

УДК 535.3, 535.5

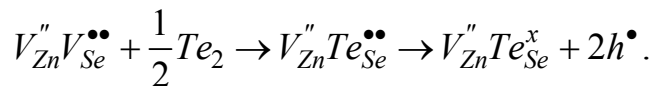
Марія Вадюк, Олександра Пташник

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
 м. Івано-Франківськ, Україна*

ДЕФЕКТНА ПІДСИСТЕМА І ВЛАСТИВОСТІ ІЗОВАЛЕНТНО ЛЕГОВАНИХ КРИСТАЛІВ ЦИНК СЕЛЕНІДУ

Цинк селенід є одним з перспективних матеріалів твердотільної електроніки. Він використовується для створення лазерних екранів, інжекційних світлодіодів, лазерів у синій області спектра, сцинтиляційних датчиків, фоторезисторів, джерел спонтанного і когерентного випромінювання. Ширина його забороненої зони охоплює область енергії фотонів, включаючи синьо-блакитну, а висока ефективність можливих генераційно-рекомбінаційних процесів визначається прямозонною структурою. Легування сторонніми домішками істотно впливає на фізико-хімічні властивості матеріалу. В якості сторонніх легуючих домішок використовують елементи I, III, V та VII груп Періодичної таблиці елементів. Запропоновано кристалоквазіхімічні формули для легованого телуrom кристалів n-ZnSe:Te та p-ZnSe:Te і на їх основі розраховано залежності концентрації переважаючих точкових дефектів, вільних носіїв та холлівської концентрації від вмісту легуючої домішки. Так, легування кристалів Te призводить до утворення комплексу $V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n$.

При легуванні n-ZnSe телуrom легуючий кластер матиме вигляд:



Маючи на увазі, що у цьому випадку переважаючими точковими дефектами є двозарядні $Zn_i^{\bullet\bullet}$ та однозарядні Zn_i^\bullet міжвузлові атоми цинку, однозарядні вакансії селену V_{Se}^\bullet та двозарядні вакансії цинку $V_{Zn}^{//}$. Кристалоквазіхімічна формула відповідно буде:

$$\left(Zn_{((1-\alpha)+\alpha\gamma)(1-x)}^x \right)_{Zn} \left(Se_{(1-\alpha)(1-x)}^x V_{\alpha\gamma(1-x)}^\bullet \right)_{Se} \left(Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x)-nx}^\bullet Zn_{\alpha(1-\gamma)\delta(1-x)}^{\bullet\bullet} \right)_i \\ \left(V_{Zn}^{//} V_{Se}^\bullet \right)_{\alpha(1-\gamma)(1-x)}' \left(V_{Zn}'' Te_{Se}^x (Zn_i^\bullet)_n \right)_x + \alpha(1-x)(1+\gamma+\delta-\gamma\delta)e' + (\alpha(1-x)+2x)h^\bullet,$$

x – атомна частка надлишкового телуру.

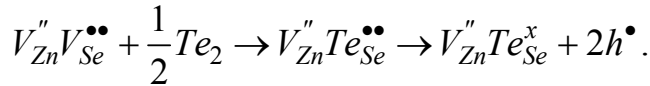
Концентрація дефектів визначатиметься залежностями:

$$\left[V_{Se}^+ \right] = A\alpha\gamma(1-x), \quad \left[Zn_i^+ \right] = A(\alpha(1-\gamma)(1-\delta)(1-x) - nx), \\ \left[Zn_i^{2+} \right] = A\alpha\delta(1-\gamma)(1-x), \quad \left[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+ \right] = A(\alpha(1-\gamma)(1-x)), \quad \left[V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n \right] = Ax, \\ n = A\alpha(1-x)(1+\gamma+\delta-\gamma\delta), \quad p = A(\alpha(1-x)+2x).$$

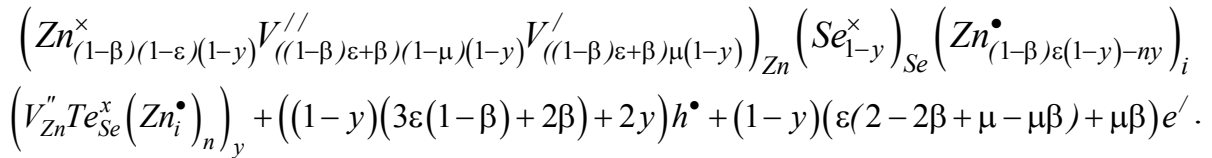
Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$\left[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+ \right]' + n = \left[Zn_i^+ \right] + 2 \left[Zn_i^{2+} \right] + \left[V_S^+ \right] + p$$

У випадку легування ZnSe р-типу провідності телуrom (p-ZnSe:Te) відповідний кластер матиме вигляд:



Кристалоквазіхімічна формула p-ZnSe:Te буде наступною:



Тут у – атомна доля надлишкового телуру. Концентрації дефектів при цьому будуть:

$$\begin{aligned} [V_{Zn}^{2-}] &= A((1-\beta)\varepsilon + \beta)(1-\mu)(1-y), \\ [V_{Zn}^-] &= A((1-\beta)\varepsilon + \beta)\mu(1-y), & [Zn_i^+] &= A((1-\beta)\varepsilon(1-y) - ny), \\ [V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n] &= Ay, & n &= A(1-y)(\varepsilon(2-2\beta + \mu - \mu\beta) + \mu\beta), \\ p &= A((1-y)(3\varepsilon(1-\beta) + 2\beta) + 2y). \end{aligned}$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:
 $2[V_{Zn}^{2-}] + [V_{Zn}^-] + n = [Zn_i^+] + p$, а холлівська концентрація носіїв: $n_H = |n - p|$.

Результати розрахунку приведені на рис. 1, 2.

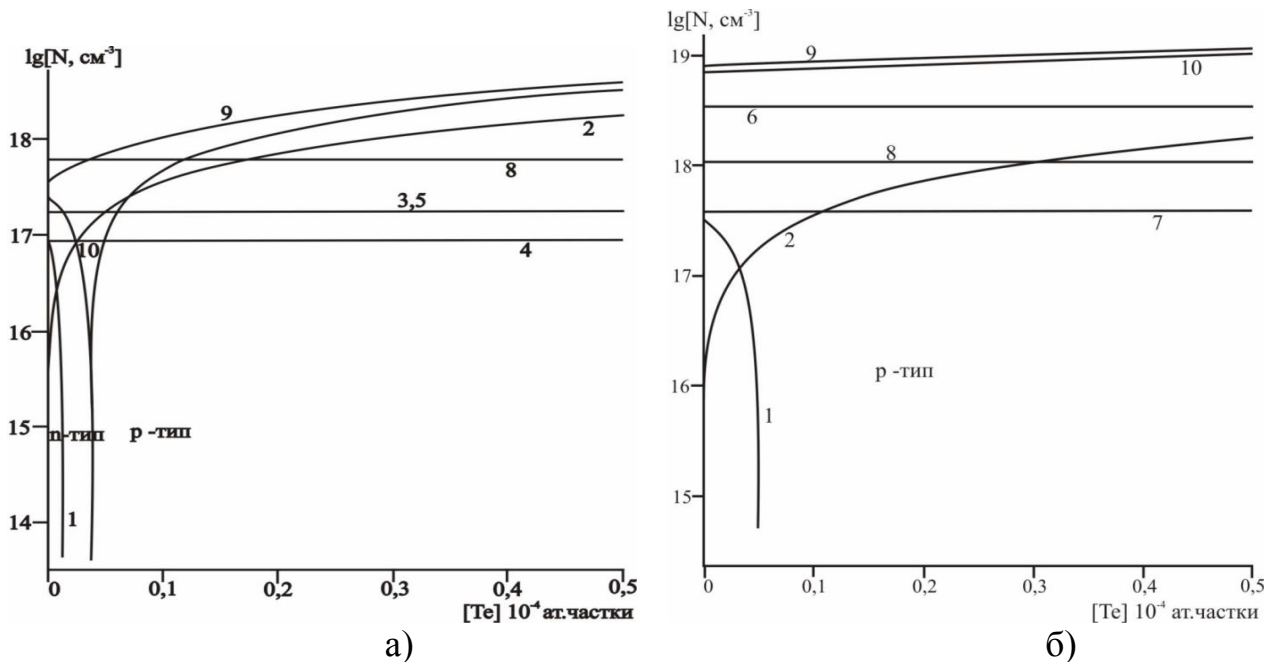
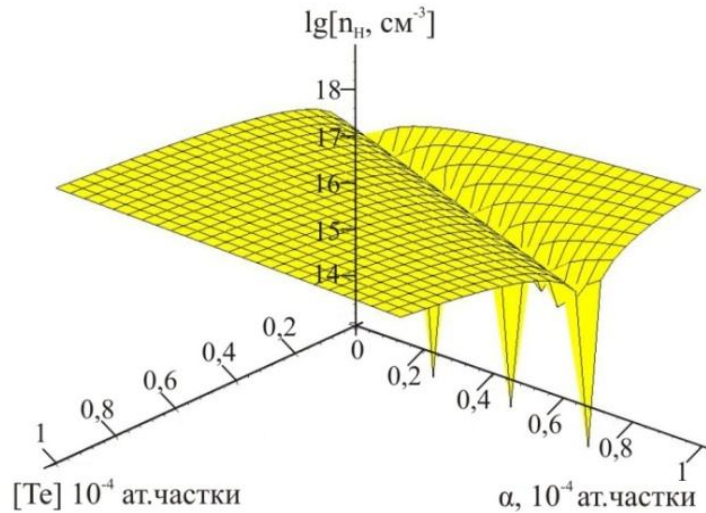
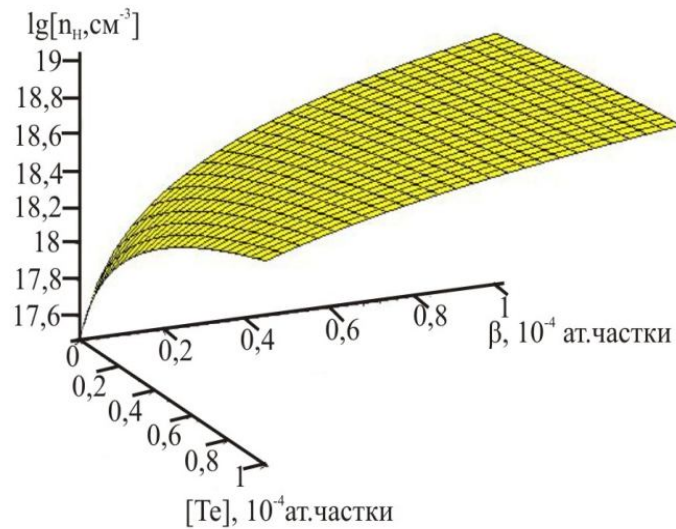


Рисунок 1 - Залежність концентрації переважаючих точкових дефектів N: 1- $[Zn_i^+]$, 2- $[V_{Zn}^{2-} Te_{Se}^x (Zn_i^+)_n]$, 3- $[V_{Se}^+]$, 4- $[Zn_i^{2+}]$, 5- $[V_{Zn}^{2-} V_{Se}^+]$, 6- $[V_{Zn}^{2-}]$, 7- $[V_{Zn}^-]$, основних носіїв 8-п, 9-р та холлівської концентрації 10- n_H , у n-ZnSe:Te (а) та p-ZnSe:Te (б) від концентрації легуючого компонента [Te] ($\alpha = 0,1 \cdot 10^{-4}$ мол. частки, $\gamma = 0,5$, $\delta = 0,5$; $\beta = 0,1 \cdot 10^{-3}$ мол. частки, $\mu = 0,1$, $\varepsilon = 0,1 \cdot 10^{-4}$), де n=2 це кількість міжвузлових атомів цинку.



а)



б)

Рисунок 2 - Просторова залежність холлівської концентрації n_H від відхилення від стехіометрії α (Zn) – а, β (Se) – б та вмісту легуючої домішки [Te] для кристалів n-ZnSe:Te (а) та p-ZnSe:Te (б).

Показано, що із збільшенням відхилення від стехіометрії на бік цинку концентрація телуру зростає, так само, із збільшенням кількості цинку у власних вузлах та величини диспропорціювання міжвузлового цинку зростає концентрація телуру, при якій настає конверсія типу провідності із n- на p-тип.

Виявлено, що при легуванні кристалів ZnSe:Te утворюється комплекс $V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n$, де $n = 2$ – це кількість міжвузлових атомів цинку. Тому, при збільшенні концентрації телуру, міжвузлові атоми цинку $[Zn_i^+]$ різко спадають, проте, зростає концентрація комплексу $[V_{Zn}^{2-}Te_{Se}^x(Zn_i^+)_n]$, бо всі міжвузлові атоми цинку входять у цей комплекс.