

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Державний заклад
«Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К.Д. Ушинського»

БРИТАН ВІКТОР БОГДАНОВИЧ

УДК 539.229.3, 532.538.261.1

**ВПЛИВ ДОМШОК АТОМАРНОГО ВОДНЮ НА ЕЛЕКТРИЧНІ
ТА ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ CdTe І
Cd_{1-x}Zn_xTe, ВИРОЩЕНИХ МЕТОДОМ СУБЛІМАЦІЇ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Одеса – 2014

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі загальної фізики Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор,
Пелешак Роман Михайлович,
Дрогобицький державний педагогічний
університет імені Івана Франка,
завідувач кафедри загальної фізики

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, ст.н.с.
Хижун Олег Юліанович,
Інституту проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича НАН України,
завідувач відділу спектроскопії
поверхні новітніх матеріалів

доктор фізико-математичних наук, професор,
Тюрин Олександр Валентинович,
Одеський національний університет ім. І. І. Мечнікова,
завідувач кафедри комп'ютерних
та інформаційних технологій

Захист відбудеться «22» грудня 2014 р. о 14⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К41.053.07 при Південноукраїнському національному педагогічному університеті імені К.Д. Ушинського Міністерства освіти і науки України за адресою: ауд. 52, корпус 1, вул. Старопортофранківська, 26, м. Одеса, 65020.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Державного закладу «Південноукраїнського національного педагогічного університету імені К.Д. Ушинського» за адресою: вул. Старопортофранківська, 36, Одеса, Україна, 65020.

Автореферат розісланий « 21 » листопада 2014 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради, к. ф.-м. н., доц. _____ О. Х. Тадеуш

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Сполуки телуриду кадмію (CdTe), телуриду цинку (ZnTe) та тверді розчини на їх основі ($Cd_{1-x}Zn_xTe$) викликають значний інтерес у сучасній нано-оптоелектроніці. Вони використовуються в фотоприймачах, сонячних елементах, фільтрах для інфрачервоної області спектру, детекторах рентгенівського та γ -випромінювання. Ці сполуки та тверді розчини на їх основі є перспективними фоторефрактивними матеріалами для систем оптичної пам'яті та обробки інформації.

Однією із ключових проблем на шляху створення приладів на основі CdTe і $Cd_{1-x}Zn_xTe$ є визначення енергетичних характеристик домішок і дефектів у цих матеріалах. Наявність в таких монокристалах електрично-активних центрів (ЕАЦ) (вакансій, міжвузлових атомів, різних домішок) призводить до порушення симетрії хімічних зв'язків, тобто до формування в забороненій зоні кристала енергетичних рівнів, положення та структура яких обумовлює електричні властивості матеріалу.

Важливе значення має величина темного струму, яка визначається концентрацією ЕАЦ. Темновий струм є основним джерелом електронного шуму і відповідає за зниження роздільної енергетичної здатності. Темновий струм складається як з об'ємного, так і поверхневого струмів витікання. Одним із методів зниження рівня дефектності та покращення оптичних, електричних властивостей матеріалів CdTe ($Cd_{1-x}Zn_xTe$), зменшення об'ємного струму витікання і покращення ефекту запису зображень на оптично-реєструючих наноструктурах виду *n-p-i-m* є воднева пасивація ЕАЦ у таких матеріалах. Така пасивація здійснюється у результаті вирощування монокристалів у атмосфері водню або обробки кристалу в газовому розряді атмосфери водню.

Для вибору оптимальних умов пасивації електричних центрів атомарним воднем у CdTe ($Cd_{1-x}Zn_xTe$) необхідно знати механізми цих процесів та їхній вплив на електричні, оптичні властивості та на роздільну здатність оптичного запису зображення. Існуючі моделі пасивації (метод хімічних реакцій та електростатичний) не вирішують проблему, коли власні дефекти (вакансії, міжвузлові атоми), легуючі домішки та атоми водню в кристалічній матриці створюють деформацію кристалічної ґратки. Тоді, крім електростатичної взаємодії між іонізованими H^+ або нейтральними H^0 атомами водню та ЕАЦ, існує ще взаємодія через деформаційне поле. Це в кінцевому підсумку змінює енергію зв'язку домішок з воднем та радіус захоплення. Крім цього, деформаційна складова механізму пасивації змінює умови відпалу кристала. Особливо це має місце, коли іонний (ковалентний) радіус легуючої домішки заміщення відрізняється від іонного радіуса атома матриці, а накопичення атомів водню в міжвузлах матриці зумовлює локальну деформацію ґратки.

Тому дослідження механізмів пасивації атомарним воднем ЕАЦ та її вплив на оптичні та електричні властивості монокристалів (CdTe, $Cd_{1-x}Zn_xTe$) з врахуванням електростатично-деформаційної взаємодії ЕАЦ (виду дефектів розтягу або стиску) з воднем і знаходження оптимальних технологічних умов,

що покращують структуру матеріалу, є актуальним завданням як з наукової, так і практичної сторін.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота відповідає основним напрямкам наукової діяльності Інституту фізики, математики, економіки та інноваційних технологій Дрогобицького державного педагогічного університету імені Івана Франка. Основні результати отримані в рамках виконання наступних тем:

1. "Розробка технології вирощування однорідних за складом, легування та дослідження електричних та фотоелектричних властивостей напівпровідників системи CdTe-ZnTe" (ЗФ01/03.МОН, 2001/2003, № ДР 0102U000329);
2. "Дослідження процесів деградації напівпровідникових твердих розчинів кадмій телур-цинк телур" (ЗФ04/06.МОН, 2004/2006, № державної реєстрації 0104U000893);
3. "Дослідження впливу кисню та водню на електричні властивості кадмій телур, цинк телур та твердих розчинів кадмій телур – цинк телур" (ЗФ07/08.МОН, 2007/2008, № державної реєстрації 0112U002349);
4. "Вирощування та дослідження механізмів самокомпенсації монокристалів телуридів кадмію – цинку та структур з наноклестерами для детектуючих систем радіоактивного випромінювання" 2008 – 2009 рр. № Ф25/110-2008 від 14 травня 2008 р., № ДР 0108U003870).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є з'ясування впливу обробки в атмосфері водню монокристалів (CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe), вирощених сублімацією як у вакуумі, так і в атмосфері водню, та механізмів пасивації на їх домішково-дефектну структуру, електричні та люмінесцентні властивості.

Для досягнення поставленої мети вирішувались наступні завдання:

- вирощування монокристалів CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe як у вакуумі, так і в атмосфері водню методом сублімації;
- дослідження ступеня структурної однорідності монокристалів CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe, вирощених методом сублімації, способом рентгенівської дифракції;
- розробка експериментальних методів пасивації атомарним воднем ЕАЦ виду дефектів розтягу або стиску в монокристалах CdTe, CdZnTe, вирощених з газової фази;
- комплексне дослідження електричних та фотолюмінесцентних властивостей монокристалів CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe технологічно оброблених у атмосфері водню;
- розкриття механізму пасивації атомарним воднем ЕАЦ виду дефектів розтягу і стиску в монокристалах CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe;
- дослідження впливу ступеня пасивації воднем електричних центрів на роздільну здатність оптичного запису зображень на n-p-i-m наноструктурах.

Об'єкт дослідження – монокристали CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe вирощені методом сублімації, в тому числі оброблені в атмосфері водню.

Предмет дослідження – електричні, люмінесцентні властивості як вихідних монокристалів (CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe), так і вирощених та оброблених в

атмосфері водню, а також механізм пасивації атомарним воднем ЕАЦ на основі електростатично-деформаційної моделі.

Методи дослідження. У дисертації застосовано такі методи: метод електростатично-деформаційного потенціалу для дослідження енергії взаємодії дефектів; метод вимірювання температурних залежностей темної електропровідності та спектральних залежностей фотопровідності; метод нестационарної фотопровідності для дослідження електричних і фотоелектричних властивостей; методи визначення електричних і транспортних параметрів та енергетичного положення рівнів точкових дефектів у забороненій зоні телуриду кадмію, телуриду цинку та твердих розчинів на їх основі; метод рентгенівської дифракції на дифрактометрі ДРОН-3.0; метод низькотемпературної фотолюмінесценції (ФЛ).

Наукова новизна отриманих результатів.

У рамках дисертаційного дослідження отримані нові результати:

1. Розвинуто метод пасивації атомарним воднем ЕАЦ дефектів розтягу або стиску в монокристалах телуриду кадмію та твердих розчинах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, вирощених методом сублімації.

2. Вперше запропоновано модель пасивації ЕАЦ дефектів стиску ($V_{\text{Cd}}^-, V_{\text{Cd}}^{--}$) та розтягу (V_{Cd_i}) в монокристалах телуриду кадмію та твердих розчинах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, яка базується на механізмі електростатично-деформаційної взаємодії домішок з атомарним воднем.

3. Вперше експериментально виявлено збільшення питомого електричного опору у монокристалах телуриду кадмію та твердих розчинах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x = 0.1; 0.4$) як вирощених, так і оброблених в атмосфері водню, обумовлене пасивацією ЕАЦ атомарним воднем.

4. Вперше виявлено зсув спектрального положення екситонних ліній фотолюмінесценції залежно від тривалості та температури обробки атомарним воднем монокристалів CdTe:H , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te:H}$, зумовлений електростатично-деформаційною взаємодією акцептора з атомарним воднем.

5. Вперше встановлено підсилення ефекту пасивації ЕАЦ дефектів стиску і розтягу за умови $N_H \leq N_A$ (N_H , N_A – концентрація атомів водню та акцепторів відповідно) в монокристалах телуриду кадмію та твердих розчинах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, який приводить до збільшення роздільної здатності запису оптичної інформації в оптично-реєструючих наноструктурах виду *n-p-i-m* на основі $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$.

6. Вперше на основі використання твердого розчину $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 1$) як робочого елемента в *n-p-i-m* наноструктурах, запропоновано розширення спектрального діапазону запису оптичної інформації.

Науково-практичне значення одержаних результатів.

1. Удосконалена методика вирощування високоомних якісних масивних монокристалів CdTe та $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ в атмосфері водню.

2. Отримані в дисертації результати з впливу методу обробки монокристалів CdTe та $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ в атмосфері водню на характеристики центрів люмінесценції в монокристалах CdTe:H , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te:H}$ можуть бути використані

для виготовлення $Cd_{1-x}Zn_xTe:H$ детекторів γ -, X- випромінювання та робочих елементів для оптично реєструючих середовищ на p-p-i-m наноструктурах.

3. Визначено критерії для концентрації атомарного водню, необхідної для обробки зазначених матеріалів в атмосфері водню, при яких має місце максимальний ефект пасивації ЕАЦ виду дефектів розтягу або стиску.

Достовірність результатів забезпечується використанням добре апробованих сучасних експериментальних та теоретичних методів і комп'ютерних програмних пакетів для обробки експериментальних даних.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертаційної роботи були представлені на міжнародних та вітчизняних наукових конференціях: III Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (25-30 червня 2001 р., м. Дрогобич, Україна); International on solid state crystals – Materials Science and Applications (14-18 October 2002, Zakopane, Poland); 1-а Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (УНКФН-1 з міжнародною участю) (10-14 вересня 2002 р., м. Одеса, Україна); 6th International Workshop on expert evaluation control of compound semiconductor materials & technologies. (26-29 May 2002, Budapest, Vengriya); IV Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (24-27 червня 2003, м. Дрогобич, Україна); ICHMS'2003, VIII International Conference (14-20 September 2003, Sudak-Crimea-Ukraine); II-гої Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-2 за участю зарубіжних науковців) (20-24 вересня 2004, Чернівці-Вижниця Україна); VII международная научно-практическая конференция «Современные информационные и электронные технологии» (22-26 мая 2006, м. Одеса, Україна); E-MRS 2006 Fall Meeting. Warsaw University of Technology (4-8 september 2006, Warsaw, Poland); Prosiding of the ninth Baku International Congress “Energy, Ecology, Economy” (7-9 June 2007, Baku, Azerbaijan Republic); III Українська наукова конференція з фізики напівпровідників (УНКФН-3) (17-22 червня 2007 р., м. Одеса, Україна); III Міжнар. наук.-техн. конф. "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології" (СЕМСТ-3) (2–6 червня 2008 р., м. Одеса, Україна); VI Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, 23-26 вересня 2008, м. Дрогобич, Україна); Международная научная конференция (15-18 октября 2013 г., г. Минск, Беларусь); VII Міжнародна школа-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників” (28 вересня – 1 жовтня, м. Дрогобич, Україна); 12 th International Conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science” (TCSET'2014) (12 February – 1 March 2014 p., Lviv-Slavske, Ukraine).

Особистий внесок здобувача. У всіх наукових працях, опублікованих у співавторстві, дисертант брав участь у постановці та обґрунтуванні задачі, проведенні експериментальних досліджень і числових розрахунків, оформленні наукових публікацій та комп'ютерній обробці результатів.

У роботах [1,2,8] брав участь у розробці технології вирощування монокристалів CdTe та $Cd_{1-x}Zn_xTe$. Зокрема, у роботах [2 – 5, 7 – 9] отримав монокристали CdTe, CdTe:Al(Cl) та $Cd_{1-x}Zn_xTe$ як вихідних, так і вирощених у атмосфері водню, а також проводив технологічну обробку в атмосфері водню. У

роботах [1 – 10] – брав активну участь в обговоренні результатів, формуванні висновків, побудові моделей і написання статей, представляв результати на наукових конференціях. У публікації [6] брав участь у побудові електрон-деформаційної моделі пасивації воднем ЕАЦ та проводив теоретичні розрахунки, а у публікації [10] – провів пасивацію у атмосфері водню в тонких плівках аморфного кремнію.

Постановка завдання і визначення напрямів дослідження здійснювалася спільно з науковим керівником згідно з планом дисертаційної роботи.

Публікації. Основні результати дисертації опубліковані в 30 друкованих роботах, з яких – 9 статей [2 – 10] у виданнях затверджених ДАК України, 1 патент на корисну модель (Україна) [1], 1 матеріал конференції [11], 19 робіт – у друкованих тезах наукових конференцій [12 – 30].

Структура дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел з 161 найменування, списку опублікованих праць. Загальний обсяг дисертації – 136 сторінок друкованого тексту, що містить 35 рисунків, 1 таблиця.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність теми дисертації, визначено об'єкт, предмет і методи дослідження, сформульовано мету й завдання дослідження, викладено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, подано інформацію про особистий внесок автора та апробацію результатів досліджень, наведено обсяг та короткий зміст дисертації за розділами.

У першому розділі проведено огляд літератури, що висвітлює опис домішково-дефектних станів та порівняльний аналіз структури енергетичних рівнів власних дефектів у забороненій зоні монокристалів CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe, вирощених різними методами. Розглянуто вплив домішок водню на електрофізичні та люмінесцентні властивості кристалів телуриду кадмію та твердих розчинів на їх основі.

Як видно із представленого огляду літератури, в наш час не достатньо розроблена технологія отримання структурно-однорідних монокристалів CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe з великим коефіцієнтом придатності робочого матеріалу > 40 % та технологія пасивації атомарним воднем ЕАЦ виду центрів розтягу і стиску. Не розкрито питання про вплив локальних деформаційних полів, створених точковими дефектами розтягу або стиску на ступінь пасивації (тобто, на енергію взаємодії дефекту з атомарним воднем і радіус їх взаємодії) цих дефектів атомарним воднем та критерію співвідношення між пасивуючими дефектами та концентрацією домішок водню при якому має місце підсилення ефекту пасивації ЕАЦ. Не досліджено вплив ефекту пасивації атомарним воднем електрично-активних дефектів виду стиску та розтягу на роздільну здатність запису оптичної інформації в оптично-реєструючих наноструктурах виду *n-p-i-m* на основі Cd_{1-x}Zn_xTe. Вище сказане в цілому і визначає поставлені питання та задачі, які розв'язуються в даній дисертаційній роботі.

У другому розділі описано методики отримання високоомних монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, вирощених методом сублімації як у вакуумі, так і в атмосфері водню [1-2,12], проведено дослідження структурного аналізу цих монокристалів [5,7], а також описано методи пасивації атомарним воднем (температурний відпал у атмосфері водню та газовий розряд).

Процес отримання монокристалів поділено на два етапи: синтез твердого розчину ($\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) і безпосереднє формування кристалів з газової фази. Такий поділ дає змогу на першому етапі підібрати умови для отримання однорідної шихти, хімічний склад якої лежить в області гомогенності $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, а на другому – забезпечити умови для формування монокристалів достатньо великих розмірів (діаметром ~ 18 мм і довжиною ~ 40 мм).

Синтез шихти проводився у вакуумованих ($\sim 10^{-5}$ Тор) циліндричних ампулах із плавленого кварцу. Ампули почергово протравлювалися у водному розчині NaOH та “царській горілці” і багатократно промивалися бідистильованою водою та просушувалися. Безпосередньо перед завантаженням проводилась температурно-вакуумна дегазація ампул впродовж кількох годин за температури ~ 1100 °С. Вихідними компонентами для синтезу використовувалися елементи Cd , Zn і Te номінальної чистоти 99.9999% (марки “Екстра”). Для отримання нелегованих монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ дані елементи брались у стехіометричному співвідношенні.

Вирощування монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ проводилось на установці, в якій забезпечувався трирівневий температурний режим [2]. Основні умови випаровування відбувалися при $t_2 = 980$ °С, а кристалізації при $t_3 = 975$ °С. Різниця цих температур підтримувалась у межах $4 \div 5$ градусів ($t_3 < t_2$). За рахунок температури третьої секції t_1 проводилось регулювання ступеня перенасичення пари на фронті кристалізації. Ця температура перевищувала температуру t_2 на $3 - 4$ °. Однак основним температурним режимом слід вважати температуру t_2 . Від її величини залежить вибір температури t_1 і t_3 . Температура t_2 підбиралася на 100 °С менше температури солидус заданого складу, вибраного для вирощування. Ампула в установці витягувалась вгору зі швидкістю $0.2 - 0.3 \frac{\text{мм}}{\text{год}}$. Зародження кристалу відбувалося в капілярі ампули.

Структурний аналіз монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ проводили методом рентгенівської дифракції на дифрактометрі ДРОН-3.0 з використанням $\text{Cu} - \text{K}_\alpha$ випромінювання. Спосіб сканування ($\theta/2\theta$) здійснювався в діапазоні кутів 2θ від 10° до 90° . Дифрактограми уточнювали методом Рітвельда з використанням програми Fullprof [5,7,19].

Аналіз рентгенівських дифрактограм зразків $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$, вирощених методом сублімації, виявив наявність однієї фази зі структурою ZnS (гранецентрована кубічна ґратка) в просторовій групі $F - 43 m$.

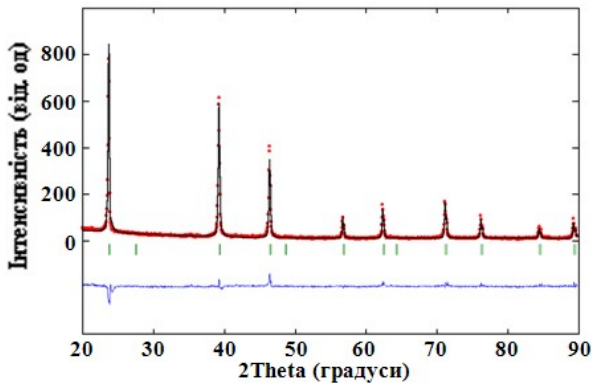


Рис. 1. Експериментальна (1), розрахункова (2) дифрактограми та різницевий (2) профіль рентгенівських максимумів.

з точністю експерименту, а не з різницею в періодах ґратки, про що свідчить висока структурна однорідність монокристалічного зливку за складом по всій його довжині.

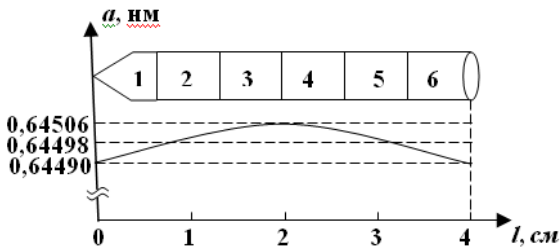


Рис. 2. Схематичний поділ кристалу по довжині зливку

1 – початок росту; 6 – кінець росту.

ґратки вздовж монокристалічного зливку $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ коефіцієнт придатності робочого матеріалу дорівнював приблизно 80 %.

У *третьому розділі* описано методику досліджень та приведено результати експериментальних вимірювань електричних [2,3,5] та фотолюмінісцентних властивостей [4,7-9,11] як вихідних монокристалів (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$), так і вирощених та технологічно оброблених у атмосфері водню.

Однак метод сублимації вирощування монокристалів (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) не позбавляв повністю електрично-активних домішково-дефектних центрів виду розтягу або стиску. Найбільш типовими і повторюваними були структурні дефекти (вакансії, міжвузлові атоми, домішки, дислокації) та комплекси, які формувалися на їх основі. Таким чином, проблема структурної однорідності монокристалів (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) не є другорядною, оскільки від виду дефектів і їх концентрацій залежать основні параметри даних монокристалів, зокрема їх питомий опір, рухливість та час життя носіїв заряду [13 – 16,18,21 – 24,27].

Електричні та фотоелектричні властивості досліджуваних монокристалів вимірювались в інтервалі температур $80 \div 300 \text{ K}$ і при напрузі, величина якої знаходилася в межах лінійної залежності ВАХ, а спектри фотолюмінесценції вимірювались при температурі 4 K .

На рис. 3 подано температурні залежності темної електропровідності зразків, взятих з різних частин зливку по його довжині. Як видно з рисунку,

На рис. 1 подано графічні результати уточнення структури зразка $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, де наведені експериментальна, розрахункова дифрактограми та різницевий профіль положення рентгенівських максимумів. На основі дифрактограм розраховано сталі елементарної ґратки. Період ґратки кристалу в різних частинах зразка (рис. 2) практично не відрізняються, тобто різниця значень параметра ґратки $a_{i+1} - a_i \approx 10^{-5} \text{ \AA}$, $i = 1 - 5$. Це пов'язано

Таким чином, метод сублимації дозволяє вирощувати монокристали (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) структурно-однорідними за довжиною зливку з концентрацією точкових ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ при 300 K) і лінійних дефектів $N_l \leq 10^5 \text{ см}^{-2}$. Крім цього, за рахунок малої зміни параметра

електропровідність зразків змінюється в залежності від величини активаційних рівнів у домішкочивій області [2,9].

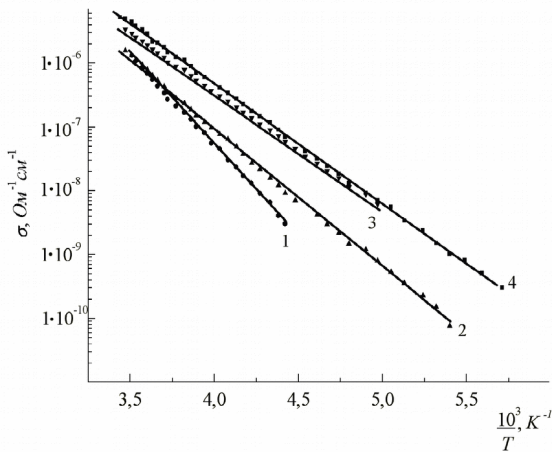


Рис. 3. Температурна залежність темної електропровідності вихідних зразків $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ (без технологічної обробки) взятих різних частин злитку. Прямі 1, 2, 3, 4 – зразки взяті з різних частин відповідно до рис. 2.

На рис. 4 показано найбільш характерні температурні залежності електропровідності зразків p -типу провідності з високою концентрацією акцепторних центрів (криві 1, 2) [3 – 5].

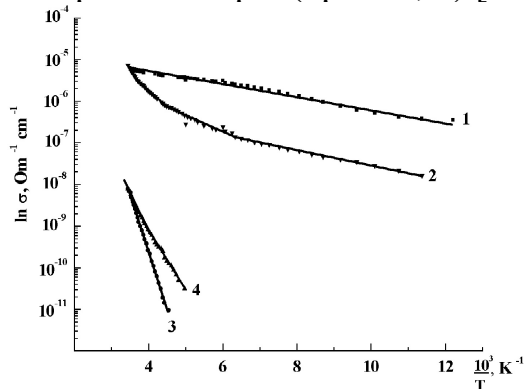


Рис. 4. Температурна залежність електропровідності $\text{Cd}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Te}$

1, 2 – вихідні низькоомні зразки ($10^5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ при 300 K); 3 – зразок 1 прогрітий у водні при 400°C протягом 160 год.; 4 – зразок 2 після дифузії водню в газовому розряді протягом 20 хвилин.

Крива 3 (рис. 4) описує температурну залежність електропровідності зразка 1 після прогрівання його у атмосфері водню при 400°C протягом 160 год. Порівняння кривих 1, 3 (рис. 4) при $T = 300 \text{ K}$ показує, що електропровідність зразка після прогрівання зменшилася практично на чотири порядки. Аналогічний характер зміни електричних властивостей p -типу $\text{Cd}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Te}$ (зразок 2) отримано в результаті дифузії водню в цей зразок при газовому розряді протягом 20 хвилин (рис. 4 крива 4). Така зміна температурної залежності питомої електропровідності (рис. 4 криві 1, 2) обумовлена участю дрібних акцепторних центрів з енергією активації близькою $\sim 0.05 \text{ eV}$. Після

Для зразків з початку росту злитку, у вимірному інтервалі температур, залежність $\sigma = f(10^3/T)$ має один нахил, який визначається енергією активації ЕАЦ величиною 0.55 eV , 0.44 eV , 0.36 eV и 0.33 eV відповідно. Зразки, які взяті в кінці росту злитку мали акцепторні центри з енергією активації $(0.12 - 0.22) \text{ eV}$ і $(0.33 - 0.38) \text{ eV}$.

Залежно від питомого опору зразка (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) вплив водню на спектр домішок і власних дефектів проявляється по-різному.

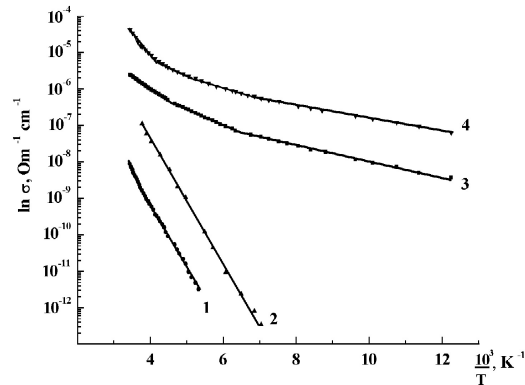


Рис. 5. Температурна залежність електропровідності $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$:

1, 2 – вихідні високоомні зразки ($10^8 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ при 300 K); 3 – зразок 1 прогрітий у водні при 400°C протягом 160 год.; 4 – зразок 2 після дифузії водню в газовому розряді протягом 20 хвилин.

технологічної обробки в атмосфері водню проявляються більш глибокі рівні з енергією залягання в різних зразках з величиною 0.28 eV , 0.39 eV і 0.55 eV . При прогріванні низькоомних зразків при $400 \text{ }^\circ\text{C}$ у вакуумі збільшення опору не спостерігалось. А тому можна стверджувати, що в зразках $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, прогрітих у водні при тих же умовах, зміна питомого опору у бік його зростання обумовлена, передусім, пасивацією дрібних ЕАЦ, які беруть участь у провідності.

На рис. 5. показано типову залежність $\sigma = f(T)$ для високоомних зразків, яка спостерігалася в цих кристалах, незалежно від того, яким із методів (із газового розряду чи прогріванням в H_2) був введений у них водень. Зовсім протилежний характер зміни електропровідності від температури має місце у високоомних зразках (рис. 5. криві 3, 4) відносно до низькоомних зразків (рис. 4 криві 3, 4) після технологічної обробки в атмосфері водню.

Більш складним є вплив водню на електричні властивості напівізолюючих кристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. У таких зразках питомий опір після технологічної обробки в атмосфері водню переважно зменшувався. Як відомо, напівізолюючі кристали з питомим опором порядку $10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ є компенсованими і мають два типи домішок, які вже при низьких температурах були іонізованими. Отже, в цьому випадку в утворенні комплексу можуть брати участь іонізовані акцептори або донори і водень. При цьому за участю водню утворювався електрично неактивний комплекс і домішковий центр (донор або акцептор), який при низьких температурах може брати участь в електропровідності, як самостійна домішка.

Одним з найбільш інформативних методів, що використовувався для тестування дефектів у монокристалах, є метод низькотемпературної ФЛ. Він особливо ефективний для діагностики домішково-дефектних станів у монокристалах (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) після впливу зовнішніх технологічних обробок.

Завдяки високій чутливості методу вдалось встановити природу центрів люмінесценції, аналізувати домішково-дефектний склад монокристалів, вивчити особливості поверхневих рекомбінаційних центрів, електрон-фононну взаємодію, а також визначати оптимальні режими технологічних обробок.

Типовою для $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, була наявність смуги ФЛ в спектральній області $1,35 - 1,65 \text{ eV}$ (рис. 6) [7,11]. Ця смуга може повністю зникати у випадку більш глибокого очищення вихідних матеріалів Cd, Zn і Te. При цьому більш чітко проявлялася Y-смуга, яка пов'язана з випромінюванням за участю A-центрів (донорно-акцепторна пара, яка складалася з акцепторної вакансії металу Cd або Zn, що захоплювала два електрони і донорної домішки, яка віддає один електрон) та смуга $(e - A) + (D - A)$.

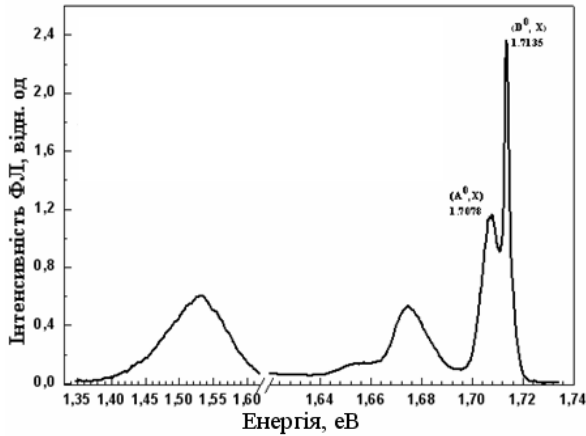


Рис. 6. Спектри ФЛ $\text{Cd}_{0,80}\text{Zn}_{0,20}\text{Te}$, вирощеного у вакуумі

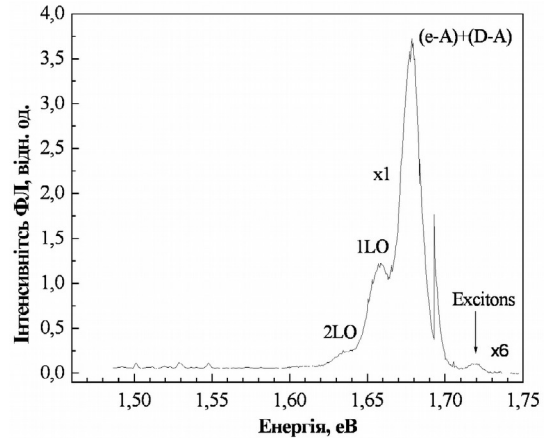


Рис. 7. Спектр ФЛ $\text{Cd}_{0,85}\text{Zn}_{0,15}\text{Te}$, вирощеного із шихти, синтезованої в атмосфері водню

На рис. 7. приведений спектр ФЛ $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ з $x = 0,15$, вирощеного із шихти, синтезованої в атмосфері водні. Як видно з рис. 7, більшість смуг ФЛ, які спостерігалися у монокристаллах вирощених у вакуумі (рис.6), у даному випадку не спостерігається. Практично відсутня смуга ФЛ в області $1,40 - 1,60 \text{ eV}$, а в основному проявлявся суміщений дублет $(e-A)+(D-A)$ з $h\nu_{max} = 1,677 \text{ eV}$. Необхідно зазначити, що у монокристаллах CdTe за формування дублету $1,548 \text{ eV}$ ($e-A^0$) і $1,541 \text{ eV}$ ($D-A$) відповідає комплекс $(V_{Cd}^{--} - 2D^+)^0$ [2*]. Донором у даному комплексі $(V_{Cd}^{--} - 2D^+)^0$ можуть виступати неконтрольовані домішки, які є у вихідних матеріалах Cd , Zn , Te . Таким чином, згідно з цими даними найменше число спектральних смуг ФЛ, які відповідають за наявність дефектів, проявлялися в монокристаллах $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, вирощених із шихти, синтезованої в атмосфері водню.

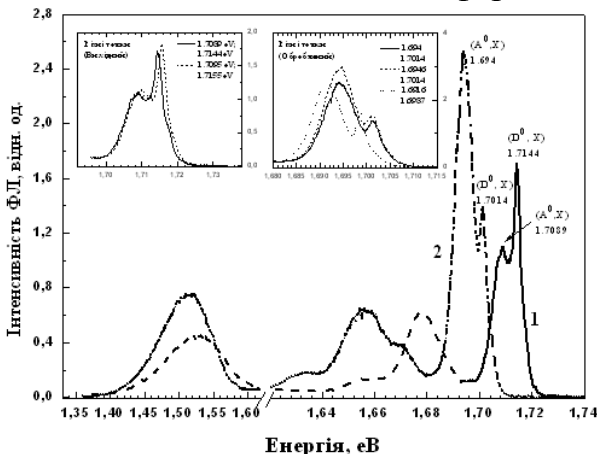


Рис. 8. Спектри ФЛ $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$, вирощеного методом сублімації: 1 – вихідний; 2 – прогрітого у атмосфері водню при температурі 400°C .

Після термообробки (рис. 8 крива 2) в атмосфері водню інтенсивність смуги, зв'язаної із А-центром, дещо зростає. Це пояснюється збільшенням концентрації донорно-акцепторних пар, яке є результатом дифузії водню у приповерхневому шарі монокристалу. У спектрі екситонної ФЛ як не прогрітого, так і прогрітого зразка проявляються два піки, які зв'язані з випромінюванням екситонів, зв'язаних на нейтральних акцепторах (A^0X) і донорах (D^0X) . При цьому ширина спектру після відпалу дещо зросла (рис. 8). Максимум випромінювання смуги (A^0X) після технологічної обробки монокристалу $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ в атмосфері водню змістився на 14 meV , а максимум (D^0X) на 13 meV в сторону довгих хвиль. Крім цього, відбулось також зміщення смуги крайової ФЛ на $\sim 22 \text{ meV}$.

Після відпалу зразків в атмосфері водню спектр випромінювання екситонів зазнав перебудови. Зокрема, відбулося зростання інтенсивності піків ФЛ екситонів, зв'язаних на нейтральних акцепторах, і зменшення інтенсивності піків ФЛ екситонів, зв'язаних на донорах. Це пов'язано з ефектом пасивації атомарним ЕАЦ виду дефектів стиску, механізмом якої є електростатично-деформаційна взаємодія акцептора з атомарним воднем.

У четвертому розділі досліджено механізм пасивації атомарним воднем домішково-дефектних станів у монокристалах CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe у межах електростатично-деформаційної моделі [6,25,26,29,30]. Зокрема, розраховано енергію взаємодії акцептора і атомарного водню в межах електростатично-деформаційної взаємодії та вплив ступеня пасивації атомарним воднем (тобто, концентрації атомарного водню) ЕАЦ виду дефектів розтягу та стиску на роздільну здатність оптичного запису зображень на n-p-i-m наноструктурах.

Існуючі моделі пасивації (метод хімічних реакцій та електростатичний) не охоплюють випадки, коли легуючі домішки (донори, акцептори), вакансії, міжвузлові атоми та кластери водню неоднорідно деформують кристалічну матрицю. Тоді, крім електростатичної взаємодії між іонізованим атомом водню H^+ або нейтральним H^0 та акцепторами (донорами), існує ще додаткова взаємодія через деформаційний потенціал. Особливо це має місце, коли іонний (ковалентний) радіус легуючої домішки заміщення відрізняється від іонного радіуса атома матриці. В цьому випадку деформаційна складова механізму пасивації змінить умови відпалу напівпровідникового кристала [26,29,30].

Енергія взаємодії $V^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r})$ (α, α' характеризує тип домішок) визначається двома складовими: електростатичною $V_{el-st}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r})$ (в межах екранованого електростатичного потенціалу) та пружною $V_{def}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r})$ (в межах деформаційного потенціалу [3*,6]):

$$V^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r}) = V_{el-st}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r}) + V_{def}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r}), \quad (1)$$

де

$$V_{el-st}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r}) = - \frac{Ze^2 \exp \left[- \frac{r}{\sqrt{\frac{k_b T \epsilon \epsilon_0}{e^2 (N_A + N_H)}}} \right]}{4\pi \epsilon \epsilon_0 r}. \quad (2)$$

$$E_{\alpha\alpha'}(r) \equiv V_{def}^{(\alpha,\alpha')}(\vec{r}) = - \frac{1}{24\pi} C_{44} \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \xi \Delta V_A \Delta V_H \frac{1}{r^3} \left(3 - 5 \sum_{x=1}^3 n_{\vec{r}x}^4 \right), \quad (3)$$

де $\vec{n}_{\vec{r}} = \frac{\vec{r}}{r}$, $\xi = \frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{C_{44}}$ – параметр пружної анізотропії кубічного кристалу,

e – заряд електрона, T – температура кристалу, k_b – стала Больцмана, C_{ij} ($i, j = 1-4$) – пружні сталі, ϵ – відносна діелектрична проникність матеріалу CdTe, ΔV_A , ΔV_H – зміна об'єму кристалічної ґратки за наявності домішок акцепторів та атомарного водню відповідно. Останній вираз у формулі (3) визначає орієнтаційну залежність енергії взаємодії. Для кристалографічних

напрямів [100], [110], [111] він приймає значення відповідно -2 , $\frac{1}{2}$, $\frac{4}{3}$, тобто при $\xi < 0$ однакові дефекти, розміщені вздовж осі [100], притягуються деформаційною взаємодією, а вздовж осі [110] або [111] – відштовхуються. Тому пружна взаємодія приводить до переважаючої орієнтації пар віддалених однакових точкових дефектів у кристалографічних напрямках виду [100]. Рівноважна відстань між акцептором і атомарним воднем визначалась з умови мінімуму енергії $V^{(\alpha\alpha')}(\vec{r})$ (1).

В межах запропонованої моделі розрахована координатна залежність енергії взаємодії комплексу $(V_{Cd}^- - H^+)^0$ $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ K}$ та побудовано залежності енергії зв'язку комплексу $(V_{Cd}^- - H^+)^0$ при різних концентраціях іонів водню $10^{16} \text{ см}^{-3} \leq N_H \leq 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ та $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ і $T = 300 \text{ K}$ (рис. 9)

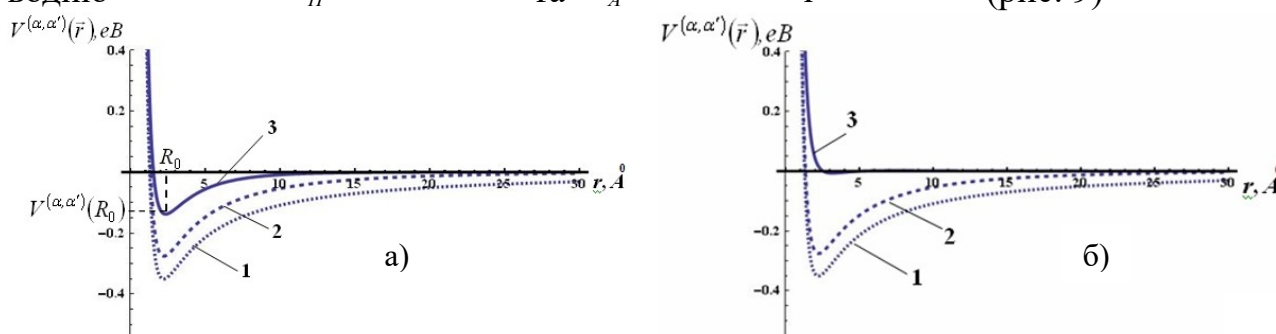


Рис. 9. Координатна залежність енергії взаємодії комплексу $(V_{Cd}^- - H^+)^0$ $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $T = 300 \text{ K}$

- а) 1 – $N_H = 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_H = 10^{19} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_H = 10^{20} \text{ см}^{-3}$
 б) 1 – $N_H = 10^{16} \text{ см}^{-3}$; 2 – $N_H = 10^{19} \text{ см}^{-3}$; 3 – $N_H = 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$

Аналіз графіків приведених на рис. 9. а, б показує, що із збільшенням концентрації водню в діапазоні $10^{16} \text{ см}^{-3} \leq N_H \leq 5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ енергія зв'язку $|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)|$ зменшувалась від 353 меВ (рис. 9. а крива 3) до $k_B T$ (рис. 9. б. крива 3), тобто **значно послаблюється** пасиваційний ефект і ступінь пасивації

$$P = \frac{|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)| - k_B T}{|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)|}$$
 прямує до нуля. Як видно з графіків (рис. 9. а, б) рівноважна відстань R_0 між точковими дефектами (водень-акцептор) корелює з результатами роботи [3*].

На рис. 10 наведено графік залежності енергії зв'язку комплексу $(V_{Cd}^- - H^+)^0$ від концентрації іонів водню (N_H) при $T = 300 \text{ K}$ та $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

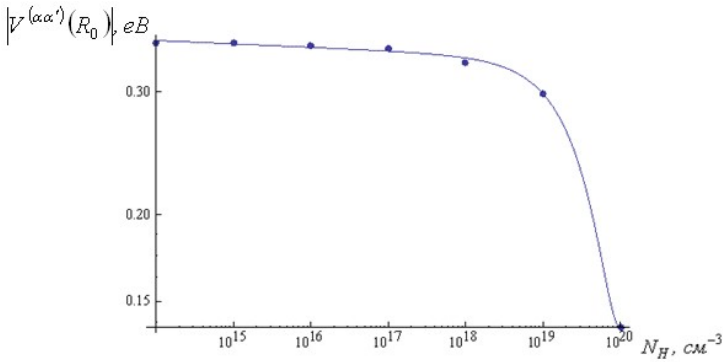


Рис. 10. Залежність енергії зв'язку комплексу $(V_{Cd}^- - H^+)^0$ від концентрації іонів водню N_H при $T = 300 K$ та $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

Аналіз концентраційної залежності енергії зв'язку комплексу $|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)| = f(N_H)$ (рис. 10) показує, що в діапазоні концентрації атомарного водню $10^{14} \text{ cm}^{-3} \leq N_H \leq 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ енергія зв'язку комплексу практично не змінювалась, а в інтервалі $10^{16} \text{ cm}^{-3} \leq N_H \leq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ з ростом N_H різко спадала.

Залежність $|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)| = f(N_H)$ можна апроксимувати наступним поліномом

$$|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)| = \left(0.412 - 3.934 \cdot 10^{-21} N_H + 1.997 \cdot 10^{-41} N_H^2 - 0.00175 \cdot \log(N_H) \right).$$

Різкий спад енергії зв'язку $|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)|$ в інтервалі $10^{18} \text{ cm}^{-3} \leq N_H \leq 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ пояснюється переважаючою дією деформаційної складової сили відштовхування.

Глибина залягання енергетичних рівнів комплексів може бути оцінена із співвідношення

$$E_{(V_{Cd}^- H^+)} = E_{V_{Cd}^-} - |V^{(\alpha\alpha')}(R_0)|. \quad (4)$$

Доданок $|V^{(\alpha\alpha')}(R_0)|$ описує зміщення енергетичних рівнів вакансій V_{Cd}^{2-} чи V_{Cd}^- , зумовлене наявністю зарядженого акцептора (донора) на рівноважній відстані R_0 від іонізованого водню з врахуванням як електростатичної, так і деформаційної взаємодій, що підтверджувалось експериментальними даними дослідження спектрів фотолюмінесценції.

Роздільна здатність оптичного запису зображень на n-p-i-m наноструктурах з напівпровідниковим елементом (високоомний телурид кадмію ($\rho = 10^7 \text{ Ом} \cdot \text{см} - 10^8 \text{ Ом} \cdot \text{см}$) або високоомний напівпровідниковий твердий розчин $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) визначається наступним співвідношенням [6,30]:

$$R_i = \frac{\left. \frac{\partial \left(\frac{Q}{e} \right)}{\partial x} \right|_{x=x_0}}{b},$$

де $i = 1, 2$ відноситься до необробленого та обробленого в атмосфері водню напівпровідникового матеріалу p-типу ($\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$) відповідно; $\frac{Q}{e} = I_0 A e^{-\frac{x^2}{r_0^2}}$;

$$A = \frac{\beta\tau}{E_g} S(e^{-k(\lambda)L} - 1) e^{-\frac{1}{\mu\tau} \int_0^L \frac{dz}{E(z)}}; \quad b = \frac{1}{I_0} \frac{\partial I}{\partial x} \quad - \quad \text{відносний крайовий градієнт}$$

інтенсивності падаючого світла; x_0 – значення координати x при якому

$$\frac{\partial^2 \left(\frac{Q}{e} \right)}{\partial x^2} = 0, \quad \text{тобто при цій умові забезпечується максимальна різка якісна}$$

границя в розподілі зарядів.

Результати оцінок показали, що для необробленого напівпровідникового матеріалу $\text{Cd}_{0.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Te}$ в атмосфері водню роздільна здатність (число штрихів на один міліметр) становить $R_1 = 6682$, а для обробленого – $R_2 = 17423$ $\left(\frac{R_2}{R_1} = 2.6 \right)$.

Два записуючі сигнали зчитуються з роздільною здатністю 150 нм і 57 нм відповідно.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі досліджено вплив пасивації атомарним воднем електрично-активних центрів (ЕАЦ) виду дефектів розтягу або стиску на структурні, електричні та фотолюмінесцентні властивості масивних монокристалів CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$, які отримано методом сублімації та технологічно оброблених у атмосфері водню. Проведені дослідження вказали на можливість використання цього методу для вирощування монокристалів (CdTe:H , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te:H}$), призначених для виготовлення неохолоджуваних детекторів високоенергетичного випромінювання та робочих елементів для оптично реєструючих середовищ на n - r - i - m наноструктурах, а також дозволили підібрати діапазон концентрацій атомарного водню для максимальної дії пасиваційного ефекту.

Основні висновки дисертаційної роботи полягають у наступному:

1. Модифіковано та запатентовано: «Спосіб вирощування монокристалів CdTe та CdZnTe ». Модифікований метод сублімації дозволяє вирощувати в атмосфері водню високоомні ($\sim 10^8 \text{ Ом}\cdot\text{см}$) та структурно-однорідні за довжиною злитку монокристали (CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$) з концентрацією точкових ($\sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ при 300 K) і лінійних дефектів $N_s \leq 10^5 \text{ см}^{-2}$.
2. Експериментально показано, що після технологічної обробки низькоомних зразків $\text{Cd}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Te}$ ($< 10^5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$; 300 K) у атмосфері водню (прогріті в атмосфері водні при $400 \text{ }^\circ\text{C}$ протягом 160 год або оброблені у газовому розряді атомарного водню) має місце різке зростання питомого електричного опору на три порядки, тоді як при прогріванні у вакуумі збільшення електричного опору не спостерігається. Таке зростання електричного опору **зумовлене пасивацією ЕАЦ з енергією активації $\sim 0.05 \text{ eV} - 0.2 \text{ eV}$.**
3. **Експериментально встановлено,** що після технологічної обробки монокристалу $\text{Cd}_{0.9}\text{Zn}_{0.1}\text{Te}$ в атмосфері водню максимум випромінювання смуги (A^0X) фотолюмінесценції змістився на 14 meV , смуги (D^0X) – на 13 meV та крайової смуги фотолюмінесценції – на 22 meV в довгохвильову область. Таке енергетичне зміщення максимумів фотолюмінесценції

пов'язане з ефектом пасивації атомарним воднем ЕАЦ виду дефектів стиску (розтягу), механізмом якої є електростатично-деформаційна взаємодія акцептора з атомарним воднем.

4. Експериментально на основі вимірної нестационарної фотопровідності та аналізу її спадної ділянки встановлено, що час життя нерівноважних електронів у монокристалічному зразку $\text{Cd}_{0,9}\text{Zn}_{0,1}\text{Te}$ знаходиться в діапазоні $\tau = 2 \text{ мкс} - 4 \text{ мкс}$.
5. Побудовано електростатично-деформаційну модель пасивації атомарним воднем електрично-активних центрів виду дефектів стиску (розтягу) у напівпровідниках CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Встановлено, що коли концентрація атомарного водню N_H не перевищує концентрацію акцепторів N_A ($N_H \leq N_A$), спостерігається підсилення ефекту пасивації ЕАЦ, а у випадку $N_H \gg N_A$ – **значне його послаблення**.
6. Теоретично отримано вираз для роздільної здатності оптично-реєструючих наноструктур на основі напівпровідникових зразків CdTe , $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$. Запропоновано на основі використання твердого розчину $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($0 \leq x \leq 1$), як робочого напівпровідникового елемента в *n-p-i-m* наноструктурах, розширення спектрального діапазону запису оптичної інформації.
7. Встановлено, що коли концентрація атомарного водню N_H не перевищує концентрацію акцепторів N_A ($N_H \leq N_A$), пасивація атомарним воднем ЕАЦ виду дефектів розтягу або стиску приводить до збільшення роздільної здатності оптичного запису зображень на наноструктурах виду *n-p-i-m*, тоді як у випадку $N_H \gg N_A$ – до зменшення.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

- 1* Кашерининов П.Г. Быстрые оптические регистрирующие среды на полупроводниковых наноструктурах для записи и обработки изображений / П.Г. Кашерининов, А.А. Томасов // ФТП. – 2008. – Т. 42, № 11. – 1391-1399.
- 2* Shin H.Y. The exciton and edge emissions in CdTe crystals / Shin H.Y., Sun C.Y. // Mat. Sci. Eng. B. – 1998. – Vol. 52. – P. – 78-83.
- 3* Rak Z.S. Ab initio modeling of hydrogen defects in CdTe / Rak Z.S., Mahanti S.D., Mandal K.C. // J. Electr. Mater. – 2009. – Vol. 38. – P. – 1539-1542.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Патент України на корисну модель № 40276, МПК (2009) С30В 23/00, С30В 11/00, Спосіб вирощування монокристалів CdTe та CdZnTe / Корбутяк Д. В., Лоцько О. П., Демчина Л. А. [та ін.]; власник Інститут фізики напівпровідників ім. В. Є. Лашкарьова НАН України. – № у 2008 13895; заявл. 02.12.2008 р.; опубл. 25.03.2009 р., Бюл. № 6 "Промислова власність". – 6 с.
2. Британ В.Б. Получение и электрические свойства кристаллов $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ / В.Б. Британ, Пігур О.М., В.Д. Попович [и др.] // Неорганические материалы. – 2005. – Т. 41, №7. – С.782-784.

3. Британ В.Б. Про пасивацію воднем електрично активних центрів в $Cd_xZn_{1-x}Te$ / Британ В.Б., Пігур О.М., Цюцюра Д.І. // УФЖ. – 2005. – Т.50, №6. – С. 594-596.

4. Пігур О.М. Вплив обробки поверхні на електричні та люмінесцентні властивості напівізолюючого CdTe, легованого хлором / О.М. Пігур, Д.І. Цюцюра, В.Д. Попович [та ін.] // УФЖ. – 2006. – Т.51, №11-12. –С. 1104-1107.

5. Британ В.Б. Вплив обробки монокристалів $Cd_xZn_{1-x}Te$ у атмосфері водню на електрично-активні центри // В.Б. Британ, Р.М. Пелешак, Д.І. Цюцюра [та ін.] // ФХТТ. – 2009. – Т. 10, № 1. – С. 41-44.

6. Британ В.Б. Електростатично-деформаційний механізм пасивації воднем електрично-активних центрів у напівпровідниках CdTe, $Cd_xZn_{1-x}Te$ / В.Б. Британ, Р.М. Пелешак, А.О. Вельченко [та ін.] // ФХТТ. – 2014. – Т. 15, №21. – С. 239-244.

7. Британ В.Б. Про домішково-дефектні стани в $Cd_xZn_{1-x}Te$, вирощених при різних умовах / Британ В.Б., Цюцюра Д.І., Пігур О.М. та ін. // Вісник державного університету “Львівська політехніка” “Електроніка”. – 2004, №513. – С.108-112.

8. Пігур О.М. Фотопровідність CdTe, легованого алюмінієм / Пігур О.М., Цюцюра Д.І., Британ В.Б. [та ін.] // Вісник державного університету “Львівська політехніка “Електроніка”. – 2004, №513. – С.142-147.

9. Британ В.Б. Вирощування та дефектність $Cd_xZn_{1-x}Te$ / В.Д.Британ, В.Д.Попович, Д.І.Цюцюра [та ін.] // Фізичний збірник НТШ. – 2002, Т.5. – С.12-15.

10. Galina Khlyar Photosensitive Amorphous Si Thin Films Prepared by Magnetron Technology / Galina Khlyar, Victor Brytan // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 2003, Vol 744. – M5.20.1.

11. Korbutyak D.V. Electric and Luminescent materials CdTe:Cl / D.V. Korbutyak, Yu I. Ivonyak, N.D. Vakhnyak [et al.] // Prosiding of the ninth Baku International Congress “Energy, Ecology, Economy”. – 7-9 June : матеріали конференції. – 2007. – P. 283-287.

12. Британ В.Б. Вирощування та дефектність ZnCdTe / Британ В.Б., Григорович Г.М., Попович В.Д. [та ін.] // матеріали III Міжнародної школи-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, Дрогобич, 25-30 червня : тези доповідей. – 2001. – С. 6.

13. D.I. Tsiutsiura On hydrogen doping of $Cd_xZn_{1-x}Te$ semiconductors / D.I. Tsiutsiura, V.V. Brytan // матеріали International on solid state crystals – Materials Science and Applications. 14-18 October, Zakopane, Poland : тези доповідей. – 2002. – P. 1927.

14. Цюцюра Д.І. $Cd_xZn_{1-x}Te$, легований воднем / Цюцюра Д.І., Британ В.Б., Шкумбатьок П.С. [та ін.] // матеріали 1-а Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-1 з міжнародною участю). Україна, Одеса, 10-14 вересня : тези доповідей. – 2002. – С. 320.

15. Tsiutsiura D.I. Influence of Hydrogen Annealing on High-Resistive CdTe / D.I. Tsiutsiura, V.D. Popovich, V.V. Brytan [et al.] // матеріали 6th International

Workshop on expert evaluation control of compound semiconductor materials & technologies. Budapest 26-29 May : тези доповідей. – 2002. – РО-G23.

16. Британ В.Б. Про можливість пасивації воднем домішкових станів в $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ / Британ В.Б., Пігур О.М., Цюцюра Д.І. [та ін.] // матеріали IV Міжнародної школи-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”. Дрогобич, 24-27 червня : тези доповідей. – 2003. – С.11.

17. Пігур О.М. До питання контактного потенціального бар'єру на контакті метал- CdTe / Пігур О.М., Британ В.Б., Попович В. Д. [та ін.] // матеріали IV Міжнародної школи-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”. Дрогобич, 24-27 червня : тези доповідей. – 2003. – С. 173.

18. Brytan V.V. Hydrogen passivation of impurities a defects in $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ growth up by sublimation method / V.V. Brytan, D.I. Tsiutsiura, O.M. Pigur // матеріали ICHMS'2003, VIII International Conference, Sudak-Crimea-Ukraine, September 14-20 : тези доповідей. – 2003. – P. 1080-1084.

19. Британ В.Б. Про домішково-дефектні стани в $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$, вирощених при різних умовах / Британ В.Б., Цюцюра Д.І., Пігур О.М. [та ін.] // матеріали II-гої Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-2 за участю зарубіжних науковців). Україна, Чернівці-Вижниця, 20-24 вересня : тези доповідей. – 2004. – С. 323-324.

20. Пігур О.М. Фотопровідність CdTe , легованого алюмінієм / Пігур О.М., Цюцюра Д.І., Британ В.Б. [та ін.] // матеріали I-гої Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-2 за участю зарубіжних науковців). Україна, Чернівці-Вижниця, 20-24 вересня : тези доповідей. – 2004. – С. 1-2.

21. Британ В.Б. Обработка кристаллов CdTe и $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Te}$ в разряде водорода / В.Б. Британ, Д.И. Цюцюра, Р.М. Пелешак // Труды VII международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии». Одесса, 22-26 мая. – 2006. – С. 97.

22. Pihur O.M. Hydrogen passivation of electrically active defects in CdTe created by the bromine methanol etching / O.M. Pihur, D.I. Tsiutsiura, D.I. Popovych [et al.] // матеріали E-MRS 2006 Fall Meeting. Warsaw University of Technology september 4-8, Poland: тези доповідей. – 2006. – P. 165.

23. Британ В.Б. Вплив обробки поверхні на пасивацію воднем донорно-акцепторних центрів в CdZnTe / Британ В.Б., Цюцюра Д.І., Шуптар Д.Д. // Матеріали III Української наукової конференції з фізики напівпровідників (УНКФН-3), 17-22 червня 2007 р., м. Одеса, Україна : тези доповідей. – 2007 р. – С. 380.

24. Пігур О. М. Про пасивацію воднем глибоких донорно-акцепторних станів у CdTe / О. М. Пігур, В. Б. Британ, Д. І. Цюцюра [та ін.] // матеріали III Укр. наук. конф. з фізики напівпровідників (УНКФН-3), 17–22 червня 2007 р., м. Одеса, Україна : тези доповідей. – 2007. – С. 424.

25. Британ В.Б. Механізми пасивації воднем домішково-дефектних станів у напівпровідниках CdZnTe / В.Б. Британ, Р.М. Пелешак, Д.В. Корбутяк //

“Лашкарьовські читання 2008”, 21-23 квітня 2008 року, м. Київ, Україна : тези доповідей. – 2008. – С. 126-127.

26. Британ В.Б. Електростатично-деформаційна модель пасивації електрично активних центрів у напівпровідниках $A^II B^VI$ / В.Б. Британ, Р.М. Пелешак, Цюцюра Д.І. [та ін.] // матеріали III Міжнар. наук.-техн. конф. "Сенсорна електроніка та мікросистемні технології" (СЕМСТ-3), 2–6 червня 2008 р., м. Одеса, Україна : тези доповідей. – 2008. – С. 252.

27. Британ В.Б. Дослідження взаємодії водню із структурними дефектами і домішками в кристалах CdTe і $Cd_{1-x}Zn_xTe$ / Британ В.Б., Корбутяк Д.В., Цюцюра Д.І. [та ін.] // матеріали VI Міжнародна школа-конференція “Актуальні проблеми фізики напівпровідників”, 23-26 вересня м. Дрогобич : тези доповідей. – 2008 – с. 102.

28. Британ В.Б. Магнитная восприимчивость монокристаллов $Cd_{1-x}Zn_xTe:V(Cl)$ выращенных методом сублимации / Британ В.Б., Пелешак Р.М., Павловський Ю.В. // материалы Международной научной конференции 15-18 октября 2013 г., г. Минск, Беларусь : тези доповідей. – 2013. – С. 141-142.

29. Британ В.Б. Модель пасивації електрично-активних центрів у монокристалах A_2B_6 в межах електрично-деформаційної взаємодії / В. Б. Британ, Р.М. Пелешак, Д.В. Корбутяк // матеріали VII Міжнародної школи-конференції “Актуальні проблеми фізики напівпровідників ” 28 вересня – 1 жовтня, м. Дрогобич, : тези доповідей. – 2010 . – С. 132.

30. Brytan V.B. Influence of Hydrogen Electric Centers Passivation Degree on the Resolving Power of Image Optic Record Devices with n-p-i-m Nanostructures / V.B. Brytan, R.M. Peleschak, A.A. Velchenko [et al.] // 12 th International Conference “Modern Problems of Radio Engineering, Telecommunications and Computer Science” (TCSET’2014) (12 February – 1 March 2014 p., Lviv-Slavske, Ukraine) : тези доповідей. – 2014 . – С. 132.

АНОТАЦІЇ

Британ В.Б. Вплив домішок атомарного водню на електричні та оптичні властивості монокристалів CdTe, CdZnTe, вирощених методом сублимації. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07. – фізика твердого тіла. Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського, м. Одеса, 2014.

У дисертації здійснено дослідження впливу домішок атомарного водню та умов відпалу на електричні та оптичні властивості монокристалів CdTe, $Cd_{1-x}Zn_xTe$ вирощених методом сублимації. У роботі проведено комплексне дослідження структурних, електричних, оптичних характеристик кристалів CdTe і $Cd_{1-x}Zn_xTe$.

Експериментально показано, що після технологічної обробки низькоомних зразків $Cd_{0,6}Zn_{0,4}Te$ ($\sim 10^5$ Ом·см; 300 K) у атмосфері водню має місце різке зростання питомого електричного опору на три порядки. Таке зростання електричного опору зумовлене пасивацією дрібних електрично-активних

центрів з енергією активації ~ 0.05 eВ – 0.2 eВ. Побудовано електростатично-деформаційну модель пасивації атомарним воднем електрично-активних центрів виду дефектів стиску (розтягу) у напівпровідниках CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe. Встановлено, що коли концентрація атомарного водню N_H не перевищує концентрацію акцепторів N_A , спостерігається підсилення ефекту пасивації електрично-активних центрів.

Ключові слова: фотолюмінесценція, монокристали CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe, термообробка, газовий розряд, метод сублимації

Британ В.Б. Влияние примесей атомарного водорода на электрические и оптические свойства монокристаллов CdTe, CdZnTe выращенных методом сублимации. – Рукопис.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических по специальности 05.27.06 – Физика твёрдого тела. Южноукраинский национальный педагогический университет имени К.Д. Ушинского, м. Одесса, 2014.

В диссертации исполнено исследование влияния смеси атомарного водорода та условий отжога на электрические та оптические свойства монокристаллов CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe, выращенных методом сублимации. Метод сублимации разрешает выращивать в атмосфере водорода высокоомные и структурно-однородные за длиной слитка монокристаллы (CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe). В работе проведено комплексное исследование структурных, электрических та оптических характеристик кристаллов CdTe и Cd_{1-x}Zn_xTe.

Модифицировано и запатентовано: «Способ выращивания монокристаллов CdTe и CdZnTe». Модифицированный метод сублимации позволяет выращивать в атмосфере водорода высокоомные ($\sim 10^8$ Ом·см) и структурно однородные за длиной слитку монокристаллы (CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe). Процесс выращивания монокристаллов било разделено на два этапа: синтез химического соединения (Cd_{1-x}Zn_xTe) и формирования кристаллов с газовой фазы. Такой раздел даёт возможность на первом этапе подобрать условия для получения однородной шихты, химический склад которой лежит в области гомогенности Cd_xZn_{1-x}Te, а на втором – соблюдать условия для формирования монокристаллов больших размеров (диаметром ~ 18 мм и длиной ~ 40 мм).

Электрические и оптические свойства исследованных монокристаллов измерялись в интервале температур 80÷300 K и при напряжении, значения которой находились в границах линейной зависимости вольтамперных характеристик, а спектр фотолюминесценции измерялся при температуре 4 K.

Экспериментально показано, что после технологической обработки низкоомных образцов Cd_{0.6}Zn_{0.4}Te ($\sim 10^5$ Ом·см; 300 K) в атмосфере водорода имеет место резкий рост удельного электрического сопротивления на три порядка. Такой рост электрического сопротивления предопределен пассивацией мелких электрически активных центров с энергией активации ~ 0.05 eВ – 0.2 eВ. Экспериментально установлено, что максимум излучение полосы (A^0X) фотолюминесценции сместился на 14 меВ, полосы (D^0X) – на 13 меВ и краевой полосы фотолюминесценции на 22 меВ в длинноволновую область.

Построено электростатически деформационную модель пассивации атомарным водородом электрически активных центров вида дефектов сжатия (растяжения) в полупроводниках CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe. Энергия взаимодействия $V(\vec{r})$ между акцептором и атомарным водородом определяется двумя составляющими: электростатической (в границах экранированного электростатического потенциала) и упругой (в границах деформационного потенциала).

Установлено, что когда концентрация атомарного водорода N_H не превышает концентрацию акцепторов N_A ($N_H \leq N_A$), наблюдается усиление эффекта пассивации электрически активных центров.

Ключевые слова: фотолюминесценция, монокристаллы CdTe, Cd_{1-x}Zn_xTe, термообработка, газовый разряд, метод сублимации.

Brytan V.B. The influence of atomic hydrogen doping on electric and optical properties of CdTe and CdZnTe monocrystals grown by the sublimation method. – Manuscript.

Dissertation on the receipt of scientific degree of candidate of physics and mathematics sciences after speciality 01.04.07. (Physics of solids). K.D. Ushinsky pivdennoukrainskiy national pedagogical university, Odessa, 2014.

Dissertation is devoted research influence of atomic hydrogen doping as well as annealing conditions on electric and optic properties of monocrystals of CdTe and CdZnTe grown by the in the hydrogen atmosphere sublimation method which allows to grow high-resistance and structurally homogeneous a long a bar CdTe and CdZnTe monocrystals. In this work complex research CdTe and Cd_xZn_{1-x}Te crystals structure, electric and optic properties have been carried out.

It is experimentally showed that after hydrogen atmosphere technological treatment of low-resistance Cd_{0,6}Zn_{0,4}Te ($\sim 10^5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$; 300 K) samples takes place three order sharp its resistivity increasing. This resistivity increasing is due to passivation of fine electric active centers with activation energy $\sim 0.05 \text{ eV} - 0.2 \text{ eV}$. Electrostatic-deformation model of atomic hydrogen passivation compressing (stretching) type defects electric active centers in CdTe and Cd_xZn_{1-x}Te semiconductors have been constructed. It is set that when the concentration of atomic hydrogen does not exceed the acceptors concentration there is strengthening of electric active centers passivation.

Key words: photoluminescence, monocrystals of CdTe, Cd_xZn_{1-x}Te, heat treatment, gas discharge, method of sublimation.

Підписано до друку 21. 11. 2014 р. Формат 60x90/16.
Папір офсетний. Гарнітура «Times New Roman».
Вид. арк. 0,9. Зам. № 312. Тираж 100. Друк на ризографі.

Видавничий відділ Дрогобицького державного
педагогічного університету імені Івана Франка
82100 Дрогобич, вул. І. Франка, 24.