

## ОБ ОБРАЗОВАНИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

© В.И.Панов, А.А.Харьков

Новосибирский государственный технический университет,  
630092 Новосибирск, Россия  
(Получена 31 мая 1995 г. Принята к печати 3 июля 1995 г.)

Развиваются представления об образовании первичных радиационных дефектов в бинарных полупроводниках как о процессе возбуждения локальной области кристалла, включающей некоторое количество атомов, вплоть до состояния фазового перехода и перестройки этой области. На основе предлагаемой модели проведен расчет и сравнение с экспериментом величины пороговой энергии смещения атомов для ряда соединений  $A^{IV}B^{VI}$ . Приводятся также рассчитанные значения порогов энергии для еще не исследованных экспериментально соединений HgSe и HgTe.

В наших работах [1-3] развиваются представления об образовании первичных радиационных дефектов как о процессе возбуждения кристаллической решетки окружения до степени фазового перехода и перестройки локальной области кристалла. Так как энергия связи атомов в кристалле велика по сравнению с энергией тепловых колебаний, начавшееся движение атома (после электронного «удара») будет сопровождаться возбуждением его окружения, охватывающим группу атомов. Если качественно предположить, что атом отдачи покидает узел с энергией  $\epsilon$  и далее движется равнозамедленно, то за время смещения на расстояние  $d$  ближайšie к образующейся вакансии атомы решетки сместятся из положения равновесия на расстояние

$$s = d\sqrt{\epsilon_b/\epsilon_d} / (\sqrt{n} - \sqrt{n-1}),$$

где  $\epsilon_d$  — пороговая энергия образования радиационных дефектов,  $\epsilon_b$  — энергия связи атомов в решетке кристалла,  $n = \epsilon/\epsilon_d$ ,  $d$  — расстояние, на котором проявляется действие межатомных сил. Полагая  $\epsilon_d = 4\epsilon_b$ ,  $\epsilon \approx \epsilon_d$ , получаем  $s = d/2$ . Из этой оценки видно, что процесс удаления атома из узла решетки при энергиях, близких к пороговым, сопровождается значительным изменением положения соседних атомов, что и приводит к возникновению области локального возбуждения в кристалле.

Такой подход позволяет понять многие экспериментальные факты: большую величину пороговой энергии  $\epsilon_d$ , резкую зависимость ее от

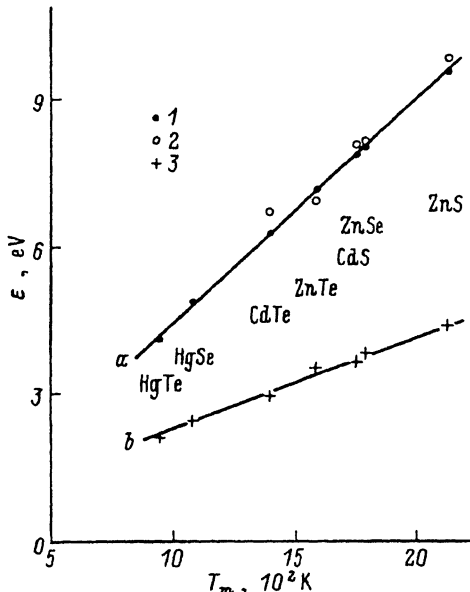
температуры и неожиданно слабую ориентационную зависимость [4]. Подтверждение он находит также и в некоторых результатах моделирования процессов образования простейших дефектов с помощью ЭВМ. Если сообщить атому решетки энергию, достаточную для образования дефекта, то в дальнейшем это приводит к энергетическому обмену с довольно большим коллективом соседних атомов [5].

С целью получения дополнительной информации для развития предлагаемой модели и расширения круга описываемых ею явлений в настоящей работе сделана попытка применения этих представлений к бинарным соединениям типа  $A^X B^V$ . Если коллективные эффекты играют доминирующую роль в процессах образования первичных радиационных дефектов в кристаллах, то пороговая энергия  $\epsilon_d$  должна быть практически одной и той же для смещения компонент А и В, хотя граничные энергии электронов [6], конечно, будут различны из-за отличия масс атомов А и В:  $M_A$  и  $M_B$ . Мы провели анализ имеющихся экспериментальных данных по величине пороговой энергии  $\epsilon_d$ . Для соединений  $A^{III} B^V$  результаты оказались очень противоречивы. Нами отмечалось ранее [7,8], что причинами тому являются некорректное определение порогов по «хвостам» изменения электрофизических характеристик [9], использование логарифмического масштаба при построении энергетических зависимостей наблюдаемых величин [10], экстраполяция из области высоких энергий и др. В результате для GaAs, например, величины пороговой энергии, приводимые разными авторами, оказались отличающимися более чем вдвое [9-11]. Для соединений  $A^{II} B^{VI}$  пороговые энергии определялись в основном по люминесценции центров, образованных дефектами. Здесь картина намного четче, разбросы меньше, и поэтому мы остановимся только на этом классе соединений.

Если представить процесс образования дефекта по Френкелю как результат возбуждения группы атомов в некоторой локальной области кристалла до степени фазового перехода в этой области, то для величины пороговой энергии можно записать следующее выражение [3]:

$$\epsilon_d \simeq 3N_{\text{eff}} k \left[ D \left( \frac{\theta_D}{T_m} \right) T_m - D \left( \frac{\theta_D}{T} \right) T \right], \quad (1)$$

где  $D(x)$  — функция Дебая,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура кристалла. Эффективное число атомов в возбужденной области  $N_{\text{eff}}$  можно найти используя экспериментальное значение величины пороговой энергии  $\epsilon_d$ . Для соединений  $A^{II} B^{VI}$  наиболее надежными, на наш взгляд, являются данные по ZnSe [12-14], которыми мы и воспользовались. Среднее значение  $\epsilon_d$  для ZnSe равно 8 эВ. Тогда из формулы (1) получаем  $N_{\text{eff}} = 19$  атомов. Используя это значение  $N_{\text{eff}}$ , мы рассчитали с помощью формулы (1) пороговые энергии  $\epsilon_d$  для ряда других полупроводниковых соединений  $A^{II} B^{VI}$ . На рисунке (зависимость  $a$ ) приведены расчетные значения  $\epsilon_d$ , представленные в зависимости от температуры плавления  $T_m$ . На получившуюся линейную зависимость нанесены также известные экспериментальные данные по значениям  $\epsilon_d$ . Так как в коллективной модели образования радиационных дефектов



Зависимость пороговой энергии  $\epsilon_d$  (1) и энергии связи  $\epsilon_b$  (2) для атомов в решетке кристалла от температуры плавления  $T_m$ .

1 — расчет  $\epsilon_d$  по формуле (1), 2 — экспериментальные значения  $\epsilon_d$ , 3 — энергия связи атомов  $\epsilon_b$ .

пороговые энергии  $\epsilon_A \simeq \epsilon_B$ , для сравнения с расчетными значениями (1) нанесены также точки (значки 2 на рисунке), отвечающие средним значениям экспериментальных порогов  $\epsilon_d$  по компонентам А и В в тех случаях, когда они определялись раздельно. На том же рисунке представлена зависимость от  $T_m$  другой характеристики, физически тесно связанной с  $\epsilon_d$ , — энергии связи  $\epsilon_b$ , методы расчета которой хорошо известны (линия b). Построенная зависимость энергии связи, осуществляющейся  $3s^2p^4$ -электронами (см., например, [15]) от  $T_m$  также линейна. Одинаковый характер изменения пороговой энергии и энергии связи при существенном различии их величин мы считаем одним из аргументов в пользу важной роли коллективных эффектов в процессе образования радиационного дефекта.

В таблице проводится сравнение величин граничной энергии электронов  $E_d$  для атомов А и В, соответствующих одной и той же величине пороговой энергии, вычисленной по формуле (1), с экспериментальными данными для некоторых соединений  $A^{II}B^{VI}$ . Видно, что вычисленные значения граничной энергии в основном неплохо совпадают с экспериментальными. Имеющееся расхождение для атома Те в соединении CdTe может быть связано с температурной зависимостью пороговой энергии, так как этот результат приведен в работе [6] для температур, близких к температуре жидкого гелия. Для соединений HgSe и HgTe приведены только расчетные значения энергий, так как экспериментальных данных пока нет.

Среди соединений  $A^{II}B^{VI}$  в особую группу следует выделить тугоплавкие окислы BeO, MgO, CaO и ZnO, которые обладают преимущественно ионной связью вследствие сильной электроотрицательности

Соединения A <sup>II</sup> B <sup>VI</sup>	Расчетное значение пороговой энергии $\epsilon_d$ , эВ при $N_{\text{эф}} = 19$	Расчетные значения граничной энергии электронов $E_d$ , кэВ для атомов		Экспериментальные значения граничной энергии электронов $E_d$ , кэВ для атомов	
		A	B	A	B
ZnS	9.6	233	125	240 [1 <sup>16</sup> ]	-
ZnSe	8.0	199	234	195 [1 <sup>14</sup> ]	240 [1 <sup>3,14</sup> ], 235 [1 <sup>2</sup> ]
CdS	7.9	310	105	290 [1 <sup>18</sup> ], 314 [1 <sup>19</sup> ]	115 [1 <sup>7</sup> ], 125 [1 <sup>9,20</sup> ]
ZnTe	7.2	182	319	185 [2 <sup>1</sup> ]	300 [2 <sup>2</sup> ]
CdTe	6.3	258	287	250 [2 <sup>3</sup> ], 235 [2 <sup>4</sup> ]	340 [2 <sup>3,24</sup> ]
HgSe	4.9	337	153		
HgTe	4.1	292	199		

П р и м е ч а н и е. В последних колонках около значений  $E_d$  указаны номера ссылок, откуда  
взяты соответствующие величины.

атомов кислорода, и конечно, для них  $N_{\text{эф}}$  будет другим. Эти соединения характеризуются малыми межатомными расстояниями и большими величинами пороговой энергии  $[\text{24-26}]$ . В настоящее время имеется еще мало работ, посвященных определению  $\varepsilon_d$  для этих соединений. Наиболее интересный результат получен для ZnO  $[\text{25-27}]$ . Величины пороговой энергии образования дефекта по кислороду и по цинку оказались равными 57 эВ, тогда как большое различие масс атомов O и Zn привело к сильно различающимся значениям граничной энергии электронов — 310 кэВ для кислорода и 900 кэВ для цинка. Этот результат также указывает на важную роль коллективных эффектов в процессах образования радиационных дефектов.

### Список литературы

- [1] Л.С. Смирнов. ФТТ, 2, 1669 (1960).
- [2] В.И. Панов, Л.С. Смирнов. ФТП, 7, 212 (1973).
- [3] В.И. Панов, Л.С. Смирнов. *Радиационные дефекты в полупроводниках* (Минск, БГУ, 1972) с. 246.
- [4] В.И. Панов, А.А. Харьков. *Тез. докл. 17 Всес. совещ. по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами* (М., МГУ, 1987).
- [5] Ю.Н. Книжников. *Радиационная физика неметаллических кристаллов* (Киев, Наук. думка, 1971) т. 3, ч. 1, с. 112.
- [6] В.И. Панов, Л.С. Смирнов. В кн.: *Физические процессы в облученных полупроводниках* (Новосибирск, Наука, 1977).
- [7] Н.Н. Герасименко, А.В. Двуреченский, В.И. Панов, Л.С. Смирнов. ФТП, 5, 1644 (1972).
- [8] Н.Н. Герасименко, А.В. Двуреченский, В.И. Панов, Л.С. Смирнов. ФТП, 6, 991 (1972).
- [9] R. Bauerlein. *Z. Physik*, 176, 498 (1963).
- [10] Е.Ю. Браиловский, И.Д. Конозенко. ФТП, 5, 641 (1971).
- [11] J.A. Grimshaw, P.S. Bunbury. *Pros. Soc.*, 84, 151 (1964).
- [12] F.J. Bryant, P.S. Manning. *Sol. St. Phys.*, 5, 1914 (1972).
- [13] В.А. Kulp, R.M. Detweiler. *Phys. Rev.*, 129, 2422 (1963).
- [14] R.M. Detweiler, В.А. Kulp. *Phys. Rev.*, 146, 513 (1966).
- [15] P. Mance. *J. Phys. Chem. Sol.*, 20, 268 (1961).
- [16] F.J. Bryant, A.F.J. Cox. *Phys. Lett.*, 20, 108 (1966).
- [17] В.А. Kulp. *Phys. Rev.*, 125, 1865 (1962).
- [18] В.А. Kulp, R.H. Kolley. *J. Appl. Phys.*, 31, 1057 (1960).
- [19] C.N. Elsby, J.M. Meese. *J. Appl. Phys.*, 43, 4818 (1972).
- [20] F.J. Bryant, A.F.J. Cox. *Proc. Roy. Soc. A*, 310, 319 (1969).
- [21] J.M. Meese. *Appl. Phys. Lett.*, 19, 86 (1971).
- [22] F.J. Bryant, A.T. Baker. *Sol. St. Phys.*, 5, 2283 (1972).
- [23] K. Matsuura, N. Iton, T. Suita. *J. Phys. Soc. Japan*, 22, 1118 (1967).
- [24] F.J. Bryant, A.F.J. Cox, E. Webster. *J. Phys.* C1, 1737 (1968).
- [25] Y. Chen, D.L. Teyeblood, O.E. Sahow, H.T. Tohver. *Sol. St. Phys.*, 3, 2501 (1970).
- [26] D.R. Locker, J.M. Meese. *Trans. Nucl. Sci.*, 19, 237 (1970).
- [27] J.M. Meese, D.R. Locker. *Sol. St. Commun.*, 11, 1547 (1972).

Редактор Т.П. Полянская

# On radiation damage formation in binary compounds

*V.I.Panov, A.A.Khar'kov*

State Technical University, 630092 Novosibirsk, Russia

A concept is formulated of formation primary radiation-induced defects in binary ( $A^X B^V$ ) type semiconductors. The process is considered as an excitation leading to a phase transition in a crystal local region with subsequent reconstruction within the region. On the basis of this concept, calculation of values of the atomic displacement threshold energy was made for some semiconductor  $A^{II} B^{VI}$ -type compounds as well as comparison with experiment. For HgSe and HgTe the threshold energies have been predicted.

---