

ФОРМУВАННЯ ПІДСИСТЕМИ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ПЛІВКАХ СПОЛУК IV-VI

Я.П. Салій

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, Україна, E-mail:fcss@pu.if.ua*

Робота присвячена дослідженню формування підсистеми дефектів при вирощуванні, легуванні, опроміненні, термічному відпалі і їх впливові на електричні властивості тонких напівпровідникових плівок на основі сполук IV-VI зі структурою типу NaCl експериментальними, теоретичними і методами комп'ютерного моделювання процесів. Для моделювання методом молекулярної динаміки кристалів і їх дефектної підсистеми однозначно вибрано потенціал міжатомної взаємодії з використанням запропонованого безрозмірного параметру. Встановлено, що кластери бінарної сполуки з протилежно зарядженими іонами набувають структури типу NaCl. Розраховано рівноважні концентрації дефектів в плівках PbSe, $Pb_{1-x}Sn_xTe$, PbTe<In> і PbTe<Ga> з апіорних констант рівноваги квазіхімічних реакцій взятих з зонної теорії. В рамках моделі захоплення рухливих міжвузловинних атомів на пастки пояснено потокові залежності електричних властивостей в α -опроміненних полікристалічних плівках p-PbSe, досліджено температурні залежності електричних властивостей опроміненних монокристалічних плівок n-PbSe. В наближенні теорії кінетики квазіхімічних реакцій визначені характерні часи і енергії активації процесів міграції дефектів при ізотермічному відпалі на повітрі в полікристалічних плівках n-PbTe. На основі дифузійної кінетики пояснена неоднорідність розподілу концентрації дефектів в ізотермічно відпалених у вакуумі плівках p-PbS. Для обґрунтування розмірних ефектів запропоновано електротехнічну модель плівки. Методом кліткових автоматів змодельовано і досліджено процеси формування поверхневих острівців з фрактальною границею.