

**ДИФУЗИЯ Ag У МОНОКРИСТАЛІЧНОМУ CdSb**

В інтервалі температур 478÷708 К методом мічених атомів досліджена дифузія Ag в CdSb. Встановлено, що дифузійний профіль складається з двох ділянок, яким відповідають різні значення коефіцієнтів дифузії і поверхневої концентрації домішкових атомів. Визначені параметри і основні механізми дифузії.

In the temperature range from 478 to 708 K the diffusion of Ag in CdSb was studied by the tagged atoms method. It is established the diffusion profile consist of two plots which correspond to different meaning of the diffusion coefficient and surface concentration. Principal parameters and mechanisms of the diffusion have been obtained.

**Вступ**

Згідно з [1,2] CdSb є анізотропною напівпровідниковою сполукою, на основі якої можна виготовляти вихрові термоелементи, детектори ІЧ-випромінювання і світлофільтри.

У зв'язку з існуючими труднощами в технології одержання досконалих кристалів, обумовленими утворенням метастабільних фаз, деякі фізичні і фізико-хімічні властивості CdSb залишились слабо вивченими. Надзвичайно мало робіт присвячено вирішенню проблеми дифузії домішок в CdSb. Так, в [3] знайдено, що дифузія Fe в кристалах CdSb описується рівнянням  $D=1,3 \cdot 10^6 \exp(-0,74/kT)$ . В [4,5] досліджена самодифузія Cd і Sb в CdSb і встановлено, що в області температур нижче 623 К  $D_{Sb} \ll D_{Cd}$ . Анізотропія дифузії не досліджувалась зовсім.

**Методика експерименту**

У даній роботі методом мічених атомів досліджена дифузія срібла в монокристалічному CdSb в інтервалі температур 478÷708 К з урахуванням особливостей будови кристалічної ґратки і анізотропії фізичних властивостей CdSb. З метою дослідження анізотропії дифузії Ag в CdSb ізотоп  $Ag^{110}$  наносили на одну з граней [100], [010], [001] орієнтованих зразків, поверхня яких попередньо оброблялась методами механічного полірування і хімічного травлення. Дифузійний відпал зразків проводили в евакуйованих ампулах, виготовлених з тугоплавкого скла. Час відпалу, в залежності від температури, вибирали в межах 80-255 год, що забезпечувало проникнення Ag на глибину до 300-600 мкм.

**Результати експерименту**

Результати проведених досліджень показали, що дифузія Ag в CdSb має складний характер. Було встановлено, що глибина міграції атомів Ag залежить не тільки від температури і часу відпалу, але також від тиску парів Cd і напрямку дифузії. Дифузійні профілі складаються з двох ділянок: приповерхневої (I) і об'ємної (II), кожна з яких може бути апроксимована  $\operatorname{erfc}$ -функцією. На рис.1 показана форма дифузійного профілю Ag в CdSb вздовж кристалографічної осі [100]. Визначені методом накладання стандартної кривої значення коефіцієнтів дифузії  $D_{ii}$  і поверхневої концентрації домішкових атомів  $N_0$  для ділянок профілю I і II помітно відрізняються. Дифузійний відпал зразків за присутності в ампулі  $\sim 0,1$  мг чистого Cd приводить до зменшення ділянки I.

На рис.2 приведені температурні залежності коефіцієнтів дифузії  $D_{11}$ ,  $D_{22}$  і  $D_{33}$ , визначені для ділянок I (криві 4, 5, 6) і II (криві 1, 2, 3) дифузійних профілів. З рис.2 видно, що ці залежності не однакові. У випадку приповерхневої ділянки I залежності коефіцієнтів дифузії від температури в координатах  $\lg D - 10^3/T$  мають форму прямої лінії і можуть бути описані рівнянням типу  $D = D_0 \exp(-E/kT)$ . Температурні залежності коефіцієнтів дифузії, визначені для об'ємної ділянки дифузійних профілів, в області температур  $593 \pm 20$  К мають різкий злам і можуть бути виражені аналітично у вигляді суми двох експоненціальних доданків  $D = D_{01} \exp(-E_1/kT) + D_{02} \exp(-E_2/kT)$ . Визначені з експерименту значення коефіцієнтів  $D_{0i}$  і енергії активації  $E_i$  наведені в таблиці 1.

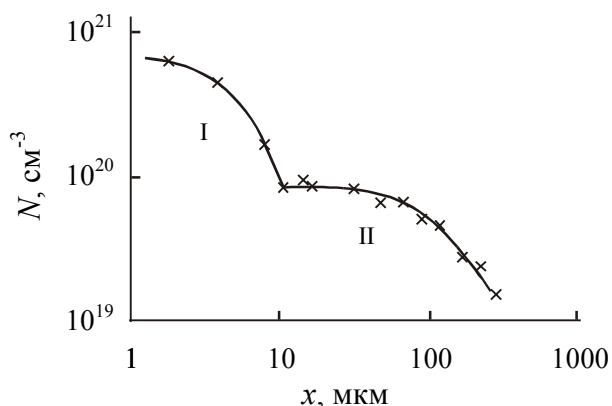


Рис.1. Розподіл срібла в CdSb вздовж [100] при температурі відпаалу 595 К.

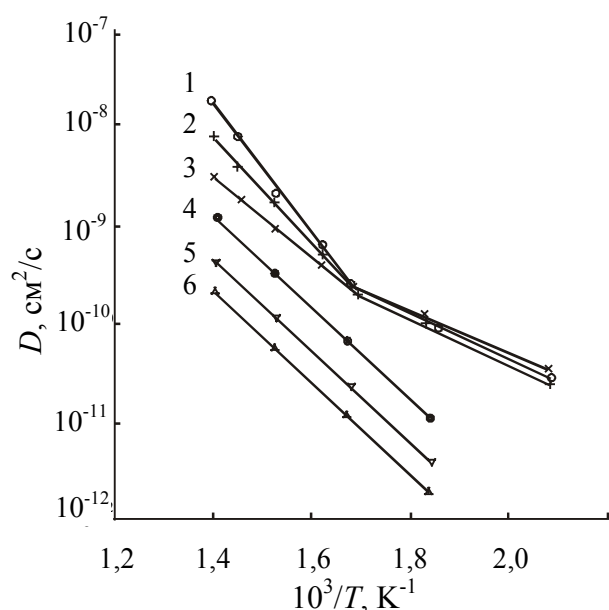


Рис.2. Температурні залежності коефіцієнта дифузії срібла в CdSb, визначені для напрямків [100] (1, 4), [010] (2, 6) і [001] (3, 5) ділянок I (4-6), II (1-3).

**Обговорення результатів**

Наявність на концентраційних кривих приповерхневої ділянки I з більш високими значеннями  $N_0$  і порівняно невеликими значеннями параметрів  $D_0$  і  $E$ , свідчить про те, що в цій області внаслідок випаровування Cd з поверхні [6, 7] утворюється більш висока, ніж в об'ємі, концентрація вакансій, з якими взаємодіють атоми Ag.

Різкий злам на графіках, що характеризують температурну залежність коефіцієнтів дифузії Ag в CdSb в об'ємній частині зразків, дозволяє припустити, що в області температур нижче ~593 К домінуючий механізм дифузії – міжвузловинний, у той час як в області температур вище 593 К більш помітну роль у дифузійному про-

цесі починає відігравати вакансійний механізм. Більш виражено вакансійний механізм дифузії спостерігається у напрямку [100], для якого  $E_1 = 1,466$  еВ. Дифузії по вакансіях сприяє близькість значень ковалентних радіусів і електронної спорідненості атомів Cd і Ag, у результаті чого атоми Ag можуть займати нормальні положення у вузлах підрешітки Cd, утворюючи тверді розчини заміщення.

З наведених у таблиці 1 і на рис.2 даних видно, що анізотропія дифузії існує як у приповерхневій області зразків, так і в об'ємній їх частині. У приповерхневій області анізотропія дифузії спостерігається в усьому інтервалі температур 478÷708 К, а в об'ємній частині – лише в області високих температур ( $T > 593$  К). У першому випадку анізотропія дифузії з температурою майже не змінюється і має місце нерівність  $D_{\parallel}^{[100]} > D_{\parallel}^{[001]} > D_{\parallel}^{[010]}$ . У другому випадку, із збільшенням температури вище 593 К, анізотропія дифузії починає швидко зростати, а співвідношення між коефіцієнтами дифузії можна зобразити нерівністю  $D_{\parallel}^{[100]} > D_{\parallel}^{[010]} > D_{\parallel}^{[001]}$ .

Як можна побачити з наведених даних, обидва розглянуті випадки характеризуються найбільшою швидкістю дифузії Ag вздовж вісі [100], тобто в напрямку, перпендикулярному площині спайності кристалів CdSb.

Причина анізотропії, що спостерігається нами, криється у будові кристалічної ґратки CdSb. Згідно з [8,9], ґратка CdSb складається з шаруватих ковалентних структур, слабо зв'язаних між собою в напрямку [100]. Невелика енергія зв'язку між шарами і, відповідно, більш висока амплітуда теплових коливань атомів вздовж напрямку [100] забезпечують порівняно більш високу імовірність переходу атомів домішки у цьому напрямку з одного рівноважного положення (вузла) в інше. Наявність більш сильного зв'язку між атомами у площині ковалентно зв'язаних шарів приводить до зменшення швидкості дифузії у напрямках [010] і [001].

Відсутність анізотропії дифузії в області температур нижче 593 К обумовлена тим, що тут основним механізмом дифузії є міжвузловинний, який характеризується майже однаковими для різних напрямків дифузії параметрами  $D_{02}$  і  $E_2$ .

Таблиця 1. Значення дифузійних параметрів  $D_0$  [см<sup>2</sup>/с] і  $E$  [eВ].

Напрямок дифузії	Ділянка I ( $T=478\div 708$ К)		Ділянка II ( $T>593$ К)		Ділянка II ( $T<593$ К)	
	$D_0$	$E$	$D_{01}$	$E_1$	$D_{02}$	$E_2$
[100]	$8,92\cdot 10^{-3}$	0,961	$5,63\cdot 10^2$	1,466	$2,24\cdot 10^{-6}$	0,467
[010]	$1,56\cdot 10^{-3}$	0,961	1,78	1,168	$3,55\cdot 10^{-6}$	0,49
[001]	$3,16\cdot 10^{-3}$	0,961	$7,08\cdot 10^{-4}$	0,754	$5,01\cdot 10^{-6}$	0,49

### Висновки

Методом мічених атомів досліджена дифузія срібла в монокристалічному CdSb в інтервалі температур 478÷708 К.

Встановлено, що глибина міграції атомів Ag залежить не тільки від температури і часу відпалу, але також від тиску пари Cd і напрямку дифузії. Концентраційний профіль розпадається на дві ділянки – приповерхневу і об'ємну.

Приповерхнева ділянка утворюється внаслідок взаємодії атомів срібла з вакансіями, які виникають при випаровуванні Cd з поверхні зразків. В об'ємній області зразка при  $T<593$  К домінуючим механізмом дифузії є міжвузловинний, а при  $T>593$  К – вакансійний.

Найбільша швидкість дифузії Ag в CdSb спостерігається вздовж осі [100] в об'ємній області зразка при температурах вище 593 К.

### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Лазарев В.Б., Шевченко В.Я., Гринберг Я.Х., Соболев В.В. Полупроводниковые соединения группы  $A^{II}B^V$ . - М.: Наука, 1978.
2. Dremlyuzhenko S.G., Konopaltseva L.I., Kulikovskaya S.M., Stetsko Yu.P., Strebezhev V.N., Rarenko A.I., Ostapov S.E. Interference IR-filters on the CdSb monocrystal substrates // Proc. of SPIE. - 1999. - **3890**. - P.104-110.
3. Мавлонов Ш., Раджабов А., Садиев А., Кулиев А.А. Диффузия, растворимость и сегрегация железа в антимониде кадмия // Труды 2-го Всесоюз. совещ. по диффузии в полупроводниках. - Горький, 1967. - С.262-267.
4. Аракелян В.С., Спицын В.И. К вопросу о самодиффузии в CdSb // ДАН СССР. - 1974. - **24**, №6. - С.1055-1058.
5. Раренко И.М., Оманчуковская И.В., Никулица В.Г., Панчук О.Э., Друтман З.С. Самодиффузия кадмия в сурьманистом кадмии // Изв. АН СССР. Неорг. материалы. - 1976. - **12**, №1. - С.108-109.
6. Анатычук Л.И., Кондратенко В.К., Лусте О.Я. Влияние испарения летучего компонента на электрические свойства CdSb // Изв. АН СССР. Неорг. материалы. - 1972. - **8**, №4. - С.653-658.
7. Данчевская М.Н., Ивакин Ю.А., Панасюк Г.П., Шевченко В.Я., Лазарев В.Б., Маренкин С.Ф. Исследование кинетики образования точечных дефектов в антимониде кадмия при термической обработке // ДАН СССР. - 1974. - **219**, №6. - С.1403-1407.
8. Toman K. Anisotropy of chemical bond in CdSb // Czech. J. Phys. - 1963. - **6**, Bd.13. - P.431-436.
9. Михальченко В.П., Шарлай Б.М. Анизотропия пружинных vlastивостей сурьмянистого кадмия // УФЖ. - 1971. - **15**, №9. - С.1554-1556.