

УДК 621.315.592

ISSN 1729-4428

Д.М. Фреїк, О.Л. Соколов, Г.Д. Матеїк¹
**Розсіювання носіїв заряду в двошаровій гетероструктурі
n-PbTe/n-PbS**

*Кафедра фізики і хімії твердого тіла,
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Галицька, 201, м. Івано-Франківськ, 76000, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua,
¹Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,
вул. Карпатська, 15, м. Івано-Франківськ, 76019, Україна*

Досліджено залежність рухливості носіїв заряду від товщини плівок n-PbTe і n-PbS, а також гетероструктури n-PbTe/n-PbS, вирощених із парової фази на (111) BaF₂. Зроблено розрахунок ефективної рухливості у припущенні розсіювання носіїв заряду на поверхні і на дислокаціях невідповідності, що утворюються на гетерограниці

Ключові слова: плівки, гетероструктури, рухливість, розсіювання, поверхня, дислокації.

Стаття поступила до редакції 11.01.2004; прийнята до друку 21.10.2004.

I. Вступ

Сульфід і телурид свинцю характеризуються двосторонньою областю гомогенності і при порівняно незначній її зміні (до ~0,01 ат. %) володіють великими значеннями концентрації носіїв заряду (~10¹⁹ см⁻³). За умови відхилення складу на бік металу матеріал має n-тип провідності, а на бік халькогену – p-тип. Вони кристалізуються у структурі NaCl з параметрами ґратки $a = 5,935 \text{ \AA}$ (PbS) і $a = 6,452 \text{ \AA}$ (PbTe). Ширина забороненої зони при 300 K складає 0,41 і 0,32 eV для PbS і PbTe відповідно [1,2].

Багатошарові структури на основі епітаксійних плівок халькогенідів свинцю почали інтенсивно вивчатися у зв'язку із можливістю їх використання в приладових структурах, що функціонують в інфрачервоній області оптичного спектру [3,4]. При цьому зауважимо, що параметри тонкопліткових активних елементів у значній мірі визначаються домінуючими механізмами розсіювання носіїв заряду. Відомо [5,7], що в області малих товщин плівок механізми розсіювання суттєво відрізняються від таких для масивних зразків. Тут, зокрема, крім розсіювання на теплових коливаннях ґратки, іонізованих центрах, [8] необхідно враховувати розсіювання на поверхні, дислокаціях невідповідності, межах росту [5-7].

У цій роботі досліджено рухливість носіїв заряду плівок PbTe і PbS n-типу, а також гетероструктур на їх основі.

II. Методика експерименту і результати

Плівки отримували з парової фази методом гарячої стінки на свіжих сколах (111) монокристалів BaF₂ [9]. Температурні режими процесу вирощування становили: температура вирощування $T_c = 820 \text{ K}$; температура стінок камери $T_w = 850 \text{ K}$; температура підкладки $T_s = (420 - 700) \text{ K}$. Швидкість росту плівок складала 1 - 3 нмс⁻¹, а їх товщина – 0,1 - 2,0 мкм.

Для досліджень були приготовлені як плівки n-PbTe і n-PbS, так і гетероструктури із рівними значеннями товщин окремих шарів і різною загальною товщиною, а також із однаковою загальною товщиною і різним співвідношенням товщин окремих шарів.

Структура плівок досліджувалася методами електронографії і рентгенографії, а електричні параметри вимірювалися компенсаційним методом у постійних електричних і магнітних полях.

З метою керування тисками парів халькогену P_{s2}, P_{Te2} у зоні осадження плівок PbS і PbTe використовували крім основного випарника ще додатковий із чистою сіркою чи телуром відповідно.

Вирощені плівки представляли собою епітаксійні мозаїчні структури з величиною монокристалічних блоків (0,2 - 1,5) мкм і кутом азимутальної розорієнтації ~15° які орієнтувалися площинами (111) паралельно до поверхні підкладки.

Результати експериментальних досліджень електричних параметрів плівок наведено на

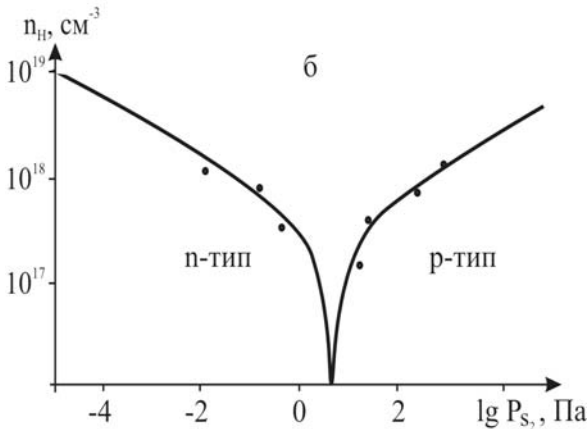
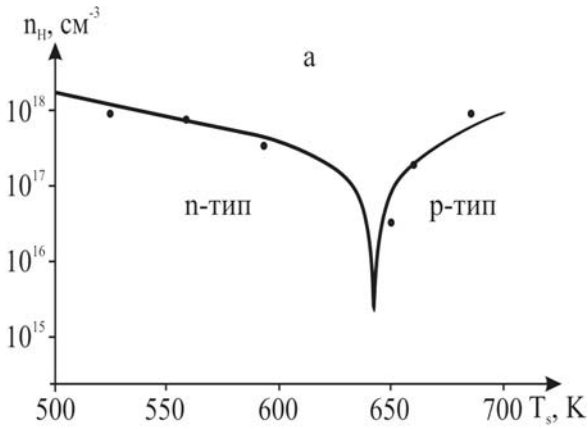


Рис. 1. Залежність холлівської концентрації носіїв заряду n_H плівок PbS від температури осадження T_s (а) і парціального тиску пари сірки P_{S_2} (б).

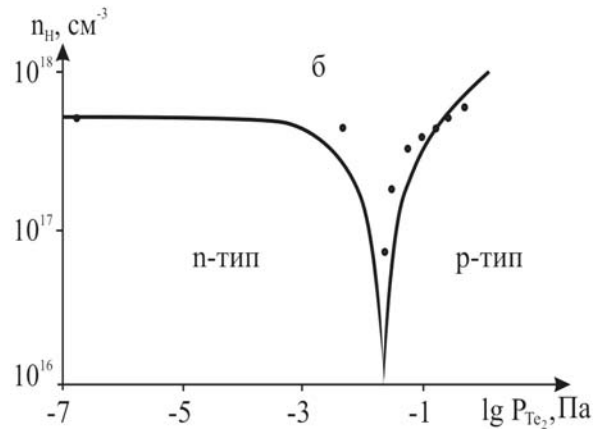
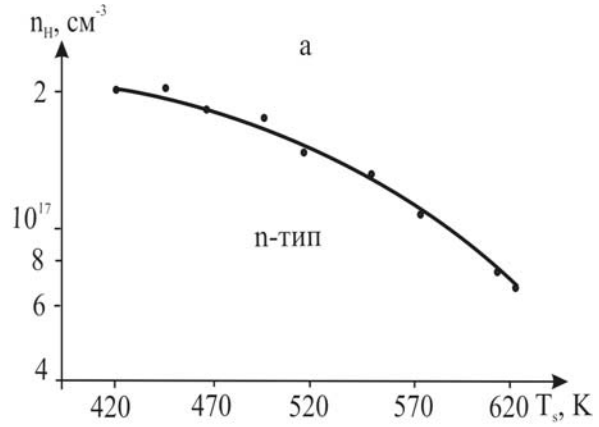


Рис. 2. Залежність холлівської концентрації носіїв заряду n_H плівок PbTe від температури осадження T_s (а) і парціального тиску пари телуру P_{Te_2} (б).

рис. 1; 2; 3,а; 5-7. Видно (рис. 1; 2), що тип провідності і холлівська концентрація носіїв заряду n_H визначаються температурами осадження T_s і значеннями парціальних парів халькогену у зоні осадження P_{S_2} , P_{Te_2} . Так, зокрема, для плівок сульфиду свинцю при сталому значенні P_{S_2} підвищення температури осадження призводить до зменшення концентрації електронів, конверсії провідності і подальшому зростанню концентрації дірок (рис. 1,а). До аналогічних змін спричиняє і зростання парціального тиску сірки при сталому значенні температури осадження T_s (рис. 1,б). Для плівок телуриду свинцю мають місце подібні залежності (рис. 2). Тут необхідно визначити тільки те, що у досліджуваних межах температур осадження T_s нам не вдалося досягти конверсії типу провідності (рис. 2,а).

Для значень технологічних факторів, що забезпечують умови вирощування плівок n-типу ($T_s = (500-640)$ К, $P_{S_2} = (10^{-4}-1)$ Па для PbS і $T_s = (420-620)$ К, $P_{Te_2} = (10^{-4}-10^{-2})$ Па для PbTe (рис. 1,2)) досліджували їх залежність від товщини (рис. 3,а; 5-7). Для одношарових плівок залежність експериментальних значень рухливостей μ_{exp} від товщини (рис. 3,а) можна представити у вигляді поліномів четвертого степеня:

$$\mu_{exp} = a_0 x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4,$$

де a_i – розмірні коефіцієнти, а x відповідає за

розмірністю товщині плівок d (м). Для досліджуваних плівок n-PbS (2) і n-PbTe (1) цими поліномами будуть вирази відповідно

$$\mu_{exp_1} = -0,45 \cdot 10^{22} d^4 + 0,179 \cdot 10^{17} d^3 - 0,614 \cdot 10^{10} d^2 + 66115,36 d + 0,0092, \quad (1)$$

$$\mu_{exp_2} = 0,184 \cdot 10^{21} d^4 - 0,266 \cdot 10^{15} d^3 + 0,303 \cdot 10^{10} d^2 + 1072 d + 0,00027. \quad (2)$$

Характерною особливістю залежностей $\mu_{exp}(d)$ є значне зменшення рухливості носіїв заряду для області малих значень товщин $d < 1,0$ мкм (рис. 3,а).

Для двошарових структур, що включають неоднорідності концентрації і рухливості носіїв заряду вираз для ефективної рухливості у загальному випадку μ_{eff} має вигляд [3]:

$$\mu_{eff} = \mu_{exp_1} (1 + \beta)^{-1} + \mu_{exp_2} (1 + \beta^{-1})^{-1}, \quad (3)$$

де $\beta = \sigma_2 d_2 / \sigma_1 d_1$, $\sigma_1 d_1$ і $\sigma_2 d_2$ – питомі електропровідності і товщини шарів n-PbS (2) і n-PbTe (1) відповідно.

III. Розрахунок рухливості носіїв заряду

Теорія. Рухливість плівок, виміряна на експерименті μ_{exp} можна представити згідно правила Маттіссена як:

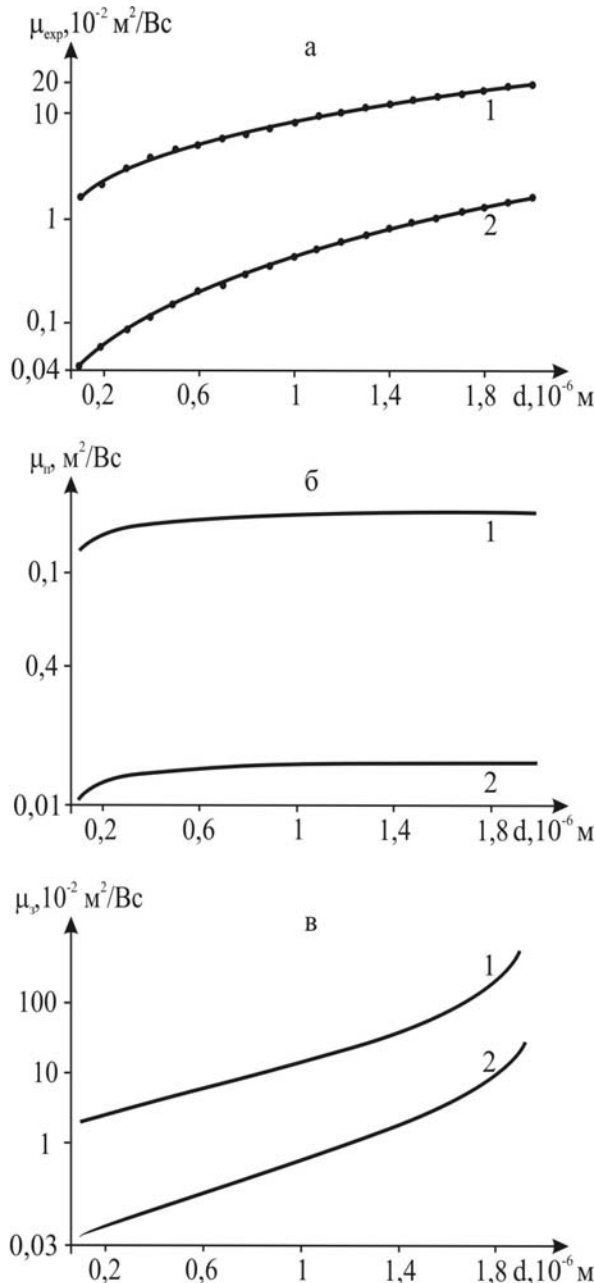


Рис. 3. Залежність експериментально визначеної $\mu_{ср}$ (а), поверхневої $\mu_{п}$ (б) та залишкової $\mu_{з}$ (в) рухливості плівок n-PbTe (1) і n-PbS (2) від товщини d.

$$\frac{1}{\mu_{ср}} = \frac{1}{\mu_{п}} + \frac{1}{\mu_{з}} + \frac{1}{\mu_{v}}, \quad (4)$$

тут $\mu_{п}$ – рухливість носіїв заряду, обумовлена розсіюванням на поверхні (поверхнева); $\mu_{з}$ – залишкова рухливість, яка враховує розсіювання на дислокаціях невідповідності гетеромежі, міжзеренне розсіювання, дефектах росту; μ_{v} – рухливість монокристалу (об’ємна).

Рухливість, пов’язана із розсіюванням на поверхні можна розрахувати згідно [5,8]:

$$\mu_{п} = \mu_{v}(1 + \lambda/d)^{-1}, \quad (5)$$

де λ – середня довжина вільного пробігу вільних носіїв заряду.

Об’ємну рухливість μ_{v} , характерну для монокристалів визначили з врахуванням розсіювання на екранованому кулонівському потенціалі вакансій, деформаційних потенціалах акустичних і оптичних фононів, поляризаційному потенціалі оптичних фононів і взаємодії між носіями (таблиця) [8].

Рухливість носіїв заряду, зумовлену розсіюванням на дислокаціях невідповідності, можна оцінити з двох різних позицій. Перша з них полягає в тому, що дислокації невідповідності, що утворюються на межі “плівка-підкладка” можна розглядати як заряджені включення – деякі мікрообласті електростатичного поля, які призводять до зменшення рухливості носіїв заряду. Так, зокрема, дислокація у кристалі n-типу є не що інше як лінійний від’ємний заряд, навколо якого скупчений позитивний вже об’ємний заряд. Носій заряду – електрон, який рухається у електростатичному полі дислокації зазнає розсіювання. За умови, що окрема дислокація – заряджений циліндр, для рухливості будемо мати вираз [3]:

$$\mu_{d} = \mu_{v}(1 - \delta),$$

$$\text{де } \delta \approx \frac{\pi R^2}{d} \sqrt{N_{п}}.$$

Тут δ – доля об’єму, зайнятого циліндрами об’ємного заряду дислокації; R – радіус цього циліндра; $N_{п}$ – поверхнева густина дислокацій. Тоді

$$\mu_{d} = \mu_{v} \left(1 - \frac{\pi R^2}{d} \sqrt{N_{п}} \right). \quad (6)$$

Таблиця

Значення основних величин, які використовувались при розрахунках рухливостей

Величина	Позначення і розмірність	Значення
Об’ємна рухливість (при максимальній товщині)	$\mu_{v}, \text{ м}^2/\text{Вс}$ (PbTe-n)	0,19
	$\mu_{v}, \text{ м}^2/\text{Вс}$ (PbS-n)	0,015
Довжина вільного пробігу	$\lambda, \text{ м}$	$5 \cdot 10^{-8}$
Швидкість електрона	$v, \text{ м/с}$	$1 \cdot 10^5$
Концентрація носіїв	$n, \text{ м}^{-3}$	10^{24}
Заряд електрона	$e, \text{ Кл}$	$1,6 \cdot 10^{-19}$
Стала Планка	$\hbar, \text{ Дж}\cdot\text{с}$	$1,05 \cdot 10^{-34}$
Ефективна маса	$m^*, \text{ Кг}$ (PbTe-n)	$1,72 \cdot 10^{-30}$
	$m^*, \text{ Кг}$ (PbS-n)	$0,112 \cdot 10^{-30}$
Провідність при 300 К	$\sigma_1, \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ (PbTe-n)	350
	$\sigma_2, \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ (PbS-n)	73

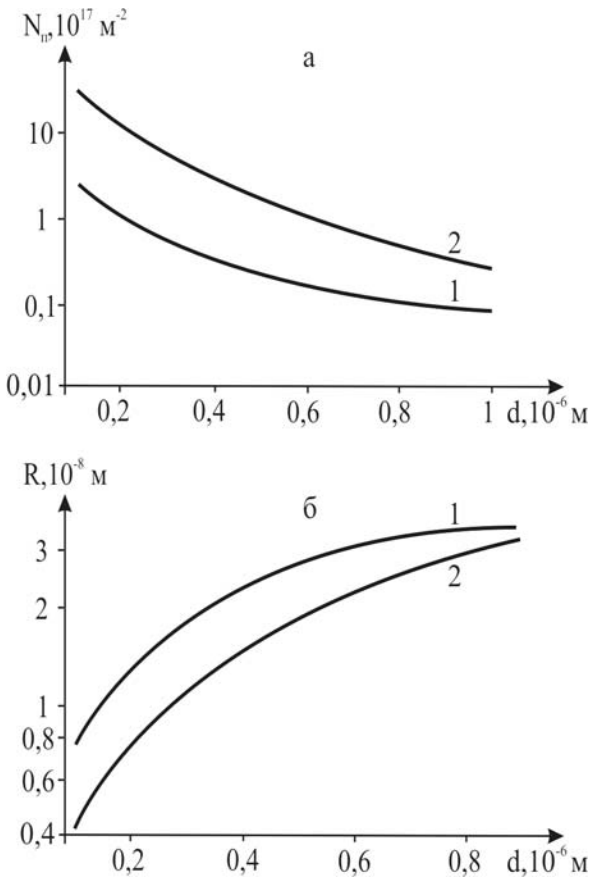


Рис. 4. Залежність поверхневої густини N_n (а) і радіуса R (б) дислокацій для плівок n-PbTe (1) і n-PbS (2) від товщини d на кристалах (111) BaF₂.

З іншого боку, розсіювання на дислокаціях можна представити у наближенні часу релаксації $\langle \tau \rangle$:

$$\mu_d = \frac{e \langle \tau \rangle}{m^*},$$

де m^* – ефективна маса носіїв заряду; e – заряд електрона. Так як час релаксації визначається співвідношенням [10]

$$\langle \tau \rangle = \frac{3}{8RN_n v},$$

вираз для рухливості буде

$$\mu_d = \frac{3e}{8RN_n v m^*}. \quad (7)$$

Тут v – дрейфова швидкість розсіювання електронів. Вирази (6) і (7) за умови рівності дають можливість зробити оцінку зміни радіуса R і поверхневої густини N_n дислокацій від товщини плівки. Необхідні дані, використані при розрахунках, наведено у таблиці.

3.2. Одношарові плівки. Розраховані значення поверхневої рухливості μ_n згідно (5) наведені на рис. 3,б. Зауважимо, що для тонких плівок можна чекати різних ефектів як на середній довжині вільного пробігу носіїв заряду так і на дебаївській довжині екранування. У нашому випадку максимальне значення для цих двох товщин складає $\lambda = 50$ нм [3] (таблиця), що набагато менше за мінімальні значення товщини (≈ 100 нм)

досліджуваних плівок. У зв'язку із цим поява розмірних ефектів малоімовірна.

Залишкову рухливість μ_3 , розраховано із співвідношення (4) за відомими значеннями μ_{exp} (рис. 3,а), μ_n (рис. 3,б) та μ_v (таблиця), зображено на рис. 3,в. Видно, що із збільшенням товщини плівок у зазначеному інтервалі, вона зростає.

Поверхнева густина N_n (рис. 4,а) і радіус R (рис. 4,б) дислокацій із товщиною плівок змінюються у протилежних напрямках: із ростом товщини плівок N_n зменшується, а R – зростає. Таке зменшення густини дислокацій пов'язане із віддаленням від їх джерела – межі “підкладка-плівка”. Причина збільшення радіуса дислокацій також очевидна, вона пов'язана із зростанням розмірів об'ємного електричного заряду.

3.3. Двошарові структури. На рис. 5 – крива 1 подано експериментальну залежність ефективної рухливості для гетероструктур n-PbTe/n-PbS від загальної товщини за умови рівності товщин одношарових плівок ($d_1 = d_2$). Крива 2, показана пунктиром на рис. 5, розрахована шляхом підстановки значень рухливостей μ_{exp_1} (1) і μ_{exp_2} (2) окремих шарів у вираз (3). Видно, що розраховані значення рухливості носіїв заряду гетероструктури завжди більші за визначені експериментально. Це означає, що при аналізованих товщинах плівок існують ще додаткові механізми розсіювання носіїв заряду, відмінні від розсіювання на поверхні.

Експериментальна крива, що визначає залежність ефективної рухливості носіїв заряду в гетероструктурі від співвідношення товщин d_1/d_2 окремих одношарових плівок зображена на рис. 6. Характерний вигин для співвідношення товщин $d_1/d_2 = 0,3 - 0,6$ пояснюється різними значеннями швидкостей зміни рухливостей для окремих одношарових плівок за товщиною (рис. 3,а). Крива (рис. 6 – пунктир), що відповідає розрахованим значенням згідно (3), як у попередньому випадку (рис. 5), йде вище за експериментальну (рис. 6 – суцільна лінія). Отриманий результат підтверджує вище зроблений висновок про наявність додаткового

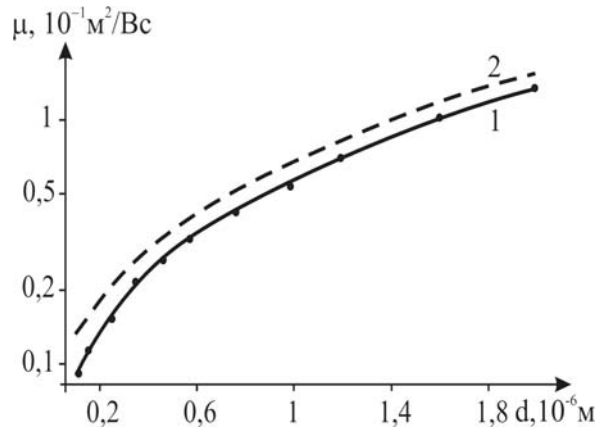


Рис. 5. Залежність ефективної рухливості гетероструктури n-PbTe/n-PbS від товщини d за умови рівності товщин ($d_1 = d_2$) одношарових плівок: 1 – експеримент; 2 – розрахунок згідно (3).

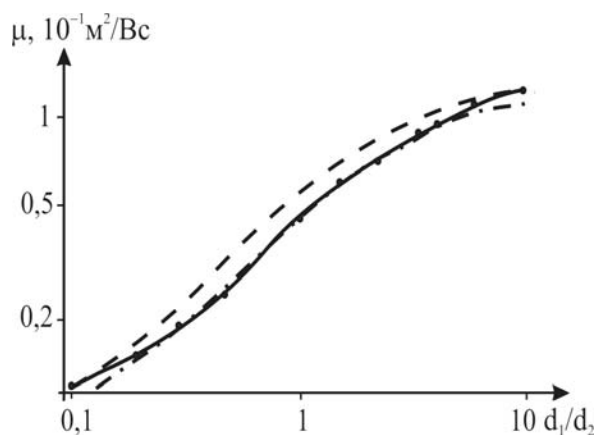


Рис. 6. Залежність ефективних рухливостей гетероструктури n-PbTe /n-PbS від відношення товщин d_1/d_2 окремих шарів за умови сталого значення загальної товщини: • – експеримент; — — — розрахунок згідно (3); - · - · - розрахунок для розсіювання на дислокаціях згідно (6).

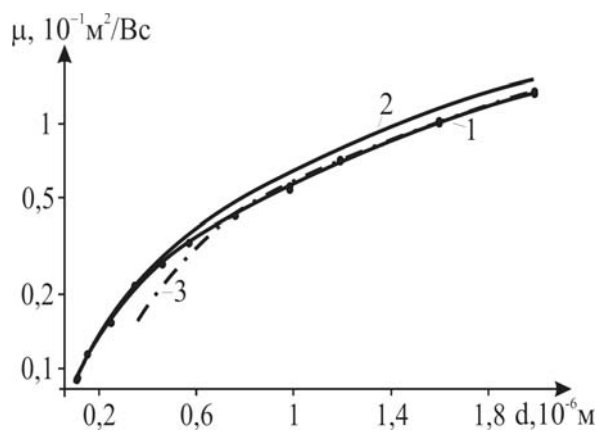


Рис. 7. Залежність ефективних рухливостей гетероструктури n-PbTe /n-PbS від товщини d за умови рівності товщин ($d_1 = d_2$) одношарових плівок: 1 – експеримент; 2 – розрахунок для поверхневого розсіювання згідно (5); 3 – розрахунок для розсіювання на дислокаціях згідно (6).

механізму розсіювання.

Додаткове розсіювання носіїв заряду в гетероструктурі n-PbTe/n-PbS на (111) BaF₂ може бути обумовлене утворенням дислокацій невідповідності за рахунок різниці періодів ґраток телуриду і сульфїду свинцю. Зауважимо, що згідно [3] критична товщина утворення сітки дислокацій складає всього 2 - 3 нм.

Рухливість розраховану згідно (6), що враховує розсіювання на дислокаціях невідповідності показано на рис. 6 і рис. 7 (штрихпунктирні лінії). У якості об'ємної рухливості μ_v використовували $\mu_{eff}(d)$, розраховану із співвідношення (3). У якості параметра $d = 1,6$ мкм при обрахунку залежності рухливості від відношення d_1/d_2 (рис. 6) вибирали дійсні значення товщини плівки PbTe для інтервалу $0,5 \leq d_1/d_2 \leq 10$ і PbS для інтервалу $0,1 \leq d_1/d_2 \leq 2$. Із наведених залежностей видно, що значення μ_d поблизу $d_1/d_2 = 0,1$ і 10 менші від експериментальних. Цю відмінність за умови малої товщини одного із шарів гетероструктури можна пояснити переважанням розсіювання на поверхні. Добра відповідність між розрахунками і експериментом має місце для значень $0,5 < d_1/d_2 < 2$ (рис. 6). З рис. 7 видно, що розсіювання на дислокаціях є домінуючим для гетероструктури із загальною товщиною більшою за $d > 0,7$ мкм. Для області менших товщин $d < 0,5$ мкм переважає розсіювання на поверхні (рис. 7 – крива 2).

IV. Висновки

1. Виконано порівняння експериментальних значень рухливостей носіїв заряду із розрахованими, що визначають розсіювання на поверхні, дислокаціях невідповідності для епітаксійних плівок n-PbTe, n-PbS, а також гетероструктури n-PbTe /n-PbS на (111) BaF₂.
2. Показано, що із збільшенням товщини $d = 0,1 - 2$ мкм, як одношарових плівок, так і гетероструктур їх рухливість зростає в межах одного порядку величини.
3. Встановлено, що якщо для товщини гетероструктури $d < 0,5$ мкм переважає розсіювання носіїв заряду на поверхні, то при $d > 0,7$ мкм – дислокаціях невідповідності.

Фреїк Д.М. – заслужений діяч науки і техніки України, доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедрою фізики і хімії твердого тіла;

Соколов О.Л. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Матеїк Г.Д. – кандидат фізико-математичних наук, викладач кафедри фізики новітніх технологій.

- [1] Н.Х. Абрикосов, Н.Е. Шелимова. Полупроводниковые материалы на основе соединений A^{IV}B^{VI}. Наука, Москва. 194 с. (1975).
- [2] Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, М.О. Галушак, М.В. Пиц, Г.Д. Матеїк. Кристалохімія і термодинаміка атомних дефектів у сполуках A^{IV}B^{VI}. За заг. ред. Фреїка Д.М. Плай, Івано-Франківськ. 164 с. (1999).
- [3] О.А. Александрова, Р.Ц. Бондоков, Н.В. Саунин, Ю.М. Таиров. Подвижность носителей заряда в двухслойных структурах PbTe/PbS // *Фізика і техніка напівпровідників*, **32**(9), сс. 1064-1068 (1998).
- [4] Д.М. Фреїк, В.Ф. Пасічняк, О.Л. Соколов, Б.С. Дзундза. Особливості розсіювання носіїв заряду в епітаксійних структурах на основі халькогенідів свинцю // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(3), сс. 455-459 (2004)

- [5] P.R. Vaya, J. Majht, B.S.V. Gopalam, C. Dattatrepan. Thickness Dependence of Hall Mobility of HWE Grown PbTe Films // *Phys. Stat. Sol. (a)*, **87**(341), pp 341-350 (1985).
- [6] І.В. Калитчук, В.М. Кланічка. Розсіювання носіїв заряду в плівках n-PbS // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(1), сс. 106-112 (2004).
- [7] Д.М. Фреїк, Б.С. Дзундза, І.В. Калитчук, В.М. Кланічка. Рухливість носіїв заряду і механізми їх розсіювання в плівках сульфиду свинцю // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(2), сс. 302–306 (2004)
- [8] D.M. Freik, L.I. Nykuryu, V.M. Shperun. Scattering Mechanisms of Electrons on Monocrystalline PbTe, PbSe and PbS // *Semiconductor Physics, quantum electronics and photoelectronics*, **5**(4), pp 362-367 (2002).
- [9] Д.М. Фреїк, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская. *Фізика и технология полупроводниковых пленок*. Вища школа, Львів, 152 с. (1988).
- [10] М.А. Глауберман, О.А. Кулініч, В.В. Єгоров, Н.А. Канищева, В.В. Козел. Вплив структурних дефектів у при поверхневих шарах кремнію на перетворювальні властивості інжекційно-інверсійної магніточутливої структури // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(1), сс. 38-43 (2004).

D.M. Freik, O.L. Sokolov, G.D. Mateyik¹

The Current Carriers Scattering in the Binary-Layer Heterostructures n-PbTe/n-PbS

*Department of Physics and Solid Chemistry
'Vasiliy Stefanyk' Precarpathian National University,
201, Galytska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua.
¹Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,
15, Karpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76019, Ukraine*

The dependence of current carrier mobility from thickness of n-PbTe and n-PbS films, and also n-PbTe/n-PbS heterostructures, growth from the vapour phase on (111) BaF₂ are obtain. The calculation of effective mobility has been made on the supposition that there is carrier scattering both on the surface and on dislocations that were generated by the interface.