

УДК 548.4

Doi: 10.31772/2712-8970-2022-23-2-315-320

Для цитирования: Паклин Н. Н., Логинов Ю. Ю., Мозжерин А. В. Равновесное распределение дефектов в теллуриде кадмия до воздействия внешних факторов // Сибирский аэрокосмический журнал. 2022. Т. 23, № 2. С. 315–320. Doi: 10.31772/2712-8970-2022-23-2-315-320.

For citation: Paklin N. N., Loginov Yu. Yu., Mozzherin A. V. [Equilibrium distribution of defects in cadmium telluride before exposure to external factors]. *Siberian Aerospace Journal*. 2022, Vol. 23, No. 2, P. 315–320. Doi: 10.31772/2712-8970-2022-23-2-315-320.

Равновесное распределение дефектов в теллуриде кадмия до воздействия внешних факторов

Н. Н. Паклин¹, Ю. Ю. Логинов², А. В. Мозжерин¹

¹Сибирский федеральный университет

Российская Федерация, 660041, г. Красноярск, просп. Свободный, 79

²Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева

Российская Федерация, 660037, г. Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский Рабочий», 31

E-mail: npaklin@sfu-kras.ru

Надежность электронного оборудования, в том числе и в аэрокосмической отрасли, как в нормальных, так и в экстремальных условиях сопряжена с деградацией материалов ввиду формирования и развития дефектной сети. Теллурид кадмия – один из полупроводников, который активно используется при создании солнечных элементов и современных устройств микроэлектроники. В работе предложена модель распределения точечных дефектов в теллуриде кадмия до воздействия какого-либо ионизирующего излучения, что позволило рассчитать эффективную энергию тепловой активации пары Френкеля – 1,37 эВ. Исследования особенностей формирования и эволюции дефектов с применением методов моделирования в теллуриде кадмия, в перспективе позволит повысить качество его технологического использования, экономя финансовые ресурсы и повышая надежность изделий.

Ключевые слова: теллурид кадмия, динамика структурных дефектов, энергия тепловой активации.

Equilibrium distribution of defects in cadmium telluride before exposure to external factors

N. N. Paklin, Yu. Yu. Loginov, A. V. Mozzherin

¹Siberian Federal University

79, Svobodny Av., Krasnoyarsk, 660041, Russian Federation

²Reshetnev Siberian State University of Science and Technology

31, Krasnoyarskii Rabochi prospekt, Krasnoyarsk, 660037, Russian Federation

E-mail: npaklin@sfu-kras.ru

The reliability of electronic equipment, including in the aerospace industry, both under normal and extreme conditions, is associated with the degradation of materials due to the formation and development of a defective network. Cadmium telluride is one of the semiconductors that is actively used in the creation of solar cells and modern microelectronic devices. In this paper, the model of the point defects distribution in cadmium telluride before exposure to any ionizing radiation is proposed, that made it possible to calculate the effective thermal activation energy of a Frenkel pair equal to 1.37 eV. Studies of the features of the de-

fects formation and evolution using modeling methods in cadmium telluride, in the future, will improve the quality of its technological use, saving financial resources and increasing the reliability of products.

Keywords: cadmium telluride, dynamics of structural defects, thermal activation energy.

Введение

Современные технологии позволяют производить теллурид кадмия достаточно высоко качества, тем не менее, в полупроводнике в процессе и после выращивания, пусть и в незначительном количестве, формируются структурные дефекты, которые создаются вследствие теплового и механического напряжения. Возможные одиночные собственные точечные дефекты, существующие в бинарном соединении CdTe, включают нейтральный Cd или ионизированный междоузельный Cdi, вакансию кадмия VCd, междоузельный теллур Tei, вакансии теллура VTe, Te в узле Cd. Среди них донорами являются Cdi, VCd, а акцепторами Tei и VTe [1]. При наличии достаточной энергии структурные дефекты формируют кластеры, причиной являются термомеханические напряжения.

Особенности формирования кластеров вакансионного и междоузельного типов в теллуриде кадмия при облучении электронами обсуждалось в [2], при этом была построена модель распределения точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) и их кластеров (пор и преципитатов) при неравновесных условиях, обусловленных электронным облучением [3; 4].

Целью настоящей работы является создание модели распределения точечных дефектов до воздействия какого-либо ионизирующего излучения. Фактически определяется влияние земных условий на материал, до его использования в космической среде, где материалы подвергаются воздействию облучения, описывается эволюция точечных дефектов и их кластеров в CdTe. Полученные результаты позволят затем перейти к изучению неоднородных условий – условий, в которых работают аэрокосмические аппараты в космосе.

Моделирование дефектообразования в CdTe

Для описания динамики дефектов в кристалле CdTe вводятся следующие величины: c_0 и c_n – концентрации узлов кристалла до облучения и в процессе облучения; концентрации точечных дефектов c_I – междоузлий и c_V – вакансий; концентрации кластеров c_L – дислокационных петель и c_B – пор; усредненные размеры кластеров r_L – радиусы петель и r_B – радиусы пор. Скорость генерации точечных дефектов (пар Френкеля) при электронном облучении в единице объема $c_0 G$, где $G = \sigma \cdot j$ – вероятность рождения одной пары Френкеля в секунду на один узел, σ – сечение рассеяния электрона на узле кристалла, $j = 10^{19} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ – плотность потока электронов. Вероятности реакций в секунду на одну пару дефектов пропорциональны величинам: K_0 – рекомбинация пары Френкеля (при этом узел восстанавливается), K_I, K_V – рождение минимальных кластеров (сдвоенных точечных дефектов) или димеждоузлия и дивакансии (при этом исчезают два точечных дефекта). Скорости реакций в секунду в единице объема и коэффициенты диффузии вычисляются по формулам

$$(K_0, K_I, K_V) = b^3 \nu \cdot \exp\left[-\frac{(E_0, E_I, E_V)}{kT}\right], \quad (1)$$

$$(D_I, D_V) = b^2 \nu \cdot \exp\left[-\frac{(E_{mI}, E_{mV})}{kT}\right], \quad (2)$$

где (E_0, E_I, E_V) – энергии активации соответствующих реакций; E_{mI}, E_{mV} – энергии миграции точечных дефектов; ν – частота колебаний атомов в узлах решетки; b – постоянная решетки CdTe или величина вектора Бюргерса; k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Для вычислений используются численные значения величин для кристалла CdTe (см. таблицу).

Численные значения ряда параметров кристалла теллурида кадмия

c_0	σ	b	ν	E_0	E_I	E_V	E_{mI}	E_{mV}
см^{-3}	см^2	нм	с^{-1}	эВ	эВ	эВ	эВ	эВ
$1,5 \times 10^{22}$	3×10^{-22}	0,648	10^{13}	0,25	0,45	0,5	0,32	0,6

Эволюция точечных дефектов и их кластеров при электронном облучении удовлетворительно описывается следующей системой уравнений [2; 3; 5; 6]:

$$\frac{\partial c_n}{\partial t} = -Gc_n + K_0 c_I c_V, \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_I}{\partial t} = D_I \frac{\partial^2 c_I}{\partial z^2} + Gc_n - K_0 c_I c_V - 2K_I c_I^2 - \frac{2\pi r_L}{b} K_I c_I c_L, \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_V}{\partial t} = D_V \frac{\partial^2 c_V}{\partial z^2} + Gc_n - K_0 c_I c_V - 2K_V c_V^2 - \frac{4\pi r_B^2}{b^2} K_V c_V c_B, \quad (5)$$

$$\frac{\partial c_L}{\partial t} = K_I c_I^2, \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = K_V c_V^2, \quad (7)$$

$$\frac{\partial r_L}{\partial t} = K_I c_I b, \quad (8)$$

$$\frac{\partial r_B}{\partial t} = K_V c_V b. \quad (9)$$

В качестве начальных условий берутся пространственно однородные распределения концентраций точечных дефектов и нулевые условия для концентраций и размеров кластеров:

$$c_I = c_V = 10^{12} \text{ см}^{-3}, \quad c_L = c_B = 0, \quad r_L = r_B = 0. \quad (10)$$

Такой выбор начальных условий грубый, но удобный и может быть оправдан, если результат сравнивается с экспериментальными данными, отвечающими большим временам. Действительно, из-за высокой скорости генерации пар Френкеля начальные условия мало влияют на динамику при больших временах облучения. При малых временах облучения начальные условия заметно влияют на динамику, поэтому они должны быть стационарными решениями исходной системы уравнений. Однако чтобы физически приемлемые стационарные решения существовали, систему уравнений следует доработать, например, учесть изменение количества узлов. Вычисления из первых принципов очень сложные, требуют больших компьютерных ресурсов либо используют модельные упрощения [7]. Экспериментальные данные разных авторов дают большой разброс в зависимости от метода [8]. Самый простой и интуитивно понятный метод – принцип детального равновесия. Если некоторые данные надежно установлены, то оставшиеся неизвестные величины можно вычислить без особых трудностей, что мы и будем использовать в данной работе.

Пространственно-однородная модель

Сначала рассмотрим модель типа «бесконечный кристалл», цель – исключить граничные условия, т. е. начальные условия пространственно однородные. Вместо величины G , описывающей генерацию пар Френкеля при облучении, введем пока неизвестную эффективную величину P , описывающую тепловую генерацию пар Френкеля. Если в системе (3)–(9) обратить в ноль частные производные по времени и отбросить диффузию, то получится тривиальное решение – все искомые переменные равны нулю как при абсолютном нуле температуры. При температуре

$T = 300 \text{ K}$ и ожидаемом тепловом равновесии можно не рассматривать большие кластеры и считать их радиусы нулевыми, хотя радиус не может быть меньше постоянной решетки. В этом случае три первых уравнения системы (3)–(5) дают одно и то же уравнение для трех неизвестных: $Pc_n = K_0c_Ic_V$. Здесь учитываются только реакции рекомбинации, а сдвоенные дефекты отбрасываются. Количество точечных дефектов много меньше числа узлов и можно считать, что $c_n = c_0$. Величина K_0 известна, но величины c_I, c_V экспериментально не наблюдаемы, а физические процессы описываемые величиной P очень разнообразны и еще мало изучены [9; 10]. Таким образом, недостаточно отбросить некоторые слагаемые в системе (3)–(9), нужно доработать, т. е. учесть дополнительные реакции, которые могут обеспечить тепловое равновесие и не противоречат физическим условиям.

Рассмотрим следующую модель: будем учитывать баланс между процессами генерации точечных и сдвоенных дефектов и процессами их рекомбинации. Для вычислений удобно ввести безразмерные величины. Все концентрации поделим на величину c_0 , тогда используя замены: $c_n = n \cdot c_0$, $c_I = u \cdot c_0$, $c_V = v \cdot c_0$ и полагая $n = 1$, что справедливо при нормальных условиях ($T = 300 \text{ K}$), перепишем первые три уравнения системы как

$$P = c_0K_0uv + c_0K_Iu^2 \cdot c_0K_0v + c_0K_Vv^2 \cdot c_0K_0u, \quad (11)$$

$$P = c_0K_0uv + 2c_0K_Iu^2 - c_0K_Iu^2 \cdot c_0K_0v + c_0K_Vv^2 \cdot c_0K_0u, \quad (12)$$

$$P = c_0K_0uv + 2c_0K_Vv^2 + c_0K_Iu^2 \cdot c_0K_0v - c_0K_Vv^2 \cdot c_0K_0u. \quad (13)$$

Здесь в первом уравнении (11) учтены процессы восстанавливающие узлы: рекомбинация точечных дефектов, рекомбинация вакансии с димеждоузлем и рекомбинация междоузлия с дивакансией. В (12) учтены процессы, рождающие междоузлие (со знаком минус) и уничтожающие междоузлие (со знаком плюс). Аналогично в (13) учтены процессы, рождающие или уничтожающие вакансии. Вычитая (11) из (12) и (13) получаем простые аналитические выражения для величин u и v , а их подстановка обратно в (11) дает простое выражение для величины P . Соберем эти результаты вместе и запишем в следующем виде:

$$u = v = \frac{1}{c_0K_0} \approx 1,0562165 \times 10^{-10} \Rightarrow c_I = c_V \approx 1,6 \times 10^{12} \text{ см}^{-3}, \quad (14)$$

$$P = \frac{K_0 + K_I + K_V}{c_0K_0^2} \approx 1,05674436 \times 10^{-10} \text{ с}^{-1}. \quad (15)$$

Согласно формуле $P = v \cdot \exp(-E_p / kT)$ мы можем вычислить эффективную энергию тепловой активации пары Френкеля $E_p = kT \cdot \ln(v / P) \approx 1,36767 \text{ эВ}$.

Заключение

В результате исследования рассчитана эффективная энергия тепловой активации пары Френкеля – 1,37 эВ, что является первым этапом комплексного изучения условия образования структурных дефектов и их кластеров в кристаллах теллурида кадмия при нормальных условиях с температурой в 300 К. Описанные результаты совпадают с теоретическими данными по порядку величины, но имеют небольшие отличия. Это неизбежно, так как наша модель базируется на представлении изначально «идеального» кристалла. Тем не менее, представленная модель подтверждает данные о появлении и эволюции дефектной сети в кристалле без внешнего воздействия и дает возможность в дальнейшем использовать полученные данные для неоднородной модели бинарного кристалла, с получением фундаментально важных численных данных по энергии тепловой активации.

Библиографические ссылки

1. Yujiea L., Guolic M., Wanqi J. Point defects in CdTe // *Journal of Crystal Growth*. 2003. Vol. 256. P. 266–275.
2. Логинов Ю. Ю., Браун П. Д., Дьюроуз К. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках A_2B_6 . М. : Логос, 2003. 304 с.
3. Loginov Y. Y., Mozzherin A. V., Paklin N. N. Particularities of the interstitial atoms and vacancies clusters formation in a thin cadmium telluride foil during in situ electron irradiation in a TEM // *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2022. Vol. 1230. P. 012013. Doi:10.1088/1757-899X/1230/1/012013.
4. Djafari-Rouhani M., Gue A., Idrissi-Saba H., Esteve D. Simulation a l'echelle atomique de la formation des boucles de dislocation sous irradiation // *Journal de Physique I*. 1994. Vol. 4 (3). P. 453–466.
5. Loginov Yu. Yu., Mozzherin A. V., Bril'kov A. V. Dependence of the Critical Radius of Partial Dislocation Loops on the Stacking Fault Energy in Semiconductors // *Physics of the Solid State*. 2014. Vol. 56, No. 4. P. 720–722.
6. Горичок И. В. Энтальпия образования дефектов Шоттки в полупроводниках // *ФТТ*. 2012. Т. 54, вып. 3. С. 1373–1376.
7. Freysoldt C, Grabowski B, Hickel T, Neugebauer J, Kresse G, Janotti A, Van de Walle C. G. First-principles calculations for point defects in solids // *Rev. Mod. Phys.* 2014. Vol. 86, No. 1. P. 27–39.
8. Корбетт Дж., Бургуэн Ж. Дефектообразование в полупроводниках. М. : Мир, 1979. С. 9–162.
9. Вавилов В. С., Кив А. Е., Ниязова О. Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. М. : Наука, 1981. 368 с.
10. Вавилов В. С., Кекелидзе Н. П., Смирнов Л. С. Действие излучений на полупроводники. М. : Наука, 1988. 192 с.

References

1. Yujiea L., Guolic M., Wanqi J. Point defects in CdTe. *Journal of Crystal Growth*. 2003, Vol. 256, P. 266–275.
2. Loginov Y. Y., Brown P. D., Durose K. *Zakonomernosti obrazovaniya strukturnykh defektov v poluprovodnikakh A_2V_6* [Regularity of the structural defects formation in semiconductors A_2B_6]. Moscow, Logos, 2003.
3. Loginov Y. Y., Mozzherin A. V., Paklin N. N. Particularities of the interstitial atoms and vacancies clusters formation in a thin cadmium telluride foil during in situ electron irradiation in a TEM. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*. 2022. Vol. 1230. P. 012013. Doi: 10.1088/1757-899x/1230/1/012013.
4. Djafari-Rouhani M., Gue A., Idrissi-Saba H., Esteve D. Simulation a l'echelle atomique de la formation des boucles de dislocation sous irradiation. *Journal de Physique I*, EDP Sciences. 1994, Vol. 4 (3), P. 453–466.
5. Loginov Yu. Yu., Mozzherin A. V., Bril'kov A. V. Dependence of the Critical Radius of Partial Dislocation Loops on the Stacking Fault Energy in Semiconductors. *Physics of the Solid State*. 2014, Vol. 56, No. 4, P. 720–722.
6. Gorichok I. V. Enthalpy of Schottky Defects Formation in Semiconductors. *Physics of the Solid State*. 2012, Vol. 54, P. 1373–1376.
7. Freysoldt C., Grabowski B., Hickel T., Neugebauer J., Kresse G., Janotti A., Van de Walle C. G. First-principles calculations for point defects in solids. *Rev. Mod. Phys.* 2014, Vol. 86, No. 1.
8. Corbett J., Bourgoin J. *Defektoobrazovanie v poluprovodnikakh* [Defect formation in semiconductors]. Moscow, Mir Publ., 1979, P. 9–162.
9. Vavilov V. S., Kiv A. E., Niyazova O. R. *Mekhanizmy obrazovaniya i migratsii defektov v poluprovodnikakh* [Mechanisms of the defects formation and migration in semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1981, 368 p.

10. Vavilov V. S., Kekelidze N. P., Smirnov L. S. *Deystvie izlucheniya na poluprovodniki* [Effect of radiation on semiconductors]. Moscow, Nauka Publ., 1988, 192 p.

© Паклин Н. Н., Логинов Ю. Ю., Мозжерин А. В., 2022

Паклин Николай Николаевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики; Сибирский федеральный университет. E-mail: npaklin@sfu-kras.ru.

Логинов Юрий Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры технической физики; Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М. Ф. Решетнева. E-mail: loginov@sibsau.ru.

Мозжерин Александр Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры Юнеско «Новые материалы и технологии»; Сибирский федеральный университет. E-mail: amozzherin@sfu-kras.ru.

Paklin Nikolai Nikolaevich – Cand. Sc., Associate Professor of the Theoretical Physics Department; Siberian Federal University. E-mail: npaklin@sfu-kras.ru.

Loginov Yuri Yurievich – Dr. Sc., Professor of the Technical Physics Department; Reshetnev Siberian State University of Science and Technology. E-mail: loginov@sibsau.ru.

Mozzherin Alexandr Vladimirovich – Cand. Sc., Associate Professor of the UNESCO “New Materials and Technologies” Department; Siberian Federal University. E-mail: amozzherin@sfu-kras.ru.
