

## ДИФФУЗИЯ КОМПОНЕНТОВ И ПРИМЕСЕЙ В КЛАСТЕРИЗУЮЩИХСЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

Л. Н. Сафронов

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия

(Получена 11 марта 1992 г. Принята к печати 24 декабря 1992 г.)

В предположении линейной зависимости энергии связи диффундирующей компоненты твердого раствора от числа сильно связанных атомов в ближайшем окружении определены коэффициенты самодиффузии и диффузии примесей в кластеризующихся твердых растворах типа  $A^{IV}B^{IV}$ , а также  $A^{IV-x}B_x^{III}C^{III}$  и  $A^{IV-x}B_x^{III}C^V$ .

Из условия минимума свободной энергии находятся равновесные значения коэффициента кластеризации для определенных значений энергии связи и температуры. Вычисленные значения удовлетворительно согласуются с измерениями этого параметра в полупроводниковом соединении  $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$ . С использованием значения коэффициента кластеризации рассчитываются функции распределения атомов по числу ближайших соседей, т. е. по энергиям связи.

В предположении, что диффузия проводится достаточно время, так что состояние твердого раствора уже не меняется во времени, общий диффузионный поток записывается в виде суммы потоков с весовыми множителями, определяемыми функцией распределения атомов по энергиям связи.

Расчеты показывают, что в кластеризованном твердом растворе коэффициент диффузии медленнодиффундирующей компоненты может быть на несколько порядков меньше, чем в однородном твердом растворе такого же состава.

Напротив, коэффициент диффузии быстродиффундирующей компоненты и примеси замещения в кластеризованном растворе может быть значительно больше, чем в гомогенном.

**Введение.** Диффузия в полупроводниковых соединениях может идти по различным механизмам, причем каждый из них управляется не только температурой и давлением паров компонент соединения, но и концентрацией доноров и акцепторов [1]. Однако в экспериментах по диффузии, выполненных в близких условиях (диапазон температур и давлений компонент), часто наблюдается большой разброс как по величинам энергии активации, так и по предэкспоненциальным множителям в классическом выражении для коэффициента диффузии. Отличаются и сами значения коэффициента диффузии [2].

С другой стороны, известно, что взаимное расположение однотипных атомов в твердом растворе зависит не только от состава, но и от температуры, при которой был выращен твердый раствор [3, 4]. Понятно, что если высота барьера для диффузии определяется составом ближайшего атомного окружения, то эффективная высота этого барьера будет меняться в зависимости от состояния твердого раствора.

Если отсутствуют эффекты упорядочения, то состояние сплава удастся описать вводя понятие коэффициента кластеризации [5]. Очевидно, что при проведении диффузии раствор будет выдерживаться при температуре, отличающейся от температуры выращивания.

Однако, если температура и время достаточны для того, чтобы компоненты твердого раствора продиффундировали на расстояние порядка расстояния между ближайшими атомами одного типа, то состояние раствора изменится за счет

коррелированного расположения атомов, что выразится в изменении коэффициента кластеризации. Поэтому при рассмотрении диффузии в твердом растворе необходимо учитывать наличие кластеров его компонент.

В данной работе проведены расчеты зависимости коэффициента кластеризации для твердых растворов типа  $A^{IV}B^{IV}$  (решетка типа алмаза) и  $A^{II}B^{II}C^{VI}$ ,  $A^{III}B^{III}C^{VI}$  (решетка типа цинковой обманки). На основе данных о зависимости коэффициента кластеризации от температуры рассчитаны поправки к коэффициенту диффузии. В зависимости от состава и температуры коэффициенты диффузии в кластеризованных и гомогенных твердых растворах могут отличаться на несколько порядков.

## 1. Состояние твердого раствора

1.1. Энергия связи и энергия активации диффузии. Состояние твердого раствора задается взаимным расположением атомов одноптипных компонент, и взаимодействие этих одноптипных атомов приводит к их коррелированному расположению в решетке.

Полупроводниковые растворы IV группы —  $A_{1-x}B_x$  (наиболее известный из них Ge—Si) — имеют решетку типа алмаза, так что каждый атом, например типа В, может быть окружен  $n = 0, 1, \dots, 4$  такими же атомами. Несколькo сложнее выглядит ситуация в случае тройных полупроводниковых соединений.

Рассмотрим наиболее типичную для полупроводниковых твердых растворов  $A_{1-x}B_xC$  решетку типа цинковой обманки (здесь А и В обозначены атомы одной подрешетки). Этот тип решетки характерен как для соединений  $A^{II}C^{VI}$ , так и для  $A^{III}C^{VI}$ .

Общий вид такой решетки приведен на рис. 1. Показано 5 слоев атомов, лежащих в плоскости (100). В случае тройных соединений можно следить за

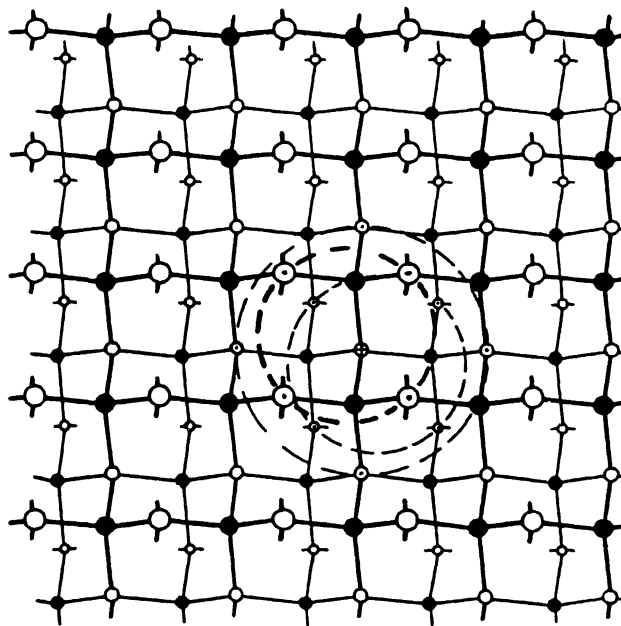


Рис. 1. Внешний вид решетки типа цинковой обманки. Показано 5 слоев атомов, лежащих в плоскости (100). В обсуждаемой модели считается, что энергия диффузионного скачка атома типа В (помечен крестиком) полностью определяется числом таких же атомов в ближайшем окружении. Однотипные атомы лежат во второй координационной сфере и помечены точками.

диффузионным перемещением атомов в одной подрешетке. Тогда каждый из атомов, например типа В, может иметь в своем ближайшем окружении  $n = 0, 1, \dots, 12$  таких же атомов.

В обсуждаемой модели считается:

— концентрация любых собственных дефектов решетки (вакансий, междоузлий и антиструктурных дефектов) всегда намного ниже концентрации компонент твердого раствора, и атомы не переходят из одной подрешетки в другую;

— энергия активации диффузионного скачка атома типа В (помечен крестиком) для определенного механизма диффузии однозначно задается числом таких же атомов в ближайшем окружении. В решетке цинковой обманки однотипные атомы лежат во второй координационной сфере, а в решетке алмаза — в первой, и могут занимать атомами типа А или В;

— энергия активации диффузионного скачка атома типа В линейно зависит от числа таких же атомов в ближайшем окружении. Для оценок предполагается, что эти изменения полностью обусловлены изменением энергии связи центрального атома.

Последнее предположение наиболее сильное. Однако, если величина активационного барьера пропорциональна суммарной энергии связи, то, видимо, можно ожидать и пропорциональную зависимость этого барьера от числа сильно связанных атомов твердого раствора в ближайшем окружении.

Действительно, расчеты энергии удаления центрального атома в кластерах  $Cd_nHg_{12-n}Te$  [°] дают практически линейную зависимость величины этой энергии для кадмия (от 3.8 до 4.25 эВ) и ртути (от 2.8 до 3.2 эВ) при изменении  $n$  от 0 до 12. В то же время энергия активации диффузии кадмия (в интервале 250—500 °С) при переходе от  $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$  к  $CdTe$  изменяется от 1.15 до 1.71 эВ [²]. Таким образом изменение энергии активации диффузии кадмия практически полностью обусловлено изменением энергии связи центрального атома и можно записать выражение для энергии активации диффузионного скачка медленно диффундирующего атома как  $E_D = E_A + \Delta E \cdot n$ ; причем  $\Delta E = (E_B - E_A) / N_n$ , где  $E_A$ ,  $E_B$  — энергии активации диффузии атомов типа В в соединениях АС и ВС соответственно, а  $N_n = 12$  для тройных соединений и  $N_n = 4$  для бинарных сплавов.

1.2. Диффузионно-контролируемая кластеризация. Пусть мы имеем кристаллическую решетку из  $N_m$  узлов в кубическом сантиметре и в ней равномерно  $N_0$  атомов типа В. Тогда атомная концентрация этих атомов в растворе  $x = N_0 / N_m$ .

Вероятность того, что узел, соседний со случайно выбранным атомом В, будет занят таким же атомом, определяется как  $P_{ВВ} = x$ , если раствор однородный. Соответственно вероятность найти рядом с узловым атомом А решетки узел, занятый атомом типа А при однородном распределении, будет  $P_{АА} = 1 - x$ .

Для неоднородных растворов, если отсутствуют эффекты упорядочения, можно ввести коэффициент кластеризации  $\beta$  [⁵]

$$P_{ВВ} = x + \beta (1 - x) \quad (1)$$

$$P_{АА} = (1 - x) + \beta x. \quad (2)$$

При  $\beta = 0$  однотипные атомы распределены равномерно, а при  $\beta = 1$  образуют крупные скопления.

Вероятность найти атом определенного типа в окружении из  $i$  таких же атомов задается биномиальным распределением и может быть записана для атомов типа В и А соответственно [⁷]

$$f_B(i) = \frac{N_n! \cdot P_{BB}^i \cdot (1 - P_{BB})^{N_n - i}}{(N_n - i)! \cdot i!}, \quad (3)$$

$$f_A(i) = \frac{N_n! \cdot P_{AA}^i \cdot (1 - P_{AA})^{N_n - i}}{(N_n - i)! \cdot i!}. \quad (4)$$

Если добавление атома типа В в окружение уменьшает приведенную энергию кристалла на  $\theta = -\Delta E/kT\theta < 0$  — (энергетический параметр), то, пренебрегая изменением объема кристалла в процессе кластеризации, можно вычислить суммарное изменение внутренней энергии кристалла

$$U = N_0\theta \cdot \sum_{i=0}^{N_n} [f_B(i) \cdot i]. \quad (5)$$

Зная распределение (3, 4), вычислим число различных способов реализации распределения с данной величиной  $\beta$ :

$$Z = \frac{N_0! \cdot (N_m - N_0)!}{\prod_{i=0}^{N_n} \{[N_0 \cdot f_B(i)]!\} \cdot \prod_{i=0}^{N_n} \{[(N_m - N_0) \cdot f_A(i)]!\}}. \quad (6)$$

Воспользовавшись формулой Стирлинга  $\ln(N!) = N(\ln N - 1)$ , получим выражение для числа состояний

$$\begin{aligned} \ln Z = & N_0(\ln N_0 - 1) + (N_m - N_0)[\ln(N_m - N_0) - 1] - \\ & - \sum_{i=0}^{N_n} \{N_0 f_B(i) \cdot [\ln(N_0 f_B(i))] - 1\} - \\ & - \sum_{i=0}^{N_n} \{(N_m - N_0) f_A(i) \cdot [\ln((N_m - N_0) f_A(i))] - 1\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Будем отсчитывать значения внутренней энергии сплава и энтропийного члена от соответствующих значений в однородном растворе ( $\Delta U = U - U_0$ ,  $\Delta \ln Z = \ln Z - \ln Z_0$ ), где  $U_0$  и  $Z_0$  вычисляются при условии, что в (1) и (2)  $\beta = 0$ . Избыток свободной энергии при использовании безразмерного энергетического параметра  $\theta$  запишется как  $\Delta F = \Delta U - \Delta \ln Z$ , где  $\Delta U$  и  $\Delta \ln Z$  рассчитываются согласно (5) и (7) с учетом сделанного замечания.

Как внутренняя энергия  $U$ , так и энтропийный член  $\ln Z$  зависят от функций распределения  $f_B$  и  $f_A$  и однозначно задаются величиной коэффициента кластеризации  $0 < \beta < 1$ . Ясно, что состояние сплава определяется тем значением  $\beta$ , при котором свободная энергия минимальна.

Область существования кластеризованного раствора — это область значений  $\theta$ , в которой справедливо соотношение  $0 < \beta < 1$ . Границы этой области в зависимости от состава  $x$  приведены на рис. 2. На рисунке, ниже нижней линии раствор однороден ( $\beta = 0$ ), а выше верхней полностью закластеризован ( $\beta = 1$ ). Эти границы зависят не только от температуры и энергии связи, но и от параметров кристаллической решетки (числа атомов в единичном клубе и количества однотипных мест в ближайшем окружении).

Если задаться определенным значением  $\Delta E$ , то можно построить  $T-x$  диаграмму, характеризующую равновесное состояние раствора при различных тер-

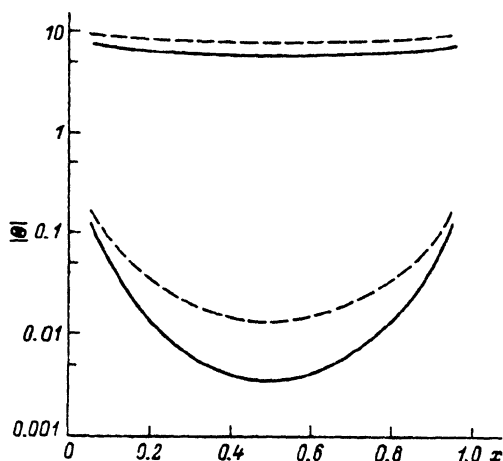


Рис. 2.  $\theta$ — $x$  диаграмма состояния сплава. Выше верхней линии сплав полностью закластеризован, ниже нижней — полностью разупорядочен. Пунктир — сплав  $A_{1-x}^{IV}B_x^{IV}$ ; сплошная линия — сплав  $A_{1-x}^{II}B_x^{II}C^{VI}$ .

мообработках. Часть этой диаграммы для  $\Delta E = 1/12$  эВ,  $N_n = 12$  и  $N_m = 1.26 \times 10^{22}$  см $^{-3}$  (что приблизительно соответствует сплавам на основе  $A^{II}B^{II}C^{VI}$  и изменению внутренней энергии 1 эВ/ат при переходе от соединения  $A^{II}C^{VI}$  к  $B^{II}C^{VI}$ ) приведена на рис. 3. На этом же рисунке приведена часть диаграммы для  $\Delta E = 1/4$  эВ,  $N_n = 4$  и  $N_m = 5 \cdot 10^{22}$  см $^{-3}$ , что соответствует аналогичным условиям для сплавов  $A^{IV}B^{IV}$ . В области над кривыми распределение компонент неоднородно, а под ними компоненты образуют фазы. Кривая, отделяющая область частичной кластеризации раствора от гомогенной, для принятого значения  $\Delta E$  лежит в недостижимой области температур (около  $10^4$  К) и здесь не приведена.

Можно определить значения  $\beta$ , при которых свободная энергия твердого раствора минимальна. Такие равновесные значения коэффициентов кла-

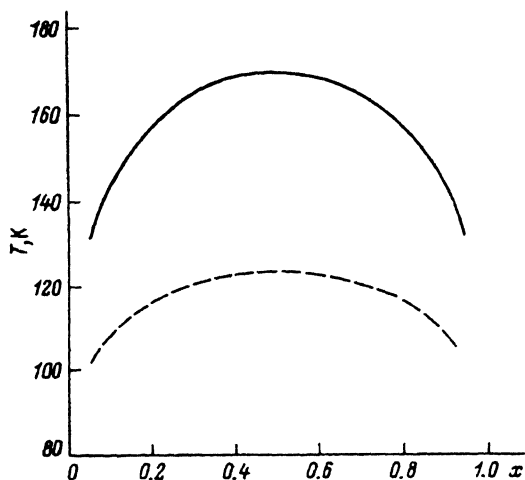


Рис. 3.  $T$ — $x$  диаграмма состояния сплава. Выше верхней линии сплав частично закластеризован, ниже нижней — компоненты образуют фазы. Пунктир — сплав  $A_{1-x}^{IV}B_x^{IV}$ ; сплошная линия — сплав  $A_{1-x}^{II}B_x^{II}C^{VI}$ .

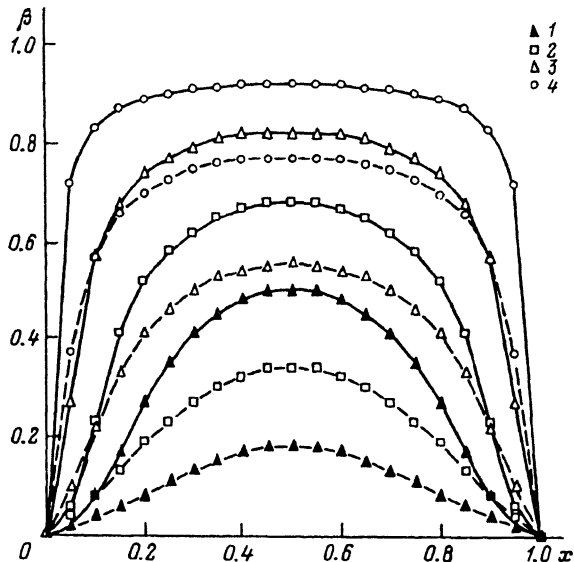


Рис. 4. Зависимость равновесного коэффициента кластеризации  $\beta$  от состава  $x$  в твердых растворах  $A_{1-x}^{IV}B_x^{IV}$  и  $A_{1-x}^{IV}C_x^{VI}$  при различных значениях энергетического параметра  $\theta$ : 1 — 0.25, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2. Пунктир — сплав  $A_{1-x}^{IV}B_x^{IV}$ ; сплошная линия — сплав  $A_{1-x}^{IV}C_x^{VI}$ .

стеризации приведены на рис. 4. Коэффициент кластеризации максимален в области составов вблизи  $x = 0.5$  и увеличивается с ростом энергии связи или с понижением температуры.

Следует отметить, что в данной работе не рассматривается вопрос о кинетике приведения раствора в равновесие, и, следовательно, не всегда в реальном твердом растворе величина  $\beta$  будет равновесной. Однако в экспериментах по диффузии обычно используются такие времена и температуры, при которых атомы диффузанта проходят расстояния, значительно превышающие дистанцию между ближайшими соседями. При этом равновесные значения  $\beta$  будут достигнуты уже на начальных этапах диффузионной разгонки.

## 2. Диффузия в сплавах

2.1. *Диффузионные потоки.* Рассмотрим диффузию меченых атомов одного сорта в сплавах. Поскольку атомы в растворе в зависимости от состава ближайшего окружения имеют разную энергию связи, то имеется несколько диффузионных потоков, каждый из которых идет со своей энергией активации.

Если в процессе диффузии величина коэффициента кластеризации уже установилась и далее не меняется во времени, то парциальные потоки просто пропорциональны числу атомов с данной энергией связи:

$$j_i = -D_i \text{grad} (f_i N).$$

В этом выражении  $j_i$  — интенсивность  $i$ -го потока;  $f_i$  — функция распределения атомов по потокам, определяемая выражениями (3) или (4);  $D_i = D_0 \exp \{-E_i/kT\}$  — коэффициент диффузии для атомов  $i$ -го потока;  $N$  — концентрация атомов.

В решетке типа цинковой обманки таких потоков 13, а в решетке типа алмаза (сплавы типа  $A^{IV}C^{IV}$ ) должно существовать 5 потоков. После диффузионно-

от скачка атом оказывается в ином окружении, но состояние раствора (а значит и функция распределения атомов) не меняется ни во времени, ни в пространстве. Тогда выражение для потоков запишется в виде

$$j_i = -f_i D_i \text{grad}(N). \quad (8)$$

Уравнение диффузии для примеси внедрения либо для диффузии одной из компонент будет выглядеть следующим образом:

$$dN/dt = D_{\text{eff}} \cdot d^2N/dx^2, \quad (9)$$

где

$$D_{\text{eff}} = D_0 (f_0 \exp \{-E_0/kT\} + f_1 \exp \{-E_1/kT\} + \dots + f_{N_n} \exp \{-E_{N_n}/kT\}).$$

Для тройных полупроводниковых соединений  $A^{II}B^{III}C^{VI}$  и  $A^{III}B^{III}C^{IV}$   $N_n = 12$ , а для сплавов типа  $A^{IV}C^{IV}$   $N_n = 4$ .

**2.2. Диффузия медленной компоненты.** Как правило, одна из двух компонент твердого раствора, находящихся в одной подрешетке, диффундирует с низкой энергией активации, а другая — с более высокой. В соответствии с этим будем называть их быстрой и медленной.

Рассмотрим диффузию медленной компоненты твердого раствора. В этом случае распределения диффундирующих атомов А и В по потокам просто повторяют распределения по энергиям связи (3) и (4), а энергетическим параметром, характеризующим энергию активации диффузии медленно диффундирующей компоненты В, будет та же самая величина  $\theta = -\Delta E/kT = (E_B^B - E_A^B)/N_n \cdot 1/kT$ , которая определяет и состояние твердого раствора. Тогда выражение для эффективного коэффициента диффузии запишется в виде

$$D_{\text{eff}} = D_0 \exp(-E_A^B/kT) \cdot \sum_{i=0}^{N_n} [f_B(i) \cdot \exp(i\theta)], \quad (10)$$

где  $D_0 \exp(-E_A^B/kT)$  — коэффициент диффузии компоненты В в соединении А, а  $\gamma_B = \sum_{i=0}^{N_n} [f_B(i) \cdot \exp(i\theta)]$  — поправка, обусловленная многопоточным характером диффузии в твердом растворе.

На рис. 5, 6 представлены рассчитанные зависимости этих поправок к коэффициенту диффузии компоненты В в случае закластеризованных и гомогенных растворов.

Видно, что при проведении диффузии при низких температурах (или соответственно в соединениях с большой энергией связи) коэффициенты диффузии в закластеризованных сплавах могут быть значительно ниже, чем в однородных. Эта разница максимальна вблизи середины области составов твердых растворов. Здесь отличия в коэффициентах диффузии могут достигать нескольких порядков величины.

**2.3. Диффузия быстрой компоненты.** Состояние раствора (т. е. коэффициент кластеризации) определяется диффузионной кластеризацией медленной компоненты. Будем считать, что при температурах разгонки быстрой компоненты состояние сплава, заданное предварительными высокотемпературными прогрессами, уже не меняется.

Тогда для диффузии быстро диффундирующей компоненты А также можно определить зависимость энергии активации диффузионного скачка  $E^A$  от числа таких же атомов А в ближайшем окружении:  $E^A = E_B^A - (i/N_n)(E_B^A - E_F^A)$ . Выра-

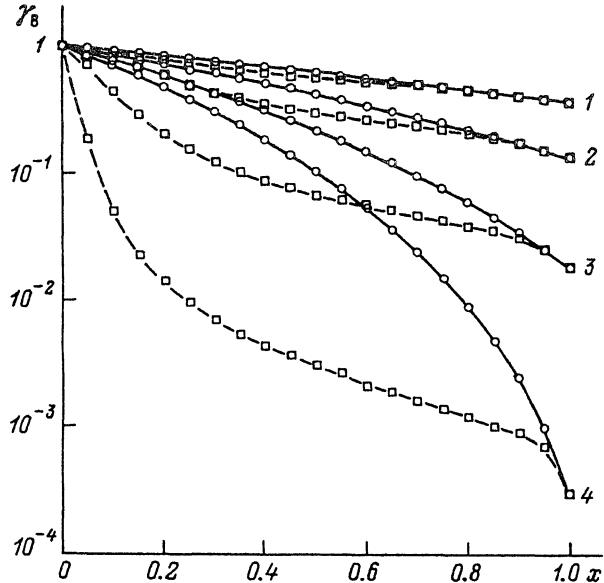


Рис. 5. Зависимость поправок  $\gamma_B$  к коэффициенту диффузии быстро диффундирующей компоненты В от состава твердого раствора  $A_{1-x}^IV B_x^{IV}$  при различных значениях параметра  $\theta$ : 1 — 0.25, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2. Пунктир — для равновесных коэффициентов кластеризации; сплошная линия — для однородного твердого раствора.

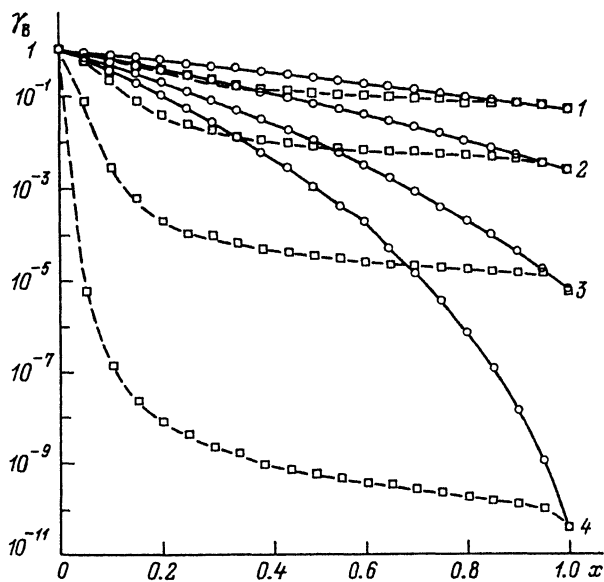


Рис. 6. Зависимость поправок  $\gamma_B$  к коэффициенту диффузии быстро диффундирующей компоненты В от состава твердого раствора  $A_{1-x}^{II} B_x^{II} C^VI$  при различных значениях параметра  $\theta$ : 1 — 0.25, 2 — 0.5, 3 — 1, 4 — 2. Пунктир — для равновесных коэффициентов кластеризации; сплошная линия — для однородного твердого раствора.



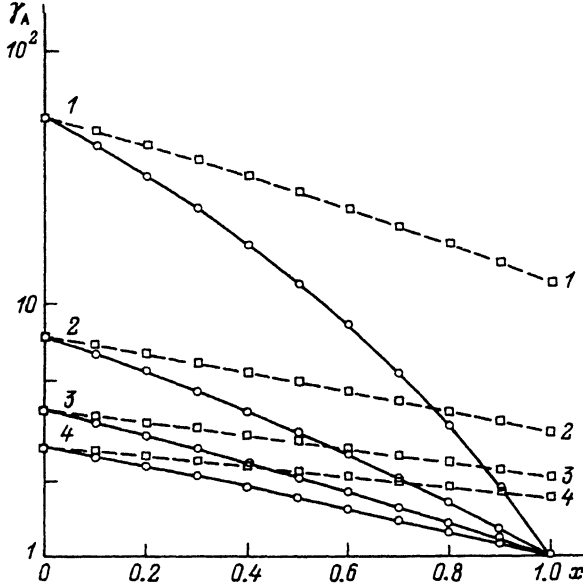


Рис. 7. Зависимость поправок  $\gamma_A$  к коэффициенту диффузии быстро диффундирующей компоненты В от состава твердого раствора  $A_{1-x}B_x^{IV}$  при различных значениях параметра  $\theta_1$ : 1 — 1, 2 — 1/2, 3 — 1/3, 4 — 1/4. Пунктир — для раствора, закластеризованного до  $\beta = 0.5$ ; сплошная линия — для однофазного твердого раствора.

жение для эффективного коэффициента диффузии  $D_{\text{eff}}$  запишется в виде, аналогичном (10):

$$D_{\text{eff}} = D_0 \exp(-E_B^A/kT) \cdot \sum_{i=0}^{N_n} [f_A(i) \cdot \exp(i\theta_1)], \quad (11)$$

где  $D_0 \exp(-E_B^A/kT)$  — коэффициент диффузии компоненты А в соединении ВС;  $\theta_1 = \Delta E/kT = [(E_B^A - E_A^A)/N_n]/kT$ ;  $E_B^A$  и  $E_A^A$  — энергии активации диффузии компоненты А в соединениях ВС и АС соответственно.

$\gamma_A = \sum_{i=0}^{N_n} [f_A(i) \cdot \exp(i\theta_1)]$  — поправка, обусловленная многопоточным характером диффузии в твердом растворе, которая является отношением коэффициента диффузии в растворе к коэффициенту диффузии компоненты А либо в соединении ВС для трехкомпонентных растворов, либо в монокристалле В для сплавов типа АВ.

На рис. 7, 8 в качестве примера приведены рассчитанные зависимости этих поправок от параметра  $\theta_1$  для закластеризованных до величины  $\beta = 0.5$  и однородных растворов с  $\beta = 0$ . Здесь разница коэффициентов диффузии монотонно увеличивается с составом  $x$  и величиной  $\theta_1 = \Delta E/kT$ , что существенно отличается от таких же зависимостей (рис. 5, 6) для медленно диффундирующих примесей.

2.4. Диффузия примесей. Что касается примесей, то в данной работе ограничимся только несколькими замечаниями.

1. По-видимому, энергия активации диффузионного скачка примесного атома тоже будет зависеть от состава ближайшего окружения твердого раствора. Из-за того, что примеси могут входить в различные подрешетки, должна наблюдаться существенная разница в этой зависимости для различных примесей.

2. Энергия активации диффузии примеси ( $E_p$ ) может существенно отличаться от энергии активации самодиффузии ( $E_A$ ,  $E_B$ ). Чаще всего реализуется случай,

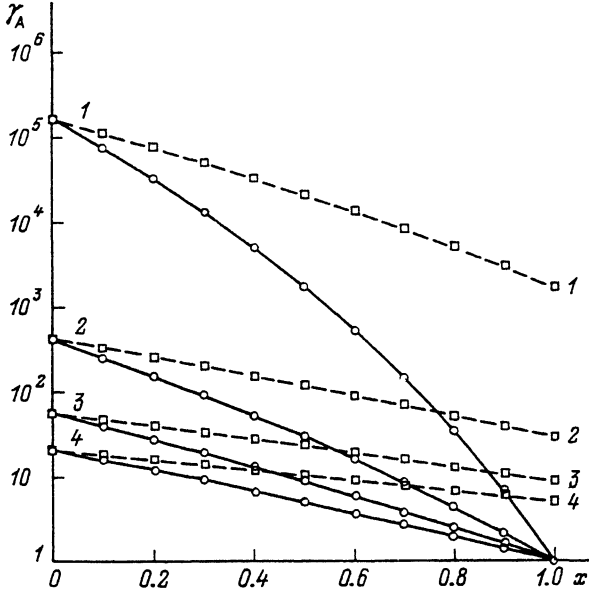


Рис. 8. Зависимость поправок  $\gamma_A$  к коэффициенту диффузии быстро диффундирующей компоненты В от состава твердого раствора  $A_{1-x}B_xC^{VI}$  при различных значениях параметра  $\theta_1$ : 1 — 1, 2 — 1/2, 3 — 1/3, 4 — 1/4. Пунктир — для раствора, закластеризованного до  $\beta = 0.5$ ; сплошная линия — для однородного твердого раствора.

когда  $E_p < E_A, E_B$ , т. е. примесь диффундирует в твердом растворе, состояние которого следует определять не при температуре диффузии, а при более высоких температурах технологических обработок, предшествующих разгонке примеси. (Этот случай полностью аналогичен рассмотренному выше случаю диффузии быстро диффундирующей компоненты твердого раствора).

В этой ситуации следует ожидать сильного разброса параметров диффузии быстро диффундирующих примесей в одних и тех же сплавах, но приготовленных по различным технологиям.

### 3. Обсуждение результатов

Для некоторых материалов, например для  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , имеются достаточно определенные данные по его кластеризации, что позволяет сопоставить приводимые расчеты с экспериментом.

Выше уже указывалось, что в этом тройном соединении разность энергий активации диффузии компонент подрешетки металла (Cd, Hg) практически полностью обусловлена разницей энергий связи этих атомов.

Так, для разницы энергии активации диффузии кадмия в  $CdTe$  и  $Cd_{0.2}Hg_{0.8}Te$  получим  $\Delta E = (1.71 - 1.15) / 12 = 0.0467$  эВ, а различие в энергиях связи составляет  $\Delta E = (4.25 - 3.8) / 12 = 0.0375$  эВ. Расхождение величин не превышает 22%. Такое соответствие следует признать удовлетворительным, учитывая, что оно получено при интерпретации экспериментальных данных по диффузии в твердом растворе без учета эффектов кластеризации.

Если для этого соединения принять в качестве максимально допустимой температуры технологических процессов температуру плавления  $HgTe$  около  $660^\circ$  (т. е. не более 1000 К), то получим значение величины  $|\theta| = \Delta E / kT \approx 0.5$ .

Заметные изменения, обусловленные диффузионными процессами в теллуриде кадмия—ртути, наблюдаются при температурах около  $100^\circ\text{C}$  (около  $400\text{ K}$ ). Соответствующее значение  $|\theta| \approx 1$ .

Расчеты равновесного коэффициента кластеризации  $\beta$ , приведенные на рис. 4, показывают, что твердый раствор состава  $x = 0.2$  закластеризован до величины  $\beta = 0.5$  сразу после его приготовления ( $|\theta| = 0.5$ ), а при остывании и последующем хранении ( $|\theta| = 1$ ) кластеризуется до величины  $\beta = 0.75$ . Из сопоставления интенсивности колебательных полос в спектре поглощения  $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$  получены значения  $\beta = 0.6$  [8].

Интересно, что спектр комбинационного рассеяния монокристаллов теллурида кадмия—ртути видоизменяется при закалке световыми импульсами таким образом, что компоненты раствора распределяются однородно [9]. По-видимому, если чередовать диффузионную разгонку с такими закалками, то, как видно из рис. 5, можно изменять коэффициент диффузии атомов кадмия в  $\text{Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.8}\text{Te}$  на два порядка в интервале температур от приблизительно  $100^\circ\text{C}$  и вплоть до температуры плавления.

Что же касается диффузии ртути, то для составов с малым значением  $x$  ускорение диффузии при кластеризации незначительно, а составы с большими  $x$  сравнительно слабо изучены.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Б. И. Болтакс. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. Л. (1972).
- [2] D. Shaw. *J. Cryst. Growth*, **86**, 778 (1988).
- [3] A. Sher, M. A. Berding, S. Krishnamurty, M. Schilfgaard, A.-B. Chen. *Mater. Res. Soc. Simp. Proc.*, **90**, 91 (1987).
- [4] A. Sher, M. Schilfgaard, A.-B. Chen, W. Chen. *Phys. Rev. B*, **36**, 4279 (1987).
- [5] S. Yamazaki, M. Kishi, T. Katoda. *Phys. St. Sol. (b)*, **113**, 421 (1982).
- [6] M. A. Berding, A. Sher, A.-B. Chen., R. Patrick. *Semicond. Sci. Technol.*, **5**, S86 (1990).
- [7] Г. Корн, Т. Корн. *Справочник по математике*. М. (1977).
- [8] S. P. Kozurev, L. K. Vodopyanov, R. Triboulet. *Sol. St. Commun.*, **45**, 383 (1983).
- [9] A. Compaan, R. C. Bowman, D. E. Cooper. *Semicond. Sci. Technol.*, **5**, S73 (1990).

Редактор Т. А. Полянская

---