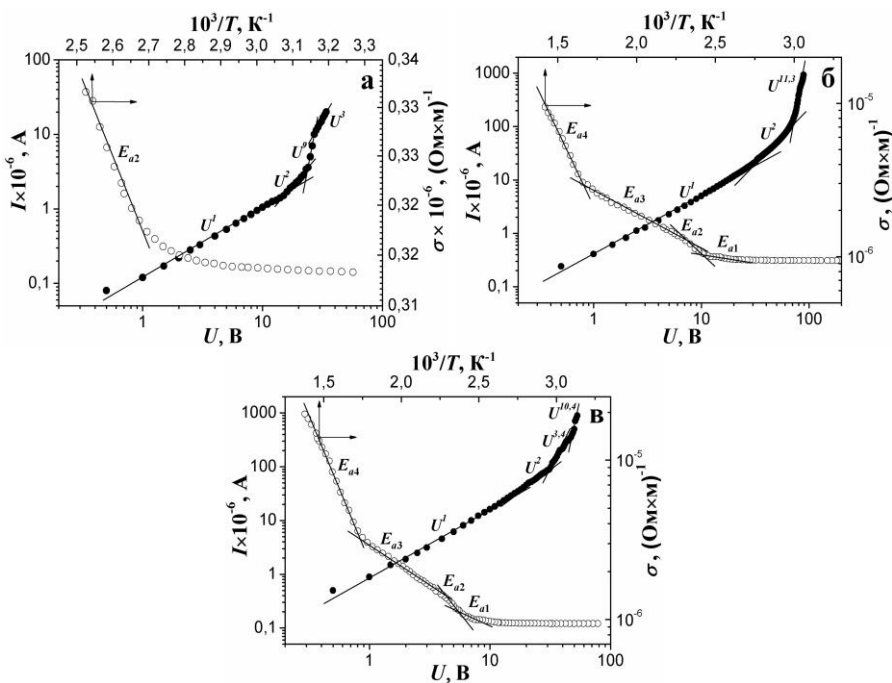


Рисунок 7.9 – Типові ВАХ структур In/ZnS/Mo, одержані за кімнатної температури, та  $\lg \sigma - T$ -залежності, зняті на омичній ділянці ВАХ. Плівки ZnS, одержані в різних технологічних умовах ( $T_e = 1173$  K):  $T_s = 523$  K (а); 590 K (б); 673 K (в)

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, що відповідає області насичення мілких домішок. Такі особливості  $\sigma - T$ -залежностей є характерними для матеріалу, що містить декілька видів донорних домішок із різною енергією активації.

Необхідно зазначити, що для плівки, нанесеної при  $T_s = 523$  К (рис. 7.9 а) ми не змогли 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, одержаних за більших температур конденсації (рис. 7.9 б, в), характерною є наявність 4–5 лінійних ділянок. Крім того, на  $\sigma - T$ -залежностях таких зразків спостерігаються ділянки, де кут нахилу з підвищенням температури вимірювання не зменшується, а, навпаки, збільшується. Це явище, як уже зазначалося, є характерним для скомпенсованих матеріалів [2, 3, 13, 14] і свідчить про наявність у матеріалі поряд із донорними акцепторних центрів.

Для вивчення впливу відпалювання на електрофізичні властивості плівок ZnS ми провели дослідження  $\sigma - T$ -залежності зразка халькогеніду як під час його нагрівання, так і під час охолодження. 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, що свідчить про зміну ансамблю ТД у плівці під час її відпалювання.

## **7.2. Визначення параметрів локалізованих станів плівок халькогенідних сполук із вольт-амперних характеристик струмів, обмежених просторовим зарядом і $\sigma - T$ -залежностей**

### **7.2.1. Параметри локалізованих станів у плівках ZnTe**

Результати розрахунків параметрів ЛС у конденсатах ZnTe, одержаних у різних фізико-технологічних умовах, обчислені з ВАХ шляхом їх аналізу, наведені в таблиці 7.2. Цим методом у



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	$N_t$ , см <sup>-3</sup> ,	$E_t$ , eВ	$N_t$ , см <sup>-3</sup> ,
$T_s = 623$ 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	$1,1 \cdot 10^{15}$ (-)	-	-

плівках ZnTe виявляється ряд груп пасток із найбільш ймовірною глибиною залягання, що становить  $E_{t1} = 0,21$  eВ;  $E_{t2} = 0,32$ – $0,34$  eВ,  $E_{t3} = 57$  eВ;  $E_{t4} = 0,41$ – $0,42$  eВ;  $E_{t5} = 0,89$  eВ. Точність розрахунків глибини залягання пасток, не перевищувала  $kT$ , тобто  $0,026$  eВ за кімнатної температури. Концентрація знайдених ЛС лежить в інтервалі  $N_t = 10^{14} - 10^{15}$  см<sup>-3</sup>. У більшості зразків домінувальними пастками, які в основному визначали вигляд ВАХ СОПЗ, є ЛС з енергією  $E_t = 0,32$ – $0,33$  eВ.

В останньому рядку таблиці 7.2 наведені результати розрахунку параметрів пасток у зразках із симетричними контактами Cr/ZnTe/Cr. Знімання ВАХ проводили при прямій та зворотній напрузі зміщення (плюс або мінус на верхньому контакті), прикладеній до зразка. Як бачимо з таблиці, одержані значення пара-

метрів ЛС дещо відрізняються між собою. Цю відмінність, як зазначалося раніше, 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 покращання якості плівок при збільшенні їх товщини.

Інтервал сканування спектра ЛС у плівках ZnTe визначався положенням рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$ , тобто його положенням за відсутності інжекції носіїв у зразок (на омічній ділянці ВАХ), та квазірівня Фермі у момент переходу багатошарових структур у низькоомний стан. Початкове положення рівня Фермі задавалося рівноважною концентрацією носіїв у матеріалі, а отже, провідністю плівок ZnTe. Як засвідчили розрахунки, практично в усіх досліджених конденсатах положення рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$  збігалося 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, розміщених на межах зерен та в об'ємі кристалітів конденсатів. Унаслідок цього найбільш глибокі пасткові рівні в плівках ZnTe методом аналізу ВАХ СОПЗ не виявлялися.

Можливість виявлення у зразках мілких пасток ( $E_t \leq 0,21$  еВ) обмежувалася явищем їх переходу у низькоомний стан, що стимулювалося саме заповненням ЛС. Тому ми методом ВАХ СОПЗ спостерігали лише пастки, які мали енергію залягання більшу, ніж зазначена. Однак у досліджених зразках можливе 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 характерними є такі енергії активації провідності: 0,05; 0,14–0,15; 0,20–0,21; 0,33–0,34; 0,42–0,43; 0,51–0,52; 0,57–0,58; 0,69–0,70 та 0,89 еВ (табл. 5.7). Зазвичай, на температурній залежності провідності від одного зразка спостерігалися 2–3 ділянки сталого нахилу, що свідчить про наявність у плівці одразу декількох видів дефектів.

Необхідно зазначити, що ряд значень  $E_t$ , знайдених із  $\sigma$ – $T$ -залежностей, добре корелюють зі значеннями глибини залягання пасток, визначених у плівках ZnTe методами ВАХ СОПЗ (табл. 7.2) та низькотемпературної фотолюмінесценції [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. На жаль, методи, використані для знаходження параметрів ЛС, не дозволяють визначити їх природу. Однак така інтерпретація можлива шляхом порівняння експериментальних результатів із літературними даними.

ЛС у монокристалах та плівках ZnTe методом ВАХ СОПЗ вивчалися у працях [1, 179, 201]. Автори [1] в монокристаличних зразках за напругою повного заповнення пасток визначили 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 дозволили одержати авторам дещо інші значення цих величин –  $E_t = 0,14$  еВ та  $N_t = 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. Виходячи з моделі наявності у матеріалі моноенергетичних пасток, автори [201] розраховали густину ЛС у плівках ZnTe, одержаних методом лазерного випарування. Вона виявилася дуже високою  $N_t = 4,2$ – $8,4 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>. На жаль, енергію пасток у монографії не визначено. Дещо мен-

ша концентрація пасток, із використанням тієї самої моделі, знайдені у плівках ZnTe, одержаних електроосадженням  $N_t = 3,6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  [179].

Як можна побачити з таблиці 7.3, у плівках ZnTe концентрація пасток, яку ми виявили, є значно меншою, ніж у конденсатах, одержаних 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 праць [195, 198, 199, 202–207], ніж дослідженню їх ВАХ СОПЗ. На  $\sigma - T$ -залежностях від монокристалів ZnTe, як свіжовирощених, так і відпалених у водневій атмосфері, автори [195] спостерігали ділянки з енергією активації 0,03; 0,14; 0,23–0,25; 0,28; 0,36 та 0,41–0,45 еВ. Ці енергії непогано корелюють з одержаними нами 0,05; 0,14–0,15; 0,20–0,21; 0,33–0,34; 0,42–0,43 еВ. На жаль, Корбутяк із співавторами [195] ідентифікують лише рівень 0,36 еВ, який пов'язують із дефектом  $O_{Te}$ .

У нелегованих плівках ZnTe, одержаних електронно-променевим випаровуванням, із нахилу  $\sigma - T$ -залежностей автори [204] визначили енергію активації провідності зразків, яка становила  $E_1 = 0,48\text{--}0,51$  еВ,  $E_2 = 0,89$  еВ,  $E_3 = 0,94\text{--}0,96$  еВ,  $E_4 = 0,98\text{--}1,03$  еВ. Такі самі дослідження високоомних  $R = 8,7 \cdot 10^9\text{--}8 \cdot 10^{11}$  Ом плівок ZnTe, одержаних високочастотним катодним розпиленням [207], дали такі результати:  $E = 0,48$  еВ. Русу зі співавторами [181] у плівках, нанесених методом КЗО, спостерігали рівні з енергією 0,75–1,20 еВ. У роботі [206], де досліджені нелеговані та леговані міддю вакуумні конденсати ZnTe, одержані рівні з енергією активації 0,05, 0,12–0,15 та 0,50 еВ. Перші автори не ідентифікують ці рівні, другі – пов'язують з домішкою  $Cu_{Zn}^+$ , а треті – з власним дефектом  $V_{Zn}^{2-}$ .

Таблиця 7.3 – Глибини залягання ЛС у  $33 \text{ ZnTe}$ , визначених із нахилу  $\sigma$ - $T$  залежностей

$T_s, \text{K}$	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]

ЛС з енергією активації 0,22 еВ спостерігалися авторами [208] у нелегованих плівках ZnTe, одержаних методом термічного випаровування у вакуумі. Їх інтерпретація, на жаль, відсутня.  $\sigma - T$ -залежності, характерні для компенсованих зразків, одержали автори [156]. Вони досліджували епітаксіальні 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 в інтервалі 0,05–1,20 еВ, але більшість з них у наш час не ідентифіковані.

Все ж більшу частину рівнів, що ми виявили у плівках ZnTe, ідентифікувати можна, хоча і з деякою часткою ймовірності. Рівень з  $E_1 = 0,05$  еВ, звичайно, пов'язують з однозарядною  $V_{Zn}^-$ , а  $E_2 = 0,15$  еВ – двозарядною вакансією цинку  $V_{Zn}^{2-}$  [198, 199]. У більш пізніх працях вважають, що останній рівень зумовлений міддю, що є традиційною залишковою домішкою у ZnTe, а двозарядній 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 праці [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 і комплексам власний дефект – домішка.

### 7.2.2. Параметри локалізованих станів у плівках CdTe

Результати розрахунків параметрів ЛС у конденсатах CdTe, одержані з ВАХ СОПЗ із використанням методу ІС та методу, розвинуеному у [24], наведені у табл. 7.4. Цими методами у

Таблиця 7.4 – Параметри ЛС у плівках CdTe, розраховані з використанням кількох модифікацій диференціального методу

Режим конденсації плівок	Модельний метод [24]		Метод ІС [65, 178, 210, 211]			Моделювання ТД $N$ , $\text{см}^{-3}$
	$E_p$ , eВ	$N_i$ , $\text{см}^{-3}$ , монорівень	$E_i$ , eВ	$N_i$ , $\text{см}^{-3}$ , монорівень	$N_b$ , $\text{см}^{-3}$ , гаус	
$T_s = 723 \text{ K}$ , $T_e = 893 \text{ K}$	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	$4,4 \cdot 10^{15}$	$3,9 \cdot 10^{15}$	
$T_s = 748 \text{ K}$ , $T_e = 893 \text{ K}$	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	$2,7 \cdot 10^{15}$	$4,6 \cdot 10^{14}$	
$T_s = 773 \text{ K}$ , $T_e = 893 \text{ K}$	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	$3,5 \cdot 10^{15}$	$3,9 \cdot 10^{15}$	
$T_s = 798 \text{ K}$ , $T_e = 893 \text{ K}$	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	$1,7 \cdot 10^{15}$	$4,2 \cdot 10^{15}$	
$T_s = 823 \text{ K}$ , $T_e = 893 \text{ K}$	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	$1,7 \cdot 10^{16}$	$7,6 \cdot 10^{15}$	
$T_s = 748 \text{ K}$ , $T_e = 1068 \text{ K}$	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	$4,3 \cdot 10^{13}$	$3,1 \cdot 10^{13}$	
$T_s = 753 \text{ K}$ , $T_e = 993 \text{ K}$ епітаксiальна			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	$1,1 \cdot 10^{14}$	$4,9 \cdot 10^{12}$	

плівках CdTe виявляється ряд груп пасток із найбільш ймовірною глибиною залягання, що становить  $E_{t1} = 0,68\text{--}0,70$  еВ,  $E_{t2} = 0,60\text{--}0,63$  еВ,  $E_{t3} = 0,56\text{--}0,57$  еВ,  $E_{t4} = 0,51\text{--}0,53$  еВ,  $E_{t5} = 0,45\text{--}0,46$  еВ,  $E_{t6} = 0,39\text{--}0,4$  еВ. Точність визначення енергії залягання  $E_t$ , як і для плівок ZnTe, становить  $kT$ . Концентрація знайдених ЛС лежить в інтервалі  $N_t = 10^{12}\text{--}10^{15}$  см<sup>-3</sup> і здебільшого 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 із напівшириною  $\sigma_t = 0,011\text{--}0,015$  еВ. У більшості зразків домінувальними пастками, що в основному визначали вигляд ВАХ СОПЗ, є ЛС із енергією  $E_t = 0,60\text{--}0,63$  еВ;  $E_t = 0,56\text{--}0,57$  еВ та  $E_t = 0,45\text{--}0,46$  еВ. Лише пастки з енергією  $E_t = 0,40$  еВ у випадку, якщо вони виявлялися, мали більшу концентрацію.

Необхідно відзначити, що ЛС, що спостерігались у полікристалічних плівках, виявлялися також і у монокристалічних зразках. У ЗЗ монокристалічного телуриду кадмію вдавалося розрізнити пастки з енергією залягання  $E_t = 0,56\text{--}0,57$  еВ;  $E_t = 0,52\text{--}0,53$  еВ;  $E_t = 0,45\text{--}0,46$  еВ та  $E_t = 0,40\text{--}0,41$  еВ.

Сканування пасток у плівках CdTe, як і у конденсатах ZnTe, проводилося нами в інтервалі від рівноважного рівня Фермі  $E_{F0}$  ( $E_t > 0,70$  еВ) до квазірівня Фермі у момент перемикання багат шарових 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 розміщений 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, знайдені нами у полікристалічних зразках, цілком, можливо, можуть бути



наявними і у більш низькоомних монокристалічних плівках.

Як свідчить аналіз  $\sigma - T$ -залежностей, у високотемпературних полікристалічних конденсатах спостерігалися 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 із 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, що є характерною для високих температур вимірювання, відповідає ширині ЗЗ матеріалу. Варто зазначити, що значення  $E_t$ , розраховані з  $\sigma - T$ -залежностей, добре корелюють зі значеннями глибини залягання пасток, які спостерігалися у плівках CdTe методом ВАХ СОПЗ.

Результати зіставлення глибини залягання ЛС, одержаних із ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей, наведені у табл. 7.5.

Інтерпретація виявлених у плівках CdTe ЛС проводилася шляхом зіставлення експериментальних результатів із літературними даними. Відповідні результати наведені у табл. 7.5. Як вже зазначалося, існує велика кількість суперечливих даних про глибину залягання рівнів тих чи інших ТД у CdTe, саме тому наведена в таблиці інтерпретація є приблизною. Ми для встановлення типу виявлених пасток в основному використовували дані Вея [160, 164], одержані ним методом «*ab initio*».

Згідно з розрахунками Вея глибокі центри з глибиною залягання 0,71 еВ належать  $V_{Te}^{2+}$ . Нами експериментально спостерігався рівень з  $E_t = 0,68-0,70$  еВ, що, можливо, зумовлений 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).

Таблиця 7.5 – Глибини залягання рівнів ЛС дефектів у 33 CdTe

$\Delta E$ , eВ			Можлива інтерпретація
Із ВАХ СОПЗ	Із $\sigma$ - $T$ залежностей		
полікристалічні плівки	полікристалічні плівки	епітаксіальні плівки	
0,68–0,70	–	–	$V_{Te}^{2+}$ (0,71 eВ) [164]
0,60–0,63	0,60	–	$Te_{Cd}^{2+}$ (0,59 eВ) [164]
0,56–0,57	0,57	–	$Cd_i^{c2+}$ (0,56 eВ) [164]
0,51–0,53	–	–	$V_{Te}^{2+}$ (0,50 eВ) [160]
0,45–0,46	0,46	0,46	$Cd_i^{c+}$ (0,46 eВ) [164]
0,39–0,40	0,40–0,41	0,40	$Te_{Cd}^{2+}, V_{Te}^{+}$ (0,40 eВ) [160]
–	0,33	0,29	$Cd_i^{a2+}$ (0,33 eВ) [164]
–	–	0,22–0,23	$Cd_i^{2+}$ (0,20 eВ) [160]
–	0,15	0,13–0,14	
–	–	0,06–0,07	

Рівень з енергією  $E_c-0,29$  eВ так само утворюється власним дефектом, пов'язаним із кадмієм  $Cd_i^{a2+}$  (0,33 eВ).

Різні енергії іонізації міжвузлового кадмію зумовлені його розміщенням в окто- або тетраедричному положенні у кристалічній ґратці матеріалу.

### 7.2.3. Параметри локалізованих станів у плівках ZnS

Шляхом аналізу ВАХ СОПЗ, використовуючи традиційний підхід та вирази, наведені в [1, 17], у плівках ZnS ми виявили пасткові рівні з глибиною залягання  $E_t = 0,22 - 0,25$  еВ і концентрацією  $N_t = 5 \cdot 10^{14} - 1,5 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>. Найдені ЛС можуть бути зумовлені наявністю міжвузлового атома цинку  $Zn_i^{2+}$ . ЛС, із енергіями залягання  $E_t = 0,24 - 0,25$  еВ, спостерігалися також у праці [212] методом термостимульованих струмів.

Відповідно до рівняння Арреніуса з  $\sigma - T$ -залежностей ми визначили енергію активації провідності на лінійних ділянках. Встановлено, що 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, одержаних за різних фізико-технологічних умов, обчислені з використанням методу аналізу ВАХ СОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей, зведені у таблиці 7.6. Також для порівняння наведені літературні дані, одержані іншими дослідниками. Як бачимо з таблиці, спостерігається певна кореляція між параметрами ЛС у плівках ZnS, які одержали ми та інші автори. Крім того, в ряді випадків відбувається збіг значень енергій залягання дефектів визначених із ВАХ ТОПЗ та  $\sigma - T$  залежностей.

На жаль, ідентифікувати більшість знайдених ЛС не вдалося, оскільки з літературних даних відсутні посилання 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 двозарядженим ( $Zn_i^{2+}$ ) міжвузловим атомом цинку.

Таблиця 7.6 – Параметри ЛС, обчислені шляхом аналізу ВАХ СОПЗ і  $\sigma - T$ -залежностей на омичній ділянці ВАХ, для плівок ZnS, одержаних у різних фізико-технологічних режимах конденсації

$T_s, \text{K}$ ( $T_e = 1173 \text{ K}$ )	Із ВАХ СОПЗ		Із $\sigma - T$ залежностей на омичній ділянці		
	$E_t, \text{eV}$	$N_t, \text{cm}^{-3}$	$E_{ax}, \text{eV}$		
			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 локалізованих станів у плівках CdS

Методика одержання та результати дослідження структурних характеристик плівок сульфїду кадмію викладена нами у [214]. Для регулювання стехіометрії шарів у процесі їх нанесення додатково співвипаровувалася сірка за температури  $T_{es} = 60 - 200 \text{ }^\circ\text{C}$ . Як підкладки використовувалося покривне скло з провідним підшаром ІТО. Як верхній струмознімальний контакт 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, що має  $n$ -тип провідності, під час прикладання напруги.

На рисунку 7.10 наведені темнові та світлові ВАХ багатосарових структур ІТО/CdS/Іn, зняті за прямого та зворотного зміщення. Криві від плівок CdS із надлишком кадмію наведені на рис. 7.10 а, відповідно на рис. 7.10 б подані криві від шарів із надлишком сірки. Аналіз цих ВАХ свідчить, що матеріал плівок мав питомий опір, який становив  $5 \cdot 10^6 - 10^7$  Ом · см. Із рисунка бачимо, що підвищений вміст сірки у плівці CdS приводить до збільшення фотопровідності матеріалу. За надлишку сірки провідність освітленого матеріалу збільшується майже на три порядки (рис. 7.10 б), у той самий час, якщо при дефіциті сірки, – лише на один порядок. Встановлено також, що дефіцит кадмію знижує темнову провідність матеріалу на два порядки.

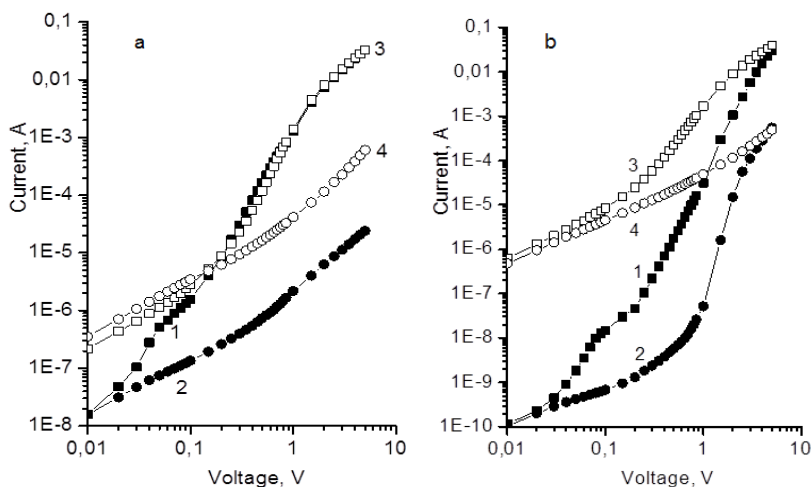


Рисунок 7.10 – ВАХ у подвійному логарифмічному масштабі від багатосарових структур ІТО/CdS/Іn (а, б) плівки CdS із надлишком кадмію (а), з надлишком сірки (б); 1,3 – «+» ІТО, 2, 4 – «+» Іn. Затемнені символи відповідають темновим струмам, відкриті – струмам під час освітлення зразків білим світлом

На темнових ВАХ від плівок CdS («+» ІТО) з надлишком та дефіцитом сірки в області високої напруженості поля спостерігалось декілька майже лінійних ділянок із різним нахилом до осі напруги. Зазвичай, виділялися ділянки із залежністю струму від напруги вигляду:  $I - U$ ,  $I - U^{1.5-2}$ ,  $I - U^{3-4}$ . У ряді випадків після суперлінійних ділянок спостерігалась квадратична залежність  $I$  від  $U$ .

Особливості ВАХ, як вже вказувалося, добре розрізняються на залежностях  $\eta - \lg U$ , що дозволяє виявити тонку структуру кривих струм – напруга. Кожна точка цього графіка визначає кут нахилу кривої струм – напруга у подвійному логарифмічному масштабі до осі напруги. Залежності  $\eta - \lg U$  були одержані нами шляхом обчислення похідної у кожній експериментальній точці ВАХ СОПЗ. Як уже зазначалося, математично задача зводилась до побудови згладжувального кубічного сплайна, що апроксимує експериментальні дані та його диференціювання у вузлах. Результати диференційного оброблення темнових і світлових ВАХ наведені на рис. 7.11 а–з.

Аналіз диференціального нахилу ВАХ (рис. 7.11 в, г) [214] дозволив виявити два варіанти у характері інжекції носіїв у матеріал: у разі надлишку кадмію ( $C_{Cd} > C_S$ ) має місце біполярна рекомбінація носіїв у матеріалі як у темноті та при освітленні, вона забезпечує диференціальний нахил ВАХ  $\eta = 1,5$ . У випадку надлишку сірки ( $C_{Cd} < C_S$ ) основним механізмом зарядоперенесення у матеріалі є монополярна інжекція, саме вона забезпечує диференціальний нахил кривих струм – напруга  $\eta = 2$ . В усіх випадках на кривих мають місце стрибки струму, характерні для СОПЗ. Математичне оброблення відповідних кривих дозволило побудувати залежності  $n_s - E_F$  (а) та  $n_s \sqrt{E_F - E_F}$  (рис. 7.12) і визначити значення  $E_t$ ,  $N_t$  пасток, наявних у 33 матеріалу.

Ми встановили, що для плівок сульфїду кадмію з надлишком кадмію ( $C_{Cd} > C_S$ ) є характерною наявність ЛС із енергією

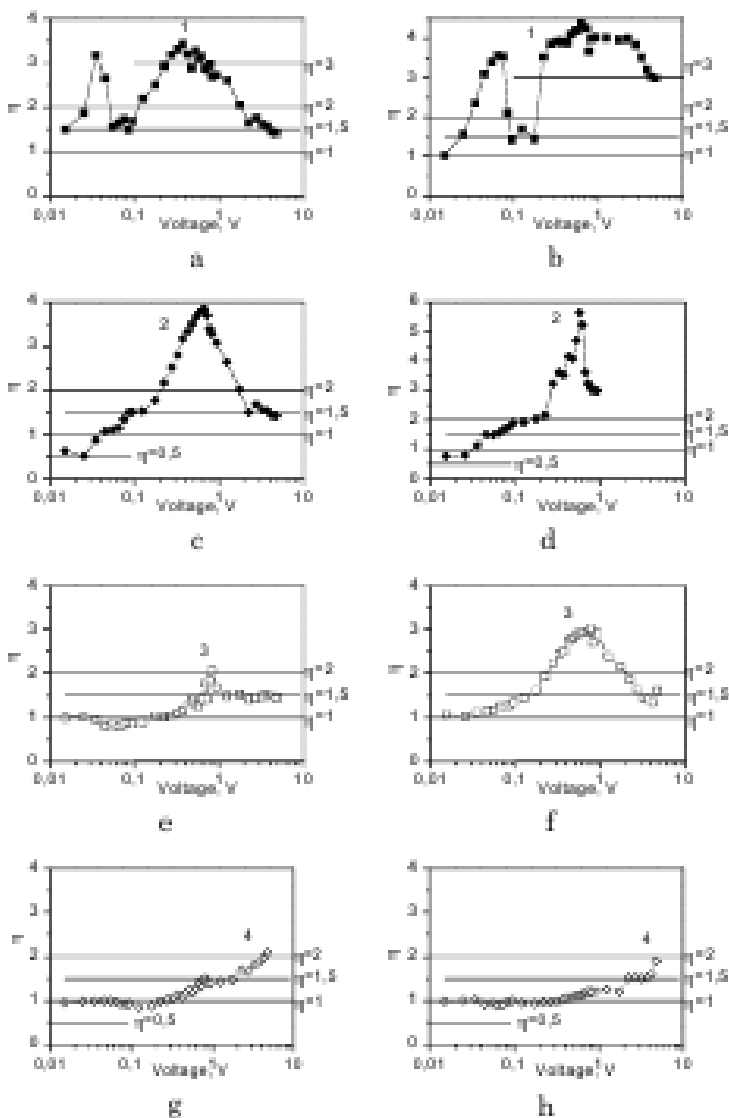


Рисунок 7.11 – Диференціальний нахил ВАХ: плівки з надлишком кадмію (а, в, д, ж), із надлишком сірки (б, г, е, з); 1,3 – «+» ІТО, 2, 4 – «+» Іп. Затемнені символи відповідають темновим струмам (а–г), відкриті (д–з) – струмам під час освітлення зразків білим світлом

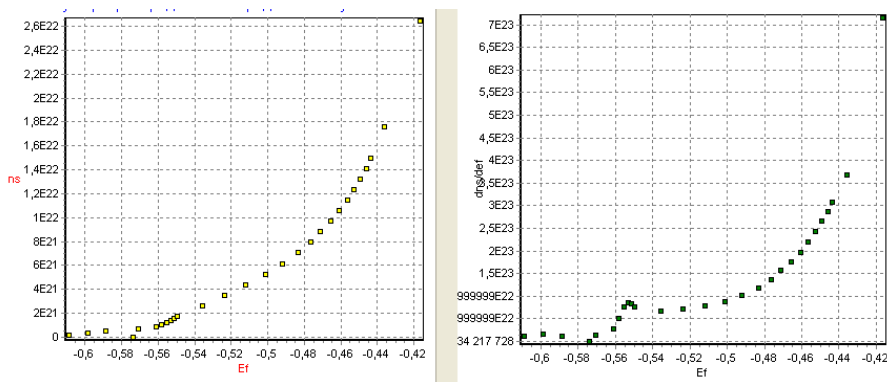


Рисунок 7.12 – Типові диференціальні криві  $n_s-E_F$  (а) та  $n_s/E_F-E_F$  (б), одержані у результаті оброблення ВАХ СОПЗ, що дозволили визначити параметри пасток у матеріалі

$E_t = (0,514 \pm 0,026)$  еВ, у той самий час як у матеріалі з надлишком сірки ( $C_{Cd} < C_S$ ) у 33 наявні рівні з енергією залягання  $E_t = (0,514 \pm 0,026)$  еВ та  $E_t = (0,700 \pm 0,026)$  еВ. Концентрація дозаповнення носіями цих ЛС становила від  $2 \cdot 10^{21}$  м<sup>3</sup> до  $5 \cdot 10^{22}$  м<sup>3</sup> залежно від полярності й умов освітлення зразків. Відповідно їх повна концентрація  $N_t$  є дещо вищою від цих значень.

Таким чином, ми виявили залежність інжекційних параметрів та характеру інжекції у структурах ІТО/CdS/In на основі наноструктурованих плівок CdS від їх стехіометрії.



## ДОДАТОК А (довідковий)

### А.1. Числовий алгоритм розв'язання інтегрального рівняння Фредгольма 1-го роду

Рівняння Фредгольма 1-го роду можна записати [134] у вигляді

$$Ay \equiv \int_a^b K(x,s)y(s)ds = f(x), \quad x \in [c,d]. \quad (\text{A.1})$$

Із умови мінімуму функціонала випливає рівняння Тихонова [136]:

$$\alpha[y_\alpha(t) - qy'_\alpha(t)] + \int_a^b R(t,s)y_\alpha(s)ds = F(t), \quad a \leq t \leq b, \quad (\text{A.2})$$

$$\text{де } R(t,s) = R(s,t) = \int_a^b K(x,t)K(x,s)dx,$$

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

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

Розглянемо числовий алгоритм розв'язання цієї задачі. При розв'язанні рівняння (А.2) був використаний один із найбільш ефективних методів – метод скінченних 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

$$\alpha \left[ y_\alpha(t) - q y_\alpha''(t) \right] + \int_a^b \left[ \int_c^d K(x,t) K(t,x) dx \right] y_\alpha(s) ds = \int_c^d K(x,t) \hat{f}(x) dx, \quad (A.3)$$

$$a \leq t \leq b.$$

Розписавши інтеграли в (A.3) за формулою трапецій із змінним кроком та апроксимуючи похідну  $y_\alpha''(t)$  скінченними різницями, одержимо дискретний аналог співвідношення (A.3):

$$\left\{ \begin{aligned} & \alpha \left( y_1 - q \frac{y_2 - y_1}{r_1 h_2} \right) + \sum_{j=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{i1} K_{ij} y_j \sum_{i=1}^l p_i K_{i1} \hat{f}_i, \\ & \alpha \left\{ y_k - \frac{q}{r_k} \left[ \frac{y_{k-1}}{h_k} - \left( \frac{1}{h_k} + \frac{1}{h_{k+1}} \right) y_k + \frac{y_{k+1}}{h_{k+1}} \right] \right\} + \\ & + \sum_{i=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{ik} K_{ij} y_j = \sum_{i=1}^l p_i K_{ik} \hat{f}_i, \quad k = \overline{2, n-1} \\ & \alpha \left( y_n + q \frac{y_n - y_{n-1}}{r_n h_n} \right) + \sum_{j=1}^n r_j \sum_{i=1}^l p_i K_{in} K_{ij} y_j = \sum_{i=1}^l p_i K_{in} \hat{f}_i, \end{aligned} \right. \quad (A.4)$$

де

$$\left\{ \begin{array}{l} h_j = s_j - s_{j-1} = t_j - t_{j-1}, \quad j = \overline{2, n}, \\ r_1 = \frac{s_2 - s_1}{2} = \frac{h_2}{2}, \quad r_j = \frac{s_{j+1} - s_{j-1}}{2} = \frac{h_j + h_{j+1}}{2}, \\ j = \overline{2, n-1}, \quad r_n = \frac{s_n - s_{n-1}}{2} = \frac{h_n}{2}, \\ p_1 = \frac{x_2 - x_1}{2}, \quad p_i = \frac{x_{i+1} - x_{i-1}}{2}, \quad i = \overline{2, l-1}, \quad p_l = \frac{x_l - x_{l-1}}{2}. \end{array} \right.$$

Рівняння (A.4) являє собою систему 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 разі, якщо  $h_2 = h_3 \dots = h_n = h$ , то  $\rho = h$  і

$$\frac{r_k}{\rho_s} = \begin{cases} 0,5 & \text{при } k=1 \text{ або } k=n, \\ 1 & \text{при } k=\overline{2, n-1}. \end{cases}$$

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

$$\begin{aligned}
G_{kj} &= G_{jk} = \sum_{l=1}^l \frac{p_l}{\rho} z_{ik} z_{ij}, \quad k, j = \overline{1, n}, \\
F_k &= \sum_{l=1}^l \frac{p_l}{\rho} z_{ik} \hat{f}_l, \quad k = \overline{1, n}, \\
z_{ij} &= r_j K_{ij}, \quad i = \overline{1, l}, \quad j = \overline{1, n}, \\
\left\{ \begin{array}{l} C_{11} = \left( 1 + \frac{q}{r_1} \frac{1}{h_2} \right) \frac{r_1}{\rho}, \\ C_{kk} = \left[ 1 + \frac{q}{r_k} \left( \frac{1}{h_k} + \frac{1}{h_{k+1}} \right) \right] \frac{r_k}{\rho}, \quad k = \overline{2, n-1}; \\ C_{nn} = \left( 1 + \frac{q}{r_n} \frac{1}{h_n} \right) \frac{r_n}{\rho}, \\ C_{k,k+1} = -\frac{q}{h_{k+1} \rho}, \quad k = \overline{1, n-1}, \\ C_{k,k-1} = -\frac{q}{h_k \rho}, \quad k = \overline{2, n}, \end{array} \right.
\end{aligned}$$

інші  $C_{kj} = 0$  ( $C$  – стрічкова тридіагональна матриця). Числова апроксимація функції  $\beta(\alpha)$  має такий 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 (А.1) здійснювалося у такий спосіб. Спочатку проводилося нормування вихідного співвідношення, потім формувалася матриця системи (А.5). Оскільки матриця цієї системи є тридіагональною, для її розв’язання ви-

користовувався метод Халецького [215], що дозволив 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  $\alpha_m$ , за якого умова (A.7) виконувалася. Потім обчислювалося значення  $\mu = \beta(\alpha_m)$ . Після цього, знову змінюючи значення  $\alpha$  за законом  $\alpha = \ln \alpha_0 - h$ , обчислювали 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  $\alpha = \alpha^*$ , обчислювалася 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 / М. Грундман. – 2-е издание. – Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2012. – 772 с.
6. Holt D. B. Extended defects in semiconductors. Electronic properties, device effects and structures / D. B. Holt, V. 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 : Metallurgia, 1995. – 480 с.
9. Stokman F. On the classification of traps and recombination centres / F. Stokman // Phys. status solidi A. – 1973. – Vol. 20. – P. 217–220.
10. Сердюк В. В. Фотоэлектрические процессы в полупроводниках / В. В. Сердюк, Г. Г. Чемересюк, М. Терек. – Одесса : Вища школа. Главное издательство, 1982. – 151 с.
11. Гринев Б.В. Сцинтилляционные 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. – Vol. 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. Сыноров В. Ф. Релаксационные методы исследования энергетического спектра локализованных состояний в полупроводниках / В. Ф. Сыноров, Б. И. Сысоев, В. А. Линник. – Воронеж : ВГУ, 1982. – 180 с.
17. Као К. Перенос электронов в твердых телах / К. Као, В. Хуанг. – Москва : Мир, 1984. – Т. 1. – 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. – Vol. 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. Tadiev, I. A. Gabulov [et al.] // *Semicond.*

- Phys. Quant. Electr. Optoelectron. – 2003. – Vol. 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. – Vol. 1, № 8. – P. 105–109.
  23. Defect-induced luminescence in high-resistivity high-purity undoped CdTe crystals / N. Armani, C. Ferrari, G. Salvati [et al.] // J. Phys. : Condens. Matter. – 2002. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 25, № 2. – P. 101–103.
  27. Mochizuki K. I–V characteristics of CdTe single crystals / K. Mochizuki, K. Masumoto // Meter. Lett. – 1986. – Vol. 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 : 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. – Vol. 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. Goldenblat G. Sh. Current-voltage characteristic of pulsed space-charge-limited currents in GaAs / G. Sh. Goldenblat, A. R. Rao // J. Appl. Phys. – 1984. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 15. – P. 523–529.
41. Rose A. Recombination processes in insulators and semiconductors / A. Rose // *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 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. – Vol. B30, № 10. – P. 1148–1156.
44. Mark P. Space-charge-limited currents in organic crystals / P. Mark, W. Helfrich // *J. Appl. Phys.* – 1962. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 19. – P. 1045–1047.
47. Nespurec S. Space charge limited currents in insulators with gaussian distribution of traps / S. Nespurec, P. Semejtec // *Czech. J. Phys.* – 1972. – Vol. B22. – P. 160–175.
48. Boncham J. S. SCLC theory for a gaussian trap distribution / J. S. Boncham // *Aust. J. Chem.* – 1973. – Vol. 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. – Vol. 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 // *Phys. Stat. Sol. A.* – 1974. – Vol. 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. О природе резкого роста тока при монополярной эмиссии в высокоомный полупроводник электроники / Э. И. Адирович, Г. О. Исаев // *Проблемы диэлектрической.* – 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 сэндвич-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. журн. изв. АНМССР, 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. – Vol. 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.] // Phys. Stat. Sol. A. – 1976. – Vol. 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 // Phys. Stat. Sol. A. – 1978. – Vol. 46, № 1. – P. 273–280.
67. Nespurec S. A differential method of analysis of steady-state-space-limited current-voltage characteristics / S. Nespurec, J. Sworakowsky // Phys. Stat. Sol. A. – 1977. – Vol. 41, № 2. – P. 619–627.
68. Nespurec S. A different method of analysis of steady-state space-charge-limited currents / S. Nespurec, J. Sworakowsky // Phys. Stat. Sol. A. – 1978. – Vol. 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<sub>2</sub>Si<sub>3</sub> / F. Shauer, O. Zmeskal, S. Nespurek // Phys. Stat. Sol. A. – 1983. – Vol. 75, № 2. – P. 531–534.
70. Stokman F. An exact evolution of steady-state space-charge-limited currents for arbitrary trap distribution / F. Stokman // Phys. Stat. Sol. A. – 1981. – Vol. 64, № 2. – P. 475–483.
71. Weisfield R. L. Space-charge-limited currents: refinements in analysis and applications to  $\alpha$ -Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>:H alloys / R. L. Weisfield // J. Appl. Phys. – 1983. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. Райке-

- рус, 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. – Vol. 6, № 1. – P. 25–32.
83. Стечкин С.Б. Сплайны 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. – Vol. 180, № 3. – P. 785–794.
87. Верлань А. В. 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. Тиркусова // 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 Международный симпозиум «Тонкие пленки в электронике», ISTFE-12. – Харьков : 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. – Vol. 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. – Vol. 27, № 7. – P. 789–796.
97. Basol B. M. Observation of electron traps in electrochemically deposited CdTe films / B. M. Basol, O. M. Stafsudd // Solid State Electronics. – 1981. – Vol. 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, вып. 2. – С. 177–197.
100. Attia A. A. Space-charge-limited currents in evaporated GaS thin films / A. A. Attia // Egypt. J. Sol. – 2001. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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 инъекционной 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. Тагиров О. Б. Исследование влияния сильного электрического поля на электропроводность монокристалла  $MnGaInS_4:Eu$  / О. Б. Тагиров, 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. – Vol. 72. – P. 073207-1-0733207-4.
113. Ibrahim A. A. DC electrical conduction of zinc telluride thin films / A. A. Ibrahim // Vacuum. – 2006. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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 сполук ZnTe і ZnS / С. М. Данильченко, Т. Г. Калініченко, М. М. Колесник [та ін.] // ФХТП. – 2008. – Vol. 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. – Vol. 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<sup>nd</sup> Nordic Semiconductor Meeting NSM-22. – Stockholm, Sweden, 2007. – P. 103.
123. Вольт-амперные характеристики монополярных полупроводников для различных высокополевых механизмов электропроводности / А. Н. Зюганов, С. В. Свечников, М. М. Чумачкова, В. Н. Шапарь // 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. – Vol. 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. – Киев : 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. А. Н. Георгобиани]. – 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. – Vol. A.5, № 5. – P. 3009–3013.
133. Berding M. A. Native defects in CdTe / M. A. Berding // *Phys. Rev. B*. – 1999. – Vol. 60, № 12. – P. 8943–8950.
134. Berding M. A. Defects in ZnTe, CdTe and HgTe: Total energy calculations / M. A. Berding, M. Schilfgaarde, A. Sher // *J. Vac. Sci. Technol.* – 1990. – Vol. A8, № 2. – P. 1103–1107.
135. Berding M. A. Annealing conditions for intrinsic CdTe / M. A. Berding // *Appl. Phys. Lett.* – 1999. – Vol. 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. – Vol. 14, № 1. – P. 33–40.
137. De Nobel D. Phase equilibria and semiconductors properties of cadmium telluride / D. de Nobel // Phil. Res. Repts. – 1959. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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 [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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 27, № 8. – P. 961–971.

153. Smith F. T. Electrically active point defects in CdTe / F. T. Smith // *J. Metall. Trans.* – 1971. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 105, № 1–2. – P. 69–71.
166. Adachi S. Handbook on physical properties of semiconductors. Vol. 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: дисертація 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. – Vol. 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. – Vol. 84, № 5. – P. 2841–2845.
171. High temperature electrical conductivity of undoped ZnS / K. Lott, L. Turn, O. Volobujeva [et al.] // *Physica B.* – 2001. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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, вып. 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 [и др.] // 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. – Vol. 403–404. – P. 126–129.
188. Balasz J. Investigation of the I–V characteristics of ZnS single crystals / J. Balasz // Acta Phys. Hung. – 1968. – Vol. 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. – Vol. 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, вып. 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, вып. 3. – С. 299–303.
192. Морфология, двойникование и фотолюминесценция кристаллов ZnTe, выращенных методом химического синтеза компонентов из паровой фазы / Ю. В. Клевков, В. П. Мартовский, В. С. Багаев [и др.] // *ФТП.* – 2006. – Т. 40, вып. 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, вып. 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, вып. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 45. – P. 204–213.
198. Dean P. J. Copper, the dominant acceptor in refined, undoped zinc telluride / P. J. Dean // *Luminesc.* – 1979. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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, вып. 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. – Vol. 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 [et al.] // *Thin Solid Films.* – 2002. – Vol. 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 [et al.] // J. Electron. Mater. – 1996. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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. – Vol. 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-ра фіз.-мат. наук: 01.04.07 / Опанасюк Анатолій Сергійович. – Суми, 2011. – 378 с.
215. Калиткин Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин. – Москва : Наука, 1978. – 512 с.

Наукове видання

**Опанасюк** Анатолій Сергійович,  
**Курбатов** Денис Ігорович,  
**Тиркусова** Надія Володимирівна та ін.

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

**Монографія**

**За загальною редакцією А. С. Опанасюка, Д. І. Курбатова**

Художнє оформлення обкладинки М. М. Колесник  
Редактори: Н. З. Клочко, М. Я. Сагун, С. М. Симоненко, О. В. Федяй  
Комп'ютерне верстання О. А. Дображана

Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 14,65. Обл.-вид. арк. 13,72. Тираж 300 пр. Зам. №

Видавець і виготовлювач  
Сумський державний університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007  
Свідцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.

## 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 багатощарових структур на їх основі для створення пристроїв мікро-, оптоелектроніки, геліоенергетики та сенсорики. Автор понад 500 наукових і методичних праць, зокрема 6 навчальних посібників, 4 патентів, 2 колективних монографій і більше ніж 90 статей у виданнях, що обліковуються наукометричними 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 розроблення математичних моделей та їх комп'ютерної реалізації з дослідження та реконструкції розподілів глибоких станів методом інжекційної спектроскопії. Автор понад 70 наукових і методичних праць, 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 одержання та дослідження властивостей напівпровідникових плівок, що використовуються для створення пристроїв оптоелектроніки та геліоенергетики. Автор понад 40 наукових і методичних праць, зокрема 10 статей у виданнях, що обліковуються наукометричними 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 Уппсали (Швеція). Фахівець у галузі дослідження точкових дефектів у напівпровідникових матеріалах, електричних властивостей напівпровідникових плівок та сонячних перетворювачів на їх основі. Автор понад 50 наукових праць, зокрема 25 статей у виданнях, що обліковуються наукометричними 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 в напрямі синтезу і дослідження багатшарових 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 більше ніж 400 підприємств, установ та організацій різних форм власності, з більше ніж 25 країн світу. Автор понад 150 наукових праць, зокрема, більше ніж 40 у виданнях, що обліковуються наукометричними базами даних Scopus та Web of Science, 3 патентів, 2 колективних монографій англійською мовою надрукованих у зарубіжних 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, одержаних безвакуумними техніками для використання в сонячних перетворювачах. Автор понад 50 наукових праць, зокрема 13 статей у виданнях, що індексуються наукометричними базами даних Scopus та Web of Science.