

О модели формирования поликристаллического гетероперехода $n\text{-ZnO}/p\text{-CuO}$

© Ш.Р. Адилов, М.Е. Кумеков*, С.Е. Кумеков[†], Е.И. Теруков⁺

Казахский национальный технический университет им. К.И. Сатпаева,
050013 Алматы, Казахстан

* Таразский государственный университет им. М.-Х. Дулати,
080012 Тараз, Казахстан

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

(Получена 19 июня 2012 г. Принята к печати 21 июня 2012 г.)

Рассматривается модель формирования гетероперехода на базе поликристаллических пленок оксидов цинка и меди. На основе анализа кристаллической структуры оксидов цинка и меди выявлены грани элементарных ячеек, между которыми выполняются эпитаксиальные соотношения. Показано также, что наряду с выполнением правила эпитаксиальных соотношений близость значений ионных радиусов двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} дает возможность реализации поликристаллического гетероперехода в системе ZnO/CuO .

В работах [1–5] сообщалось о получении гетероперехода в системе $n\text{-ZnO}/p\text{-CuO}$. Хотя переходы были получены разными технологиями, электрофизические характеристики были практически идентичны и свидетельствовали об их выпрямляющих свойствах. Измерения при различных температурах выше комнатной показывают, что крутизна вольт-амперных характеристик возрастает вплоть до температур 400° [2–4]. Технологические приемы, использованные при получении гетеропереходов, позволяют говорить лишь о поликристаллической структуре слоев $n\text{-ZnO}$ и $p\text{-CuO}$.

Хорошо известно, что кристаллические структуры ZnO и CuO относятся к разным сингониям. Каким образом происходит формирование гетероперехода между веществами с разной кристаллической сингонией? Как известно [6], образование гетероперехода, требующее стыковки кристаллических решеток, возможно лишь при совпадении типа, ориентации и периода кристаллических решеток срачиваемых материалов. Эти условия определяют эпитаксиальные отношения для получения гетероперехода в случае двух различных материалов с одинаковой кристаллической структурой. Эпитаксия легко осуществляется, если разность параметров обеих решеток не превышает 10% [7]. При этих условиях гетеропереход формируется в монокристаллическом блоке.

Наиболее часто для получения гетеропереходов используются вещества с кубической сингонией, имеющие близкие значения постоянной решетки. На рис. 1 приведена зависимость постоянной решетки и ширины запрещенной зоны типичных веществ со структурой алмаза и цинковой обманки, используемых для создания гетеропереходов [8]. Так как углы между гранями в кубической системе одинаковы, то, зная значения постоянной решетки d , можно делать предположения о возможности создания гетеропереходов на исследуемых веществах с кубической решеткой. Из рисунка видно, что постоянные решетки имеют близкие значения для групп различных

веществ с разными энергиями запрещенной зоны E_g : $d_D \approx 5.4 \text{ \AA}$ (ZnS , AlP , GaP , Si); $d \approx 5.67 \text{ \AA}$ (ZnSe , AlAs , GaAs , Ge); $d \approx 6.1 \text{ \AA}$ (ZnTe , CdSe , AlSb , GaSb , InAs , HgSe).

Изучая возможности наращивания поликристаллических гетеропереходов в системах с разными сингониями, мы пришли к выводу [3,4], что для неразрывного продолжения решетки одного вещества другим в принципе достаточно, чтобы хотя бы одна из граней каждой решетки имели близкие геометрические параметры. Технологически формирование гетероперехода из материалов с разными сингониями осуществимо последовательным напылением пленок двух разных материалов и последующей их кристаллизацией методом отжига. Процессы, происходящие при такой методике образования гетероперехода, сложны и многообразны. Они включают формирование кристаллографической структуры системы зерно-межзеренная граница-зародыш. Рост зародышей, а иногда и их образование облегчаются, если между зародышем, одним из зерен и межзеренной границей существуют эпитаксиальные отношения [9]. Таким об-

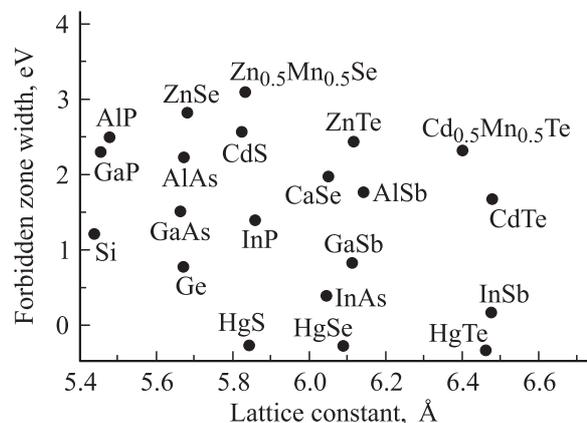


Рис. 1. Постоянные решеток и ширина запрещенной зоны для веществ с кубической сингонией [8].

[†] E-mail: skumekov@mail.ru

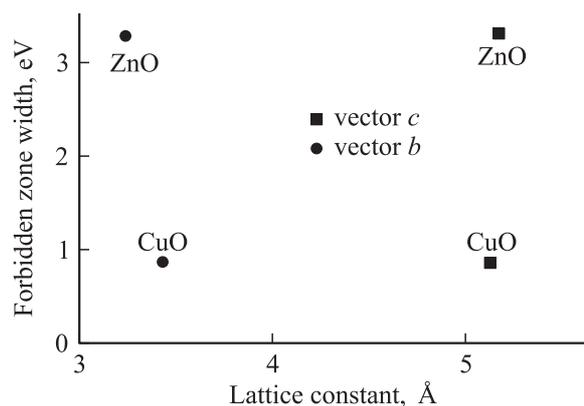


Рис. 2. Постоянные решеток и ширина запрещенной зоны для оксидов цинка и меди.

разом, кристаллизация на межзеренных границах в соответствии с необходимым минимумом энергии будет происходить в местах, удовлетворяющих эпитаксиальным отношениям.

Согласно рентгенографическим измерениям на пленках ZnO и CuO, проведенным в [2–5], параметры кристаллических решеток можно свести в таблицу.

Вещество	ZnO	CuO
Сингония	Юрцит	Моноклинная
Базисный вектор a	$a = 3.2489 \text{ \AA}$	$a = 4.684 \text{ \AA}$
Базисный вектор b	$b = 3.249 \text{ \AA}$	$b = 3.425 \text{ \AA}$
Базисный вектор c	$c = 5.206 \text{ \AA}$	$c = 5.129 \text{ \AA}$
Угол между b и c , a и c	$\alpha = \beta = 90^\circ$	$\alpha = \beta = 90^\circ$
Угол между b и a	$\gamma = 120^\circ$	$\gamma = 99^\circ 28'$

Как видно из таблицы, эпитаксиальные отношения выполняются для граней, образуемых векторами **b** и **c** (рис. 2).

Известно, что изменение химического состава при образовании гетероперехода между полупроводниковыми материалами типа $A^{III}B^V$ и их твердыми растворами на основе арсенидов, фосфидов и антимонидов Ga и Al происходит без изменения периода решетки также благодаря близости ковалентных радиусов Ga и Al [6]. В случае оксидов меди и цинка возможность образования гетероперехода должна определяться ионными радиусами двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} . Согласно изменяющимся в литературе данным, ионные радиусы двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} составляют близкие значения: 0.8 и 0.83 Å соответственно [10]. Поэтому наращивание гетероперехода в системе ZnO/CuO на плоскостях граней с векторами **b** и **c** также не приводит к изменению периода решетки.

Таким образом, в данной работе на основе анализа кристаллической структуры оксидов цинка и меди и значений ионных радиусов двухзарядных ионов Cu^{++}

и Zn^{++} показана возможность формирования поликристаллического гетероперехода в системе оксидных полупроводников ZnO и CuO, относящихся к различным кристаллическим сингониям.

Список литературы

- [1] Y. Nakamura, H. Yoshioka, M. Miyayama, H. Yanagida. *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 940 (1990).
- [2] О.Л. Лисицкий, М.Е. Кумеков, С.Е. Кумеков, Е.И. Теруков. *ФТП*, **43**, 794 (2009).
- [3] Б.М. Верменичев, О.Л. Лисицкий, М.Е. Кумеков, С.Е. Кумеков, Е.И. Теруков, С.Ж. Токмолдин. *ФТП*, **41**, 298 (2007).
- [4] F. Ozyurtkuş, T. Serin, N. Serin. *J. Optoelectron. and Adv. Mater.*, **11**, 1855 (2009).
- [5] Jung Sungmook, Jeon Seongho, Yong Kijung. *Nanotechnology*, **22**, 015606, 1 (2011).
- [6] Ж.И. Алфёров. *Физика*, БЭС (М., БРЭ, 1998) с. 114.
- [7] Л.С. Палатник, И.И. Папилов. *Эпитаксиальные пленки* (М., Наука, 1971).
- [8] Ю. Питер, М. Кардона. *Основы физики полупроводников* (М., Физматлит, 2002) с. 415.
- [9] Г. Харбеке. *Поликристаллические полупроводники. Физические свойства и применения* (М., Мир, 1989) с. 82.
- [10] *Таблицы физических величин. Справочник* (М., Атомиздат, 1976) с. 302.

Редактор Т.А. Полянская

About the model of formation of polycrystalline *n*-ZnO/*p*-CuO heterojunction

Sh.R. Adilov, M.E. Kumekov*, S.E. Kumekov, E.I. Terukov⁺

Satpayev Kazakh National Technical University, 050013 Almaty, Kazakhstan

*Dulaty Taraz State University, 080012 Taraz, Kazakhstan

⁺Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences, 194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The model of formation of heterojunction on the basis of polycrystalline films of zinc and copper oxides is considered. On the basis of the analysis of crystal structure of zinc and copper oxides it is carried sides of elementary cells between which out epitaxy parities are revealed. It is shown also, that alongside with performance of a rule epitaxial parities the affinity of values of ionic radiuses double charged ions Cu^{++} and Zn^{++} enables the realization of polycrystalline heterojunction in system ZnO/CuO.