

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
МАЛА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
“ПОЛТАВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА  
ІМЕНІ ЮРІЯ КОНДРАТЮКА”



МІНІСТЕРСТВО  
ОСВІТИ І НАУКИ  
УКРАЇНИ



United Nations  
Educational, Scientific and  
Cultural Organization

**М.А.Н.**

• Мала академія наук  
• України під егідою  
• ЮНЕСКО

# ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ XVII МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ПРАКТИЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ “АКАДЕМІЧНА Й УНІВЕРСИТЕТСЬКА НАУКА: РЕЗУЛЬТАТИ ТА ПЕРСПЕКТИВИ”



**12-13 ГРУДНЯ 2024 РОКУ**

УДК 539.2:621.315.548.0: 612.029.62, 621.315.592

РОЗРАХУНОК ПЕРЕРІЗІВ ФОНОННОГО РОЗСІЯННЯ НА АТОМАХ  
ДОМШКИ (In) У CdTe ДЛЯ ТЕРМОДИФУЗІЇ ПРИ ІМПУЛЬСНОМУ  
ЛАЗЕРНОМУ ОПРОМІНЕННІ

**Левицький С.М.**

*Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАНУ*

*levytskyi@ua.fm*

**Шефер О.В**

*Національний університет «Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка»*

*itm.ovshefer@nipp.edu.ua*

Складність механізмів масопереносу при наносекундному імпульсному лазерному (ІЛО) опроміненні обумовлена нестационарністю, нерівноважністю, фізичною та геометричною нелінійністю, високою швидкістю і одночасністю протікання різних фізичних процесів; зокрема це зміна агрегатного стану твердого тіла, генерація пружних та ударних хвиль, значних градієнтів температур і напруг, дефектоутворення, дифузія та ін. [1].

Метою даної роботи було встановлення та аналіз домінуючих механізмів масопереносу індію в CdTe при наносекундному лазерному опроміненні структури In/CdTe.

Якщо радіус дії поля зсуву невеликий (наприклад при заміщенні вакансії МА, дефект Шоткі), то при обчисленні часу релаксації потрібно користуватися виразом, отриманим у припущенні локальної зміни маси та силових постійних. У таких випадках добрим наближенням є модель релеєвського розсіяння, і перетин розсіяння можна записати у формі

$$\sigma_R = \frac{4\pi}{3} r_0^6 q^4 \left[ \left( \frac{\delta G}{G} \right)^2 + \frac{1}{3} \left( \frac{\delta D}{D_0} \right)^2 \right] \quad [3], \text{ де } \delta G - \text{ локальна зміна модуля пружності центру}$$

розсіяння з радіусом  $r_0$ ,  $\delta D$  – відповідна зміна густини. Відповідний характерний

об'єм  $V_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3$ ,  $\delta D = \frac{\Delta M}{V_0}$ .  $q$  – хвильовий вектор фонону. Переріз розсіяння, що

відповідає локальній зміні силових постійних та маси (розсіяння на дефектах маси), рівний

$$\sigma = \frac{V_0^2 \omega^4}{4\pi v^4} \left[ \left( \frac{\Delta M}{M} \right)^2 + d\varepsilon^2 \right], \text{ де } d = 2 \left[ 6 + \frac{b}{\sqrt{5}} \right]^2 \gamma^2.$$

Тут  $\omega$  – частота фонону, константа  $b$  рівна 24.

Практично внесок розсіювання на перерізі, що відповідає локальній зміні силових сталих, стає переважаючої вже при  $\varepsilon \geq 0,1$ . Зокрема, для більшості

напівпровідників  $\frac{\delta G}{G} \approx -4\varepsilon$ , тоді  $d = 2 \left[ 4 + \frac{b}{\sqrt{5}} \gamma \right]^2$ . Величина  $\varepsilon = \frac{r_i - r_0}{r_0}$ , де  $r_i$  –

радіус домішки в матриці,  $r_0$  – радіус власних атомів решітки. Відповідно до ізотропного континууму та сферичної моделі домішки з об'ємним модулем  $G_i$ ,

для оцінки  $\varepsilon$  будемо мати  $\varepsilon = \frac{r'_i - r_0}{r_0} \frac{\mu}{1 + \mu}$ , де  $\mu = \frac{(1 - \nu)G_i}{2G(1 - 2\nu)}$ .  $\nu$  - коефіцієнт

Пуассона,  $r'_i$  – радіус домішки у власній решітці. Зазвичай у твердих розчинах  $G_i \approx G$ . Розрахунок відношень перерізів  $\langle \sigma_0 / \sigma_i \rangle$  у формулі 2 проводився з такими

даними:  $\nu = 0,3$ , діапазон частот фононів взято  $\omega = (1 \dots 5) \cdot 10^{12}$  Гц, оскільки даний діапазон ефективно збуджується при ІЛО, швидкість поширення акустичних хвиль  $v = 3300$  м/с. Атомні маси: Cd - 112,41, Te - 127,6, In - 114,82.

Стала Грюнайзена  $\gamma = 1$ .  $r_0 = 1,4 \text{ \AA}$  (CdTe),  $r'_i = 1,44 \text{ \AA}$  (In).

Одним з можливих механізмів переносу атомів індію вглиб кристала CdTe при ІЛО може бути багатократне індивідуальне зіткнення атомів на фронті ударної хвилі (УХ), при цьому через фронт УХ як через поверхню розриву неперервності термодинамічних величин (нормальний гідродинамічний розрив) тече потік речовини. Тут ударна хвиля - хвиля з "перекинутим" профілем (фронтом), що є рухомою у напівпровіднику поверхнею розриву неперервності тиску, густини, температури [1]. Дійсно, окрім зони термічного впливу, найбільш інтенсивна генерація дефектів відбувається саме в області фронту УХ

у момент її формування та руху, де і спостерігається максимум концентрації точкових і структурних дефектів [3], а також максимум мікротвердості, що вказує на локальний масоперенос [1, 4].

На рис. 1 наведено розрахунок глибини утворення УХ в індії та CdTe в залежності від густини інтенсивності лазерного імпульсу ( $I = E/\tau$ ) у широкому інтервалі інтенсивностей при утворенні інверсійних та варізонних шарів.  $R$  – коефіцієнт оптичного відбивання.

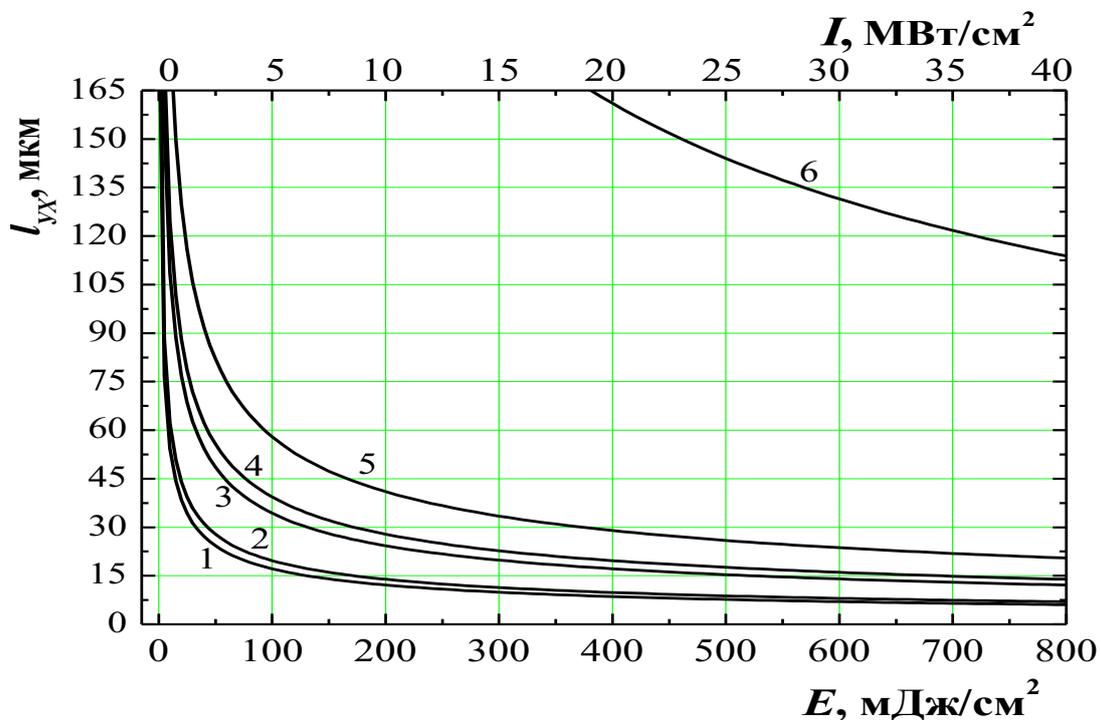


Рисунок 1. - Глибина утворення ударної хвилі в індії (1-4) та CdTe (5 та 6) в залежності від енергії імпульсу ексимерного (1, 3, 5) та рубінового (2, 4, 6) лазера. Для індію  $R = 0,6$  (1 та 2) і  $R = 0,9$  (3 та 4), для CdTe  $R = 0,43$  (5 та 6).

Даний розрахунок глибини утворення УХ  $l_{УХ}$  згідно виразу з [1] вказує на те, що така хвиля в оптимальному діапазоні опромінення -  $E = 10-500$  мДж/см<sup>2</sup> не виникає в плівці індію товщиною до 7 мкм (рис.1), і при товщині In 30-400 нм формується вже в об'ємі кристалу CdTe на відстані, що набагато перевищує глибину проникнення індію  $l_{In}$ , а тому процес формування та поширення УХ не

є домінуючим механізмом масопереносу індію в телуриді кадмію, хоча і призводить до виникнення та перерозподілу точкових дефектів.

Зроблені розрахунки в рамках даної роботи можуть бути застосовані до більшості структур плівка металу-напівпровідник для аналізу масопереносу (дифузійних процесів) у різних частинах об'єму структури при ІЛО в процесі виготовлення різноманітних функціональних напівпровідникових структур.

### **Література:**

1. *V.P. Veleschuk, A.I. Vlasenko, E.I. Gatskevich, V.A. Gnatyuk, G.D. Ivlev, S.N. Levytskyi, Toru Aoki. Doping of Cadmium Telluride by Indium at Nanosecond Laser Irradiation of In/CdTe Structure. Journal of Materials Science and Engineering B. – 2 (4) 2012. – P. 230-239.*

2. *В.П. Велещук, А. Байдуллаева, А.И. Власенко, В.А. Гнатюк, Б.К. Даулетмуратов, С.Н. Левицкий, О.В. Ляшенко, Т. Аоки. Массоперенос индия в структуре In-CdTe при наносекундном лазерном облучении // ФТТ. – 2010. – Т. 52, вып. 3. - С. 439 – 445.*

3. *Robert Triboulet and Paul Siffert. CdTe and related compounds; physics, defects, hetero- and nano-structures, crystal growth, surfaces and applications. - 2010.- Elsevier Ltd. 417 p.*

4. *V.P. Veleschuk, A.I. Vlasenko, E.I. Gatskevich, V.A. Gnatyuk, G.D. Ivlev, S.N. Levytskyi, T. Aoki. Laser doping of CdTe by In // Збірник праць “Physics of Extreme States of Matter – 2012”. Chernogolovka, 2012. – p. 105-108.*