

## О структуре дефектов в SmS

© Л.Н. Васильев, В.В. Каминский, М.В. Романова, Н.В. Шаренкова, А.В. Голубков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: vladimir.kaminski@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 2 декабря 2005 г.)

Получена экспериментальная зависимость концентрации электронов проводимости от размеров областей когерентного рассеяния рентгеновского излучения. Кривая проанализирована на основании разработанной ранее концентрационной модели энергетического спектра SmS. Показано, что примесные донорные уровни в SmS соответствуют дефектным ионам самария, располагающимся на границах областей когерентного рассеяния.

Работа выполнена при финансовой поддержке ООО „Технопроект“ (Санкт-Петербург).

PACS: 71.55.-i, 72.20.Mu

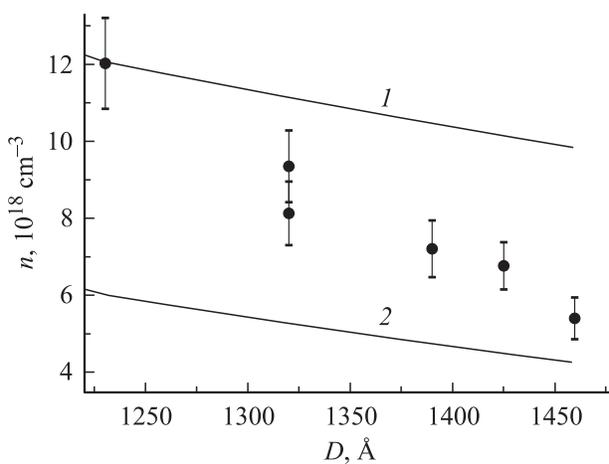
Обнаруженный в [1] эффект генерации эдс при равномерном нагреве монокристаллов сульфида самария (SmS) в условиях отсутствия внешних градиентов температуры возбудил интерес к исследованию системы примесных уровней, характерных для этого полупроводникового материала. Последнее обусловлено физической моделью эффекта, выдвинутой в [1], согласно которой за возникновение эдс ответственны дефектные ионы самария, образующие указанные примесные донорные энергетические уровни, лежащие на  $E_i = (0.03-0.06)$  eV ниже дна зоны проводимости и имеющие концентрацию  $N_i = (10^{20}-10^{21})$  cm<sup>-3</sup> [2]. Для создания искусственных структур на основе SmS, позволяющих использовать рассматриваемый эффект для преобразования тепловой энергии в электрическую [3], необходимы более полные знания о дефектных ионах самария и, в частности, о местах их локализации в кристаллической структуре SmS. В настоящей работе сделана попытка разобраться в этом вопросе.

Основная идея работы заключается в следующем. Можно полагать, что мерой дефектности образца является размер областей когерентного рассеяния (ОКР) рентгеновского излучения при его облучении. Величина ОКР показывает размеры областей образца, внутри которых структура его практически идеальна. С другой стороны, концентрация электронов проводимости ( $n$ ) в SmS определяется количеством дефектных ионов самария. Если все это так, то, найдя корреляцию между ОКР и  $n$  и проанализировав полученную зависимость, можно сделать выводы о структуре дефектных областей в SmS.

На серии монокристаллических образцов SmS стехиометрического состава были проведены измерения величины ОКР и  $n$ . Состав образцов контролировался путем рентгеноструктурного анализа. Количество примесей (в основном окисульфид самария) не превышало 1%. Величина параметра кристаллической решетки имела типичные для SmS значения  $a \approx 5.97$  Å. Измерения ОКР проводились с использованием формулы Шеррера

аналогично тому, как это делалось в [4]. Определение концентрации электронов проводимости проводилось исходя из измерений эффекта Холла. Как показано в [5], при  $n \sim 10^{19}$  cm<sup>-3</sup> в SmS холл-фактор отличается от единицы не более чем на 4%, и поэтому дрейфовая подвижность и истинная концентрация носителей заряда примерно равны холловским. Измерения проводились на постоянном токе в постоянном магнитном поле напряженностью  $1.3 \cdot 10^6$  A/m. При определении коэффициента Холла учитывалась поправка на соотношение геометрических размеров образца. Точность измерения  $n$  составила  $\sim 10\%$ .

На рисунке представлена зависимость концентрации электронов проводимости от размеров областей когерентного рассеяния для SmS. Наблюдается монотонное увеличение  $n$  при уменьшении величины ОКР. Для анализа полученной зависимости воспользуемся разработанной нами для описания пьезосопротивления SmS



Зависимость концентрации электронов проводимости от размеров областей когерентного рассеяния для монокристаллов SmS. Точки — эксперимент, 1 — расчет при количестве примесей  $\sim 0.5\%$  ( $N_0 = 0.9 \cdot 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>); 2 — расчет при количестве примесей  $\sim 1.0\%$  ( $N_0 = 1.8 \cdot 10^{20}$  cm<sup>-3</sup>).

Параметры расчета концентрации электронов проводимости в SmS исходя из величины ОКР

$D, \text{Å}$	$V$ по (1)	$N_b, 10^{20} \text{cm}^{-3}$	$N_i, 10^{20} \text{cm}^{-3}$	$n, 10^{18} \text{cm}^{-3}$
1230	0.0288	0.9	4.522	12.06
1320	0.0269	1.046	4.009	9.32
1320	0.0269	1.157	3.898	8.14
1390	0.0256	1.186	3.617	7.27
1425	0.0249	1.204	3.482	6.83
1460	0.0243	1.34	3.234	5.43

концентрационной моделью, основанной на решении уравнения электронейтральности [6]. Задача сводится к выявлению наличия корреляции между размерами ОКР и количеством примесных дефектных уровней  $N_i$  в этой модели, соответствующих собственным дефектам в SmS.

Согласно [4], доля объема материала, находящегося в дефектном состоянии ( $V$ ), по отношению к общему объему материала образца определяется по формуле

$$V = 1 - \frac{(D - 2a)^3}{D^3}, \quad (1)$$

где  $D$  — характерный размер (диаметр) ОКР. Этот дефектный объем приходится на граничные слои ОКР толщиной в одну постоянную кристаллической решетки. Если считать, что дефектные ионы самария располагаются в дефектном объеме материала, то  $N_i = V \cdot N_{\text{Sm}}$ , где  $N_{\text{Sm}}$  — концентрация ионов самария в SmS, равная  $1.88 \cdot 10^{22} \text{cm}^{-3}$ . Следует, однако, учесть, что часть дефектных ионов ( $\leq 1\%$  от  $N_{\text{Sm}}$ ) вошла в состав оксисульфида и поэтому заблокирована. В таком случае  $N_i = V \cdot N_{\text{Sm}} - N_b$ , где  $N_b$  — концентрация заблокированных ионов. При количестве оксисульфида в образце  $0.5\text{--}1\%$  величины  $N_b$  составят  $(0.9\text{--}1.8) \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$ . Заблокированными окажутся именно дефектные ионы самария, так как коэффициенты диффузии в SmS по границам ОКР на несколько порядков выше, чем по объему [7]. В данном случае это касается диффузии кислорода и серы. В таблице на основе экспериментальных значений ОКР приведены параметры расчета  $n$  по концентрационной модели, приводящие к точному совпадению с экспериментальными значениями.  $E_i = 0.03 \text{eV}$ , подгоночным параметром является  $N_b$ . На рисунке кривые 1 и 2 показывают расчетные значения  $n$ , полученные при граничных значениях  $N_b$ , оцененных из эксперимента и равных  $0.9 \cdot 10^{20}$  и  $1.8 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$  соответственно. Наблюдается удовлетворительное совпадение экспериментальных и расчетных результатов.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что примесные донорные уровни  $E_i$  в SmS соответствуют дефектным ионам самария, располагающимся на границах ОКР. На концентрации этих уровней существенно сказывается чистота материала образца.

## Список литературы

- [1] В.В. Каминский, С.М. Соловьев. ФТТ **43**, 3, 423 (2001).
- [2] В.В. Каминский, А.В. Голубков, Л.Н. Васильев. ФТТ **44**, 8, 1501 (2002).
- [3] В.В. Каминский, А.В. Голубков, М.М. Казанин, И.В. Павлов, С.М. Соловьев, Н.В. Шаренкова. Заявка на изобретение № 2005120519/28 от 22.06.2005.
- [4] Н.В. Шаренкова, В.В. Каминский, А.В. Голубков, Л.Н. Васильев, Г.А. Каменская. ФТТ **47**, 4, 598 (2005).
- [5] В.В. Каминский, Н.Н. Степанов, Л.Н. Васильев, Ю.Н. Харченко, И.А. Смирнов. ФТТ **27**, 1, 177 (1985).
- [6] Л.Н. Васильев, В.В. Каминский. ФТТ **36**, 4, 1772 (1994).
- [7] А.В. Голубков, В.А. Дидик, В.В. Каминский, Е.А. Скорятина, В.П. Усачева, Н.В. Шаренкова. ФТТ **47**, 7, 1192 (2005).