

УДК 621.315.592:54-165

Ярослав Салій, Любов Межиловська

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

ПІДСИСТЕМА ДЕФЕКТІВ У ТОНКОПЛІВКОВИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ

Дефекти атомної кристалічної структури суттєво впливають на фізичні властивості власних і легованих напівпровідників [1, 2]. Актуальними є фундаментальні дослідження кінетики формування підсистеми атомних дефектів з метою створення нових плівкових функціональних матеріалів при епітаксійному вирощуванні, легуванні, радіаційному і термічному впливах.

Комп'ютерне моделювання класичних і квантових систем відкрило широкі можливості вивчення фізики і хімії поверхні твердого тіла і плівкового матеріалу. Узгодження результатів моделювання з перших принципів із даними експерименту може забезпечити глибоке розуміння фізичних процесів у досліджуваних об'єктах. Важливим моментом є побудова моделей, що змогли б пояснити процеси і явища, що спостерігаються, оперуючи кінетикою дефектів, їх здатностями мігрувати, поглинатись та рекомбінувати, змінюючи при цьому концентрацію і рухливість вільних носіїв заряду.

Точкові дефекти – вакансії і міжвузлові атоми – досить рухливі при кімнатній і нижчих температурах, утворюючи комплекси з донорними і акцепторними домішками часто змінюють їх тип. Дефекти у напівпровідниках у більшості випадків характеризуються сильною деформацією кристалічної ґратки, малим радіусом хвильової функції локалізованого носія порядку сталої ґратки і відсутністю насичення хімічного зв'язку поблизу дефекту [1, 2].

У роботі представлено і на основі квазіхімічних реакцій рівноваги пояснено експериментальні залежності технологічних процесів напилення і легування, з використанням кінетичних рівнянь пояснено результати радіаційного опромінення і термічного відпалу. Методом молекулярної динаміки показано необхідність використання іонної взаємодії для модельного формування структури типу кам'яної солі і потенціалу Ленарда – Джонса для моделювання властивостей кристалів IV-VI. Дослідження впливу розмірного ефекту на електрофізичні і структурні параметри виконувались з використанням моделі розподілених параметрів і методу кліткових автоматів.

1. Е.И. Рогачова, И.М. Кривулькин, Физика и техника полупроводников **36**, 1040 (2002).
2. Д.М. Заячук, В.А. Шендеровський, Укр. фіз. журн. **36**, 1692-1713 (1991).