

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ γ - ОБЛУЧЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ TlGaTe_2

**Р.М.САРДАРЛЫ, О.А.САМЕДОВ, А. П.АБДУЛЛАЕВ, Г.Р. САФАРОВА,
И.И.АСЛАНОВ, Д.Г.ДЖАББАРОВ**

*Институт Радиационных проблем НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр.Ф.Агаева, 9*

Рассчитаны значения плотности локализованных состояний N_F , энергии активации E_a , длины прыжков R , разность между энергиями состояний ΔE вблизи уровня Ферми и концентрации глубоких ловушек N_t кристалла TlGaTe_2 в приближении Мота при различных дозах облучения. Определены рассчитанные значения концентрации ионизованных центров N_f , длина свободного пробега λ , значения коэффициента Френкеля β , форма потенциальной ямы в исходных и облученных кристаллах TlGaTe_2 с учетом термополевого эффекта Пула-Френкеля при дозах 250Мрад.

ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые кристаллы TlGaTe_2 принадлежат к классу соединений группы $A^3B^3C^6_2$, кристаллизующихся в тетрагональной пространственной группе D_{4h}^{18} (структурный тип TlSe). Из соединений этой группы наиболее изучены соединения TlSe и TlS . Исследования неупругого когерентного и некогерентного рассеяния нейтронов, Рамановского рассеяния первого и второго порядка [1-3] показали наличие щели в плотности фононных состояний в кристаллах TlSe и TlS . Этот факт позволяет разделять энергетический спектр этих кристаллов на внутрицепочечные колебания, а межцепочечные взаимодействие рассматривать как слабое возмущение, приводящее к Давыдовскому расщеплению (по аналогии с молекулярными кристаллами). Наличие щели в плотности состояний, предельно-анизотропная цепочечная структура в кристаллах этого класса позволяет ожидать особенности в механизме электрической проводимости, связанные с низкоразмерностью соединений. С другой стороны, этот класс соединений по своим физическим и технологическим свойствам является перспективным материалом для использования в оптоэлектронной технике.

Электрические свойства соединения TlGaTe_2 мало изучены. Имеются лишь данные по ширине запрещенной зоны, полученные из электрических измерений [4,5], которые сильно различаются 1.2 и 2.3eV. Характерной особенностью кристаллов указанного выше типа является то, что они представляют собой цепочки Ga – Te, вытянутые вдоль тетрагональной оси с кристалла. Тетрагональная ось является оптической осью. Одновалентные атомы Tl^+ имеют октоэдрическое окружение из восьми атомов Te.

Расчет зонной структуры TlGaTe_2 выполненный методом псевдопотенциала приводится в работе [6]. Расчеты показали, что потолок валентной зоны находится в высокосимметричной точке Γ на поверхности зоны Бриллюэна, а дно зоны проводимости на линии D . Наименьший по энергии прямой переход осуществляется между состояниями T_3 и T_4 и запрещен в дипольном приближении. Ширина запрещенной зоны, полученная на основе проведенных расчетов, оказалась равной 0.86eV.

Валентные зоны, согласно [6], условно разделяются на три группы. Самая нижняя около –11eV сформирована 5s состояниями Te. Другая группа в области – (4÷6)eV, в основном, обусловлена 6s состояниями Tl и 4s состояниями Ga. Верхняя группа в области (0÷4)eV образована 5p состояниями Te, 6p состояниями Tl и 4p состояниями Ga. Эти данные согласуются с результатами работы [7], где изучены

Образцы соединения $TiGaTe_2$ синтезировались сплавлением исходных компонентов (чистота не менее 99.99) в вакуумированных кварцевых ампулах, а их монокристаллы выращивались модифицированным методом Бриджмена.

Измерения электропроводности проводились при постоянном токе четырехзондовым методом в двух направлениях: параллельном $\sigma_{||}$ и перпендикулярном σ_{\perp} тетрагональной оси с кристалла и выполнены в температурном интервале $90 \div 300K$. Образцы для измерений представляли собой отколотые прямоугольные пластины толщиной $\sim 0.5mm$, тетрагональная ось кристалла лежала в плоскости пластин. В экспериментах использовались индиевые контакты, омичность контактов контролировалась перед каждым измерением.

Целью настоящие работы является исследование температурной зависимости электропроводности кристаллов $TiGaTe_2$, подвергнутых γ -облучению, и анализ полученных результатов в приближении Мота и с учетом термополевого эффекта Рула-Френкеля.

На Рис.1 приведены температурные зависимости электропроводности $\sigma_{||}(T)$ монокристаллов $TiGaTe_2$ без облучения (кривая 1) и подвергнутые γ -облучению (кривые 2-5). На вставке к рисунку даны те же измерения в координатах Мотта.

В этом температурном интервале доминирует проводимость термовозбужденных носителей заряда в разрешенной зоне. Уменьшение температуры сопровождается быстрым убыванием концентрации примесных носителей заряда, то есть при температурах ниже 220K для $\sigma_{||}(T)$ и 180K для $\sigma_{\perp}(T)$ эти области представляют собой области вымораживания примесных носителей заряда.

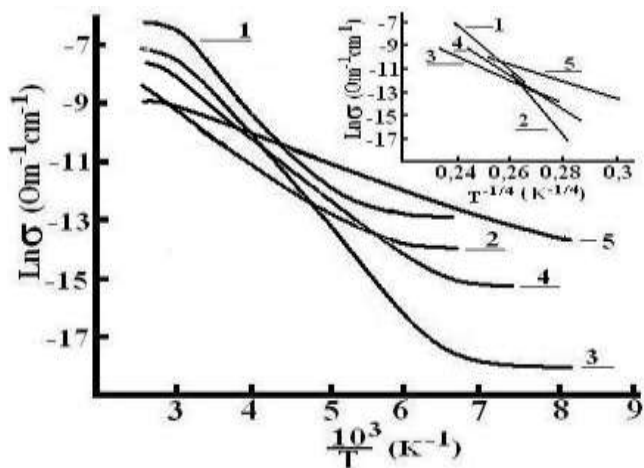


Рис.1.

Температурные зависимости электропроводности $\sigma_{||}(T)$ монокристаллов $TiGaTe_2$ без облучения (кривая 1) и подвергнутые γ -облучению (кривые 2-5), (кривая 1 – 0Мрад, кривая 2 – 100Мрад, кривая 3 – 150Мрад, кривая 4 – 200Мрад, кривая 5 – 250Мрад). На вставке к рисунку даны те же измерения в координатах Мотта.

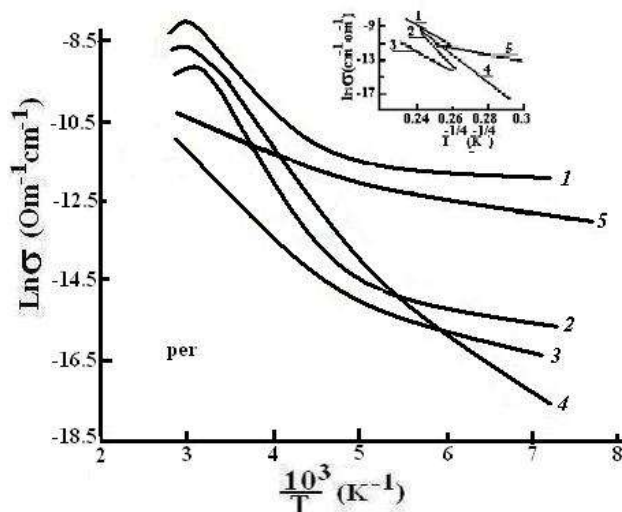


Рис.2.

Температурные зависимости электропроводности $\sigma_{\perp}(T)$ в координатах Аррениуса (0Мрад – кривая 1; 100Мрад – кривая 2; 150Мрад – кривая 3; 200Мрад – кривая 4; 250Мрад – кривая 5).

На Рис.2 приведены температурные зависимости электропроводности $\sigma_{\perp}(T)$ в координатах Аррениуса. Как видно из Рис.1 и Рис.2, в температурном интервале $220 < T < 300K$ $\sigma_{||}(T) \approx \sigma_{\perp}(T)$. Это свидетельствует о слабой анизотропии эффективных масс носителей заряда в монокристаллах $TiGaTe_2$, вытекающей из расчетов зонной структуры этих кристаллов. Однако с дальнейшим понижением

температуры (при $T < 200K$) удельная проводимость параллельно цепочкам значительно превосходит удельную проводимость перпендикулярно им. То есть при низких температурах проводимость в направлении сильной связи существенно превышает проводимость в направлении слабой связи. Следует отметить, что такой характер анизотропии проводимости характерен для цепочечных кристаллов $TlInTe_2$ [3] изоструктурных $TlGaTe_2$.

При понижении температуры до температуры, при которой начинается термоактивация носителей в зону проводимости, зависимость $\sigma(T)$ носит линейный характер, что характерно для зонной проводимости. Полученные экспериментальные результаты показывают, что радиационные дефекты приводят к возникновению примесных энергетических уровней в запрещенной зоне кристалла. Термозаполнение этих уровней происходит при температуре более низкой по сравнению с необлученным соединением, т.е. расширяется температурная область существования термоактивационной проводимости. Эта температурная область характеризуется также тем, что при ней происходит температурное заполнение ловушечных центров, и локализованные заряженные примеси оказываются нейтральными. С ростом дозы облучения до 100Мрад проводимость уменьшается, в интервале доз 100÷200Мрад остается постоянной, дальнейший рост дозы облучения приводит к росту проводимости. Доминирующую роль в этих процессах играют дефекты ионизационного типа (заряженные дефекты), которые возникают в результате γ -облучения. На наш взгляд наиболее вероятным механизмом образования радиационных дефектов в соединении $TlGaTe_2$ является многократная ионизация анионной подрешетки [4].

В Таблице 1 сведены рассчитанные значения плотности локализованных состояний N_F , энергии активации E_a , длины прыжков R , разность между энергиями состояний ΔE вблизи уровня Ферми и концентрации глубоких ловушек N_t при различных дозах облучения в приближении Мотта.

Таблица 1.

| Доза (Мрад) | Направл. | R (Å) | N_t ($\text{эВ}^{-1} \text{см}^{-3}$) | E_0 (эВ) | ΔE (эВ) |
|-------------|----------------------|---------|---|------------|-----------------|
| 0 | σ_{\parallel} | 87,32 | $8,03 \times 10^{18}$ | 0,096 | 0,0446 |
| | σ_{\perp} | 86,46 | $8,35 \times 10^{18}$ | 0,095 | 0,0442 |
| 100 | σ_{\parallel} | 91,24 | $6,73 \times 10^{18}$ | 0,100 | 0,0936 |
| | σ_{\perp} | 108,6 | $3,35 \times 10^{18}$ | 0,119 | 0,0555 |
| 150 | σ_{\parallel} | 88,07 | $6,17 \times 10^{18}$ | 0,102 | 0,0477 |
| | σ_{\perp} | 112 | $2,97 \times 10^{18}$ | 0,123 | 0,0572 |
| 200 | σ_{\parallel} | 92,15 | $6,47 \times 10^{18}$ | 0,101 | 0,0471 |
| | σ_{\perp} | 99,79 | $4,70 \times 10^{18}$ | 0,110 | 0,0510 |
| 250 | σ_{\parallel} | 81,79 | $1,04 \times 10^{19}$ | 0,090 | 0,0418 |
| | σ_{\perp} | 88,46 | $7,62 \times 10^{18}$ | 0,097 | 0,0452 |

В сильном электрическом поле, когда перепад потенциальной энергии электрона $eER(T)$ на длине характерного прыжка $R(T)$ сравнивается с шириной полосы энергий вокруг уровня Ферми $\Delta\varepsilon(T)$, в которой происходят прыжки, электрон может двигаться в направлении поля, испуская фононы при каждом перескоке. Согласно Мотту [8], ток в этом случае не зависит от температуры и растет с увеличением поля по закону

$$I(E) \sim \exp\{- (E_0/E)^{1/2}\}. \quad (2)$$

На Рис.3 для области резкого роста тока представлены зависимости электропроводности от электрического поля при температуре 90К и 300К в координатах $\text{Ln } \sigma \sim \sqrt{E}$. Как известно, теория экспоненциального роста электропроводности впервые выдвинута Пулом и Френкелем [9]

$$\sigma = \sigma_0 \exp(\beta \sqrt{E}), \quad (3)$$

где β - коэффициент Френкеля

$$\beta = \frac{\sqrt{e^3}}{kT\sqrt{\pi\epsilon\epsilon_0}}, \quad (4)$$

e – заряд электрона, ϵ - диэлектрическая проницаемость вакуума, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. По наклону прямых на Рис.3 были определены значения β при различных температурах. Температурная зависимость β , определенная из зависимости $\sigma(E^{1/2})$ при различных температурах, приведена на Рис.4.

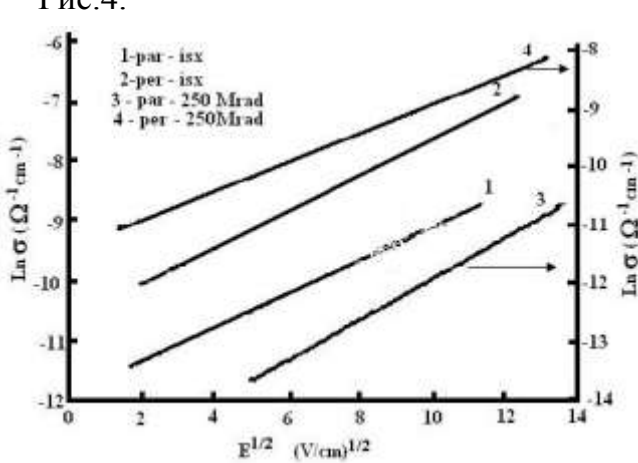


Рис.3.

Зависимость электропроводности монокристаллов TlGaTe_2 от напряженности поля E : (1,3-параллельно (3-250Мрад), 2,4-перпендикулярно (4- 250Мрад) слоям при $T=200\text{K}$).

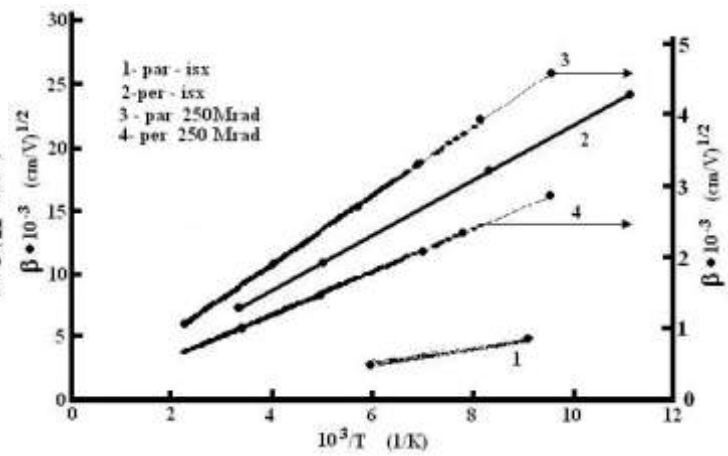


Рис.4.

Температурная зависимость коэффициент Френкеля β . (1,2-параллельно (2-250Мрад), 3,4-перпендикулярно (4-250Мрад) слоям при $T=200\text{K}$).

Как видно из Рис.4, наблюдается рост β с уменьшением температуры, при этом хорошо выполняется зависимость $\beta \sim 10^3/T$. Также температурное изменение β согласует с теорией Пула-Френкеля и экстраполяция прямой $\beta \sim 10^3/T$, согласно формуле (3) приводит в начало координат. В работе [9] показано что, минимальное значение электрического поля, соответствующего нелинейной зависимости $\sigma \sim f(E)$, содержит информацию о концентрации дефектов, ответственных за термополевую ионизацию и проводимость кристаллов TlGaTe_2 . Согласно выражению

$$N_t = \left(\frac{2e}{kT\beta} \sqrt{E_e} \right)^3, \quad (5)$$

располагая значениями минимального электрического поля E_c , при котором начинается нелинейная зависимость $\sigma(E^{1/2})$, можно оценить концентрацию ионизованных центров N_f TlGaTe_2 . Важное значение имеет определение формы потенциальной ямы. Функция $\varphi(x)$ - потенциальная энергия, зависящая от расстояния до примесного центра или же ловушки (x – расстояние вдоль направления приложенного поля), под действием электрического поля изменяется [9]. Из работ [9,10] следует, что

$$\varphi(x) = -\frac{kT\beta}{2}\sqrt{E} = eEx, \quad (6)$$

$$x = \frac{kT\beta}{2e\sqrt{E}}. \quad (7)$$

С использованием экспериментальных данных при помощи (6) и (7) определена форма потенциальной ямы в TlGaTe_2 , которая изображена на Рис.5. Если известна форма кривой потенциальной энергии для взаимодействия с конкретным центром, то можно получить информацию о структуре центров захвата. Как указывается в работе [11], чтобы электрон покинул центр, должно

выполняться условие $\epsilon_e > E_0 - \Delta U_0$. Необходимо, чтобы электрон сохранял энергию до того момента, когда он минует точку перевала и не потерял бы ее при тепловых соударениях.

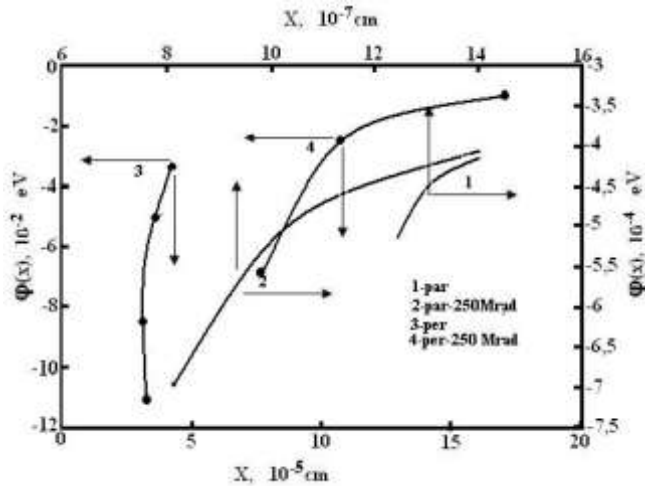


Рис .5.

Форма потенциальной ямы, связанной с электронной ловушкой в TlGaTe_2 (1,2-параллельно (2-250Мрад), 3,4-перпендикулярно (4-250Мрад) слоям при $T=200\text{K}$).

Это имеет место лишь в тех случаях, когда длина свободного пробега электрона больше эффективных размеров потенциальной ямы. При этом длина свободного пробега носителей тока определяется следующей формулой [11,12]

$$\lambda = \frac{1}{e} f(E_e) = \frac{kT\beta}{2e\sqrt{E}}. \quad (8)$$

Длина свободного пробега электрона в монокристаллах TlGaTe_2 , вычисленная на основе экспериментальных данных, согласно этой формуле, приблизительно равна $9,8 \cdot 10^{-6}\text{см}$ (облученные 250Мрад соответственно равны $4,3 \cdot 10^{-4}\text{см}$, значит после γ облучения увеличивается длина свободного пробега электрона в 43 раза) (Таблица2). В Таблице 2 сведены рассчитанные значения концентрации ионизованных центров N_f , длина свободного пробега λ , значения коэффициент Френкела β в необлученных и облученных кристаллах TlGaTe_2 при дозах 250Мрад в приближении Пула-Френкеля.

Таблица 2.

| Направл. | $\beta(\text{см/V})^{1/2}$ | $\lambda(\text{см})$ | $N_f(\text{см}^{-3})$ | $R(\text{см})$ |
|--------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-----------------------------|-------------------------------|
| σ_{\parallel} (исход) | $2,8 \div 4,7 \cdot 10^{-3}$ | $9,6 \div 11,3 \cdot 10^{-7}$ | $1,4 \div 26 \cdot 10^{16}$ | $11,8 \div 9,6 \cdot 10^{-7}$ |
| σ_{\perp} (исход) | $24 \div 7,2 \cdot 10^{-3}$ | $9,8 \cdot 10^{-6}$ | $1,8 \cdot 10^{13}$ | $8,7 \cdot 10^{-7}$ |
| σ_{\parallel} (250Мрад) | $90 \div 1,5 \cdot 10^{-3}$ | $1,5 \div 1,68 \cdot 10^{-4}$ | $5,7 \div 13 \cdot 10^{17}$ | $8,9 \div 10,2 \cdot 10^{-7}$ |
| σ_{\perp} (250Мрад) | $20 \div 9 \cdot 10^{-4}$ | $4,3 \cdot 10^{-4}$ | $1,05 \times 10^{10}$ | $9,9 \div 9,3 \cdot 10^{-7}$ |

Таким образом, в монокристаллах TlGaTe_2 при понижении температуры проводимость в омиической области по разрешенной зоне как в направлении цепочек, так и перпендикулярно им осуществляется термовозбужденными примесными носителями заряда. С понижением температуры перенос заряда осуществляется посредством прыжков носителей заряда по локализованным состояниям вблизи уровня Ферми, энергетически более выгодным, хотя пространственно более удаленным, что является характерным для прыжковой

Р.М.САРДАРЛЫ, О.А.САМЕДОВ, А. П.АБДУЛЛАЕВ, Г.Р. САФАРОВА, И.И.АСЛАНОВ, Д.Г.ДЖАББАРОВ

проводимости с переменной длиной прыжка. При дальнейшем понижении температуры наблюдается обычная прыжковая проводимость, при которой средняя длина прыжка носителей заряда составляет величину порядка среднего расстояния между примесями и при изменении температуры не меняется. Рассчитано значение плотности локализованных состояний N_F , энергии активации E_a , длины прыжков R , разность между энергиями состояний ΔE вблизи уровня Ферми и концентрации глубоких ловушек N_t при различных дозах облучения. Показано что, с ростом дозы облучения до 100Мрад проводимость уменьшается, в интервале доз 100÷200Мрад остается постоянным, дальнейший рост дозы облучения приводит к росту проводимости. Доминирующую роль в этих процессах играют дефекты ионизационного типа (заряженные дефекты), которые возникают в результате γ -облучения. На основе исследований зависимости $\sigma \sim (E^{1/2})$ показано, что ток в нелинейной области (с учетом термополевого эффекта Пула-Френкеля) обусловлен слабым полевым эффектом как при измерениях параллельном. так и перпендикулярном кристаллографической оси тетрагонального кристалла $TiGaTe_2$. Определены рассчитанные значения концентрации ионизованных центров N_t , длина свободного пробега λ , значения коэффициент Френкеля β , форма потенциальной ямы в необлученных и облученных кристаллах $TiGaTe_2$ при дозах 250Мрад.

1. С.Б.Вахрушев, Б.Е.Квятковский, Н.М.Окунева, К.Р.Аллахвердиев, В.И.Слисенко, Р.М.Сардарлы, *ФТТ*, **26** (1984) 1225.
2. М.В.Белоусов, Р.М.Сардарлы, *ФТТ*, **27** (1985) 662.
3. Р.М.Сардарлы, Колебательные спектры соединений A^3B^6 и $A^3B^3C^6_2$, Изд."Элм", Баку, (2004).
4. G.D.Guseinov, A.M.Ramazanzade, E.M.Kerimova, H.Z.Ismailov, *Phys. Stat. Sol.*, **22** (1967) k117.
5. G.D.Guseinov, G.V.Abdullaev, S.M.Bidzinova, F.M.Seidov, M.Z.Ismailov, A.M.Pashaev, *Phys. Lett.*, **A33** (1970) 421.
6. Э.М.Годжаев, Г.С.Оруджев, Д.М.Кафарова, *ФТТ*, **46** (2004)811.
7. K.Okazaki, K.Tanaka, J.Matsuno, A.Fujimori, L.F.Mattheiss, S.Iida, E.Kerimova, N.Mamedov, *Phys.Rev.*, **B64** (2001)045210.
8. Н.Ф.Мотт, Э.А.Девис, Электронные процессы в некристаллических веществах. М. Мир, (1974) 472.
9. Я.И.Френкель, *сбор. избранных трудов, Наука, 2* (1975) 217.
10. R.H.Hill, *Phil.Mag.*, **23** (1971) 59.
11. Н.Г.Волков, В.К.Ляпидевский, *ФТТ*, **14** (1972) 1337.
12. Н.Н.Нифтиев, М.А.Алиджанов, О.Б.Тагиев, М.Б.Мурадов, *ФТП*, **37** (2003)173.

γ - ŞÜALARLA ŞÜALANMIŞ $TiGaTe_2$ KRISTALININ ELEKTRİK KEÇİRİCİLİYİ

R.M.SƏRDARLI, O.Ə.SƏMƏDOV, A.P.ABDULLAYEV, G.P.SƏFƏROVA, İ.İ.ASLANOV, C.G.CABBAROV

Lokallaşmış səviyyələrin hal sıxlığı N_F , aktivasiya enerjisi E_a , R sıçrayışların uzunluğu, Fermi səviyyəsinə yaxın enerjisi səviyyələri arasında fərq ΔE və şüalanmanın müxtəlif dozalarında N_t dərindən tələlərin konsentrasiyası hesablanmışdır. VAX və $\sigma \sim (E^{1/2})$ əsasında tədqiqatlar göstərilir ki, $TiGaTe_2$ kristalında həm parallel həm də perpendikulyar istiqamətdə cərəyan qeyri-xətti oblastda (qeyriomik oblastında) zəif sahə effektivlə əlaqədardır İonlaşmış mərkəzlərin konsentrasiyası, sərbəst qaçış məsafəsi λ , β Frenkel əmsalının qiyməti hesablanmış və potensial çəpərin forması şüalanmamış və 250Mrad dozada şüalanmış $TiGaTe_2$ kristalı üçün (qeyriomik oblastında) müəyyən edilmişdir.

**R.M.SARDARLI, O.A.SAMEDOV, A.P.ABDULLAEV, G.R.SAFAROVA, I.I.ASLANOV,
D.G.DZHABBAROV**

Values of density of localized conditions N_F , energy of activation E_a , length of jumps R , a difference between energy conditions ΔE near to Fermi's level and concentration of deep traps N_t of TlGaTe₂ crystals in Mott approximation by various dozes of an irradiation have been calculated. The calculated values of concentration ionize centers N_i , length of mean free path, value of Frenkel factor (β), the form of potential well in initial and irradiated crystals TlGaTe₂ subject to of field effect of the Poole-Frenkel at dozes 250Mrad have been defined.

Редактор: Т.Мамедов