

В.П. Махній<sup>1</sup>, М.П. Мазур<sup>2</sup>, І.В. Ткаченко<sup>1</sup>

## Механізми дефектоутворення у дифузійних шарах ZnSe:Te

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,  
вул. Коцюбинського, 2, 58012, Чернівці, Україна,  
E-mail: [oe-dpt@chnu.edu.ua](mailto:oe-dpt@chnu.edu.ua)

<sup>2</sup>Національний університет нафти і газу м. Івано-Франківськ,  
вул. Карпатська, 15, 76019, Івано-Франківськ, Україна

Досліджено люмінесцентні властивості шарів, створених дифузією телуру у бездомішковій розплавній кристалі селеніду цинку. Показано, що телур «заліковує» вакансії селену і генерує додаткові вакансії у катіонній підгратці. Розрахунок ансамблю власних точкових дефектів у шарах виготовлених при 920 К свідчить про те, що у них домінують однозарядні вакансії селену. Їх концентрація при 300 К досягає  $\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$  і саме ці центри відповідальні за формування інтенсивної зеленої смуги люмінесценції шарів ZnSe:Te.

**Ключові слова:** селенід цинку, ізовалентна домішка, точкові дефекти, люмінесценція.

Стаття поступила до редакції 15.05.2005; прийнята до друку 30.05.2005.

Дослідження показали, що у спектрах шарів, отриманих відпалом кристалів ZnSe у парі Te (ZnSe:Te) з'являється зелена (G) смуга з  $\lambda_m \approx 0,52 \text{ мкм}$ , інтенсивність якої  $I_G$  порівняна з інтенсивністю блакитної  $I_B$ , рис. 1. Звернемо увагу на те, що червона R-смуга у шарах ZnSe:Te при 300 К нехтувано мала при будь-яких рівнях збудження, тобто у першому наближенні можна вважати, що  $I_R \approx 0$ . Подальший відпал попередньо легованих з парової фази телуром кристалів у насиченій парі цинку призводить до деформації спектра фотолюмінесценції (ФЛ). При цьому інтенсивності всіх трьох смуг (R, G і B) складним чином залежать від  $T_a$ , що ілюструється даними табл. 1. Відзначимо, що інтенсивність G-смуги при 650°C прийнята за 100 %, а решта інтенсивностей приведені відносно неї. Як видно з таблиці, оптимальною температурою можна вважати саме 650°C, оскільки в цьому випадку досягається не лише максимальна інтенсивність зеленої смуги, але й відсутність червоної та синьої смуг, рис. 1.

Звернемо увагу на те, що зелена смуга пов'язана саме з Te, що підтверджується наступним. Відпал вихідних підкладинок у насиченій парі цинку (у тих же температурних та часових інтервалах) призводить тільки до перерозподілу інтенсивностей R- та B-смуг. Це підтверджується даними [1], а також спектром ФЛ зразків ZnSe:Zn на рис. 1.

Для аналізу механізмів формування G-смуги бажано досліджувати зразки ZnSe:Te,Zn, для яких дана смуга є домінуючою, тобто відпалених при 650°C. Спектр ФЛ таких кристалів при 300 К

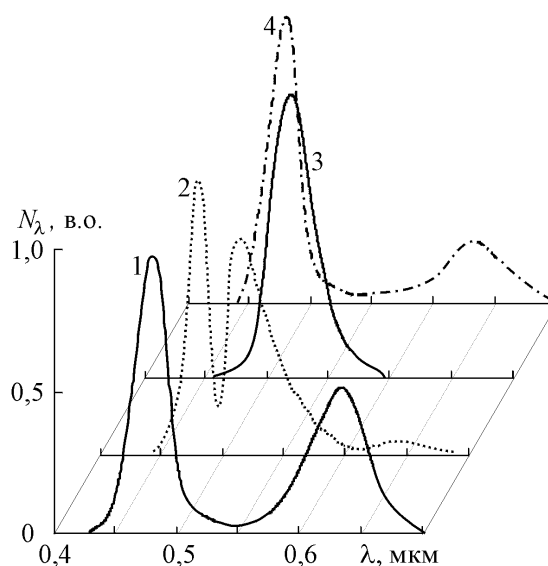


Рис. 1. Спектри ФЛ зразків ZnSe (1), ZnSe:Te (2), ZnSe:Te,Zn (3) і ZnSe:Zn при 300 К.

представлений лише однією широкою асиметричною смугою, яка характеризується наступними властивостями:

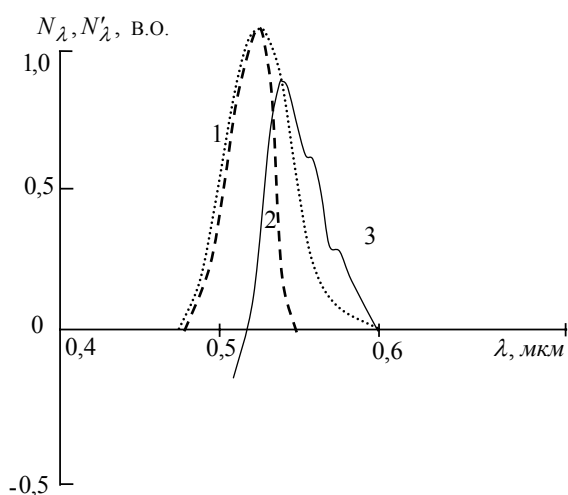
- інтенсивність випромінювання  $I_G$  лінійно змінюється з рівнем збудження;
- положення максимуму відповідає  $\hbar\omega_m \approx 2,4 \text{ eV}$  і не залежить від  $L$ ;
- зменшення рівня збудження викликає зменшення частки довгохвильового випромінювання, практично не впливаючи при цьому на форму

Залежності інтенсивностей R, G і B-смуг від температури відпалу

$T_a, ^\circ\text{C}$	$I_R$	$I_G$	$I_B$
650	0	100	0
700	1	80	0
750	3	70	0
800	40	30	10
850	120	15	40
950	360	10	20

короткохвильового “крила”, рис. 2.

Відзначимо також, що у спектрах  $\lambda$ -модульованого пропускання зразків ZnSe:Te, Zn в околі  $\lambda_m \approx 0,52$  мкм спостерігається сингулярність,



**Рис. 2.** Звичайні (1,2) та  $\lambda$ -модульований (3) спектри ФЛ кристалів ZnSe:Te, Zn при різних рівнях збудження: 1,  $3 \cdot 10^{18}$ , 2 –  $10^{16}$  квант/с.

яка відсутня в аналогічних спектрах вихідних підкладинок. Різниця енергетичного положення цих особливих точок в оптичних спектрах та  $E_g$  складає  $\sim 0,2$  еВ, що близько до енергії іонізації однозарядних вакансій цинку [2]. Для з'ясування

даного допущення проведемо кількісний розрахунок ансамблю ВТД для зразків, відпалених у парі Те при оптимальній  $T_a$ .

Оскільки  $T_a < T_{пл}$ , то у кристалах ZnSe уже існує певний ансамбль ВТД, який утворений за схемою Шотткі. Разом з тим, для того, щоб задатись числом атомів Те, необхідно знати концентрацію всіх ВТД у бездомішковому кристалі при  $650^\circ\text{C}$ . Як видно з табл. 2 концентрація  $V_{Se}^*$ , яку мають заповнити атоми телуру при  $T \approx 920\text{K}$ , складає  $\sim 7 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , що, власне, і складає верхню межу  $[Te_{Se}]$ . При цьому також приймається, що ІВД телуру генерує додаткові вакансії цинку, число яких задовільняє рівності

$$[Te_{Se}] = [V_{Se}] = [V_{Zn}^{доп\text{атк}}], \quad (1)$$

Рівняння електронейтральності для зазначених умов дефектоутворення матиме вигляд

$$p - n - [V_{Zn}'] - 2[V_{Zn}'' ] = 0, \quad (2)$$

У вираз (2) не включено асоціативні дефекти з декількох причин. По-перше, їх концентрація значно нижча ніж простих ВТД, [3]. По-друге – при вибраних умовах відпалу R-смуга експериментально не спостерігається [4]. Як видно з даних табл. 2, у зразках ZnSe:Te при 300 К домінують  $V_{Zn}'$ , які, власне, і визначають слабку діркову провідність.

Формування зеленої смуги люмінесценції відбувається за такою схемою. Збуджуюче світло переводить електрони не тільки з валентної зони у вільну, але й з від'ємно заряджених центрів  $V_{Zn}'$ . Останні при цьому стають нейтральними і можуть бути ефективними центрами рекомбінації, внаслідок

Таблиця 2

Концентрації рівноважних ВТД у кристалах ZnSe і ZnSe:Te

$[ ]_0, \text{ см}^{-3}$	ZnSe $T = 1800 \text{ K}$	ZnSe $T = 920 \text{ K}$	ZnSe:Te $T = 920 \text{ K}$	ZnSe:Te $T = 300 \text{ K}$
$n$	$2,6 \cdot 10^{15}$	$3 \cdot 10^{16}$	$5,7 \cdot 10^4$	$7,4 \cdot 10^{-16}$
$p$	$1,9 \cdot 10^{16}$	$1,45 \cdot 10^8$	$7,6 \cdot 10^{19}$	$1,3 \cdot 10^7$
$V_{Zn}$	$2,6 \cdot 10^{19}$	$1,6 \cdot 10^7$	$6,9 \cdot 10^{21}$	$7,4 \cdot 10^{13}$
$V_{Se}$	$2,6 \cdot 10^{19}$	$3,3 \cdot 10^{20}$	-	-
$V_{Zn}'$	$3,8 \cdot 10^{21}$	$9,7 \cdot 10^{16}$	$7,8 \cdot 10^{19}$	$1,25 \cdot 10^{22}$
$V_{Zn}''$	$1,7 \cdot 10^{21}$	$5,6 \cdot 10^{21}$	$8,5 \cdot 10^{12}$	$6,2 \cdot 10^{13}$
$V_{Se}^*$	$7,2 \cdot 10^{21}$	$6,9 \cdot 10^{21}$	-	-
$V_{Se}^{**}$	$6,3 \cdot 10^{18}$	$2,8 \cdot 10^{12}$	-	-

різного збільшення перерізу захоплення для електронів. Відпал зразків ZnSe:Te у парі цинку ймовірніше всього “заліковує” двохзарядні вакансії зменшується, залишаючись, однак, достатньо високою, про що свідчить наявність смуги поглинання в області енергій  $\sim 2,4$  eV, [4]. Можлива схема випромінювальних переходів в об'єктах досліджень наведена на рис. 3.

цинку, які є небажаним каналом рекомбінації для матеріалу р-типу провідності. Концентрація однозарядних вакансій цинку при цьому також Таким чином, запропонована модель дефектоутворення у кристалах ZnSe:Te та ZnSe:Te, Zn адекватно пояснює їх дослідні характеристики.

- [1] *Физика соединений  $A^2B^6$*  / Под ред. А.Н. Георгобиани и М.К. Шейнкмана. М., Наука, 320 с. (1986).
- [2] В.П. Махній, М.Д. Раранський. *Фізико-хімічні основи методів створення та аналізу точкових дефектів у напівпровідниках*. Чернівці, Рута, 135 с. (2003).
- [3] В.П. Махній, М.М. Слетов, І.В. Ткаченко. Зеленая люминесценция диф-фузионных слоев селенида цинка // *Журнал технической физики*, **74**(6), сс. 137-138 (2004).
- [4] В.П. Махній, І.В. Малімон, І.В. Ткаченко. Аналіз механізмів дефектоутворення у нелегованому селеніді цинку // *Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. Електроніка*: **201**, сс. 53-56 (2004).

V.P. Mahniy<sup>1</sup>, V.P. Mazyr<sup>2</sup>, I.V. Tkachenko<sup>1</sup>

## Mechanisms of Defect Formation in the ZnSe:Te Diffusive Layers

<sup>1</sup>Yuriy Fedjko vych' Vhernivtsy National University,  
2, Kotsybynsky Str., 58012, Chernivtsy, Ukraine,  
E-mail: [oe-dpt@chnu.edu.ua](mailto:oe-dpt@chnu.edu.ua)

<sup>2</sup>Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,  
15, Karpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76019, Ukraine

Luminescent properties are explored of layers, created by Tellurium diffusion in the unimpurity solution crystals of Zinc Selenide. It is shown, that Tellurium is «heals» the Selenium vacancies and generates additional vacancies in cation sublattice. Computation of ensemble of own point defects in layers made at 920 K testifies to that, that the one-charge vacancies of Selenium prevail at them. Their concentration at 300 K arrives at  $\sim 10^{22}$  cm<sup>-3</sup> and exactly this centres accountable for forming a intensive green stripe of luminescence of the ZnSe layers:Te.