

Б.П. Коман

Взаємозв'язок механічних та електрофізичних властивостей власнодефектних кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$

*Львівський Національний університет ім. Івана Франка, факультет електроніки,
79005, вул. Драгоманова 50 Львів; bogdan_28@mail.ru*

Досліджено особливості поверхневої макропластичної деформації монокристалів напівпровідникових сплавів $Cd_xHg_{1-x}Te$. Виявлено наявність на початковій стадії деформації в процесі одновісного стиску з постійною швидкістю “зуба” плинності, що пов'язується з утворенням “debris”-шару. Встановлена його природа та вплив на трансформацію дефектно-домішкової структури власнодефектних кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($\epsilon \leq 2\%$). Досліджена поведінка коефіцієнту Хола при пошаровому стравлюванні “debris”-шару. На основі розрахунків зроблено висновок, що домінуючим механізмом блокування дислокаційних петель “debris”-шару є їх взаємодія з вакансіями ртуті по електростатичному механізму.

Ключові слова: “зуб” плинності, дислокації, стехіометрія, “debris”-шар, вакансії, діаграма.

Стаття постуила до редакції 16.11.2010; прийнята до друку 15.09.2011.

Вступ

Кристали $CdHgTe$ характеризуються значним відхиленням від стехіометрії внаслідок чого концентрація вакансій ртуті (V_{Hg}) в межах області гомогенності може досягати $10^{19} - 10^{20} \text{ м}^{-3}$. Такі дефекти відіграють роль електрично-активних домішок, а також взаємодіють між собою та з іншими дефектами, утворюючи складні комплекси. Загалом, наявність в таких кристалах електрично-активних дислокацій, високої концентрації власних нестехіометричних дефектів, значна доля іонної складової в хімічному зв'язку накладає також і певні особливості на поведінку їх механічних властивостей, пов'язаних з рухом та розмноженням дислокацій. Цілком очевидно, що нестехіометричні V_{Hg} будуть відігравати роль не лише “класичних” локальних стопорів для рухомих дислокацій, але й ефективно взаємодіяти зі “свіжими” дислокаціями, змінюючи при цьому дефектно-домішковий стан кристалу і впливаючи таким чином на його електрофізичні параметри. Тому слід очікувати певної кореляції механічних та електрофізичних властивостей власнодефектних кристалів $CdHgTe$, підданих пластичній деформації. Зокрема, внаслідок неоднорідного розподілу деформацій і напружень насамперед при одновісному навантаженні таких зразків.

Метою роботи є встановлення взаємозв'язку між

особливостями кінетики одновісної деформації з постійною швидкістю кристалів $CdHgTe$ та трансформацією дефектно-домішкової структури їх приповерхневих шарів.

I. Експериментальні результати та їх обговорення

1.1. Особливості кривих деформаційного зміцнення τ - ϵ кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$.

Закономірності макропластичної деформації вузькощілинних кристалів $CdHgTe$ досліджувалися методами одновісного стиску з постійною швидкістю [1, 2] та мікротвердості [3 - 5]. Встановлено роль дефектів стехіометрії у термоактивованому русі дислокацій та визначені їх активаційні параметри. Пластична деформація ($\dot{\epsilon} = \text{const}$) супроводжується специфічною немонотонною поведінкою кінетичних кривих при переході до розвинутої пластичної плинності кристалу. Зокрема, криві навантаження τ - ϵ для монокристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ добре описуються чотирьох стадійною формою, вперше запропонованою для ГЦК кристалів в роботі [6]. Однак детальні дослідження вказують на значну невідтворюваність діаграм навантаження, а в деяких випадках – на їх суттєві відмінності. Зокрема, стверджується, що для досліджуваних кристалів на

початковій стадії деформації характерним є “зуб” плинності [7]. Таке явище приймається як експериментальний факт, без інтерпретації. Проведені нами систематичні дослідження залежностей $\tau - \epsilon$ дозволяють стверджувати, що вказана особливість не є характерною властивістю даних кристалів, а визначається низкою факторів (ступінь попередньої деформації, стан поверхні, дефектна структура і т.д.). Аналіз літератури по даній проблемі вказує на те, що дане явище зумовлене в загальному випадку специфічним характером мікропластичної деформації в приповерхневому шарі в процесі макропластичної плинності кристалів.

Для визначення впливу поверхневого шару на характер залежності $\tau - \epsilon$ монокристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ в роботі досліджувалися монокристалічні зразки складом $x = 0,16 - 0,21$, вирощені методами Бріджмена та твердотільної рекристалізації (ТТР). Досліджували кристали двох груп: 1) які володіли первинним “зубом” плинності на початковій стадії кривих деформації (отримані в основному методом ТТР); 2) зразки, що характеризуються монотонною залежністю $\tau - \epsilon$ без будь-яких особливостей з точки зору типової чотирьох стадійної кривої. Деформацію проводили на релаксометрі Регеля-Дубова при кімнатній температурі. Розміри зразків складали $2 \times 2 \times 6 \text{ мм}^3$, швидкість навантаження $5,85 \cdot 10^{-3} \text{ і і} / \delta \dot{a}$.

Вивчення впливу попередньої деформації на характер поведінки початкової стадії залежностей $\tau - \epsilon$ встановило наступне. Якщо зразок, що володіє первинним “зубом” плинності навантажити до макроскопічної межі і провести релаксацію або повне розвантаження, то “зуб” збережеться при всіх наступних циклах навантаження аж до повного руйнування зразка. В наступному експерименті зразок із другої групи, що не володіє первинним “зубом”, навантажували до $\epsilon \approx 2,5\%$ і повністю розвантажували. При повторному навантаженні одразу (рис. 1), “зуб” на другому циклі навантаження (б) не проявляється. Його появу зафіксовано лише на третьому циклі навантаження (в). На наступному етапі в розвантаженому стані хімічним поліруванням в 20 % бромному травнику стравлювали з кожної грані поверхневий шар товщиною 120 мкм. Повторне навантаження (г) “зуба” не виявило. Такий ефект спостерігався на всіх зразках другої групи після стравлювання поверхневого шару товщиною 80..200 мкм.

Навантаження зразка з цієї серії до макроскопічної межі плинності та витримка в розвантаженому стані на протязі 24 год. приводило до виникнення “зуба” вже на першому циклі навантаження.

За умовами виникнення та характерними особливостями описане явище можна віднести до ефекту Хаазена-Келлі, виявленого вперше на монокристалах алюмінію та нікелю [8].

Згідно сучасних представлень, виникнення вторинного “зуба” обумовлено сумарною дією двох

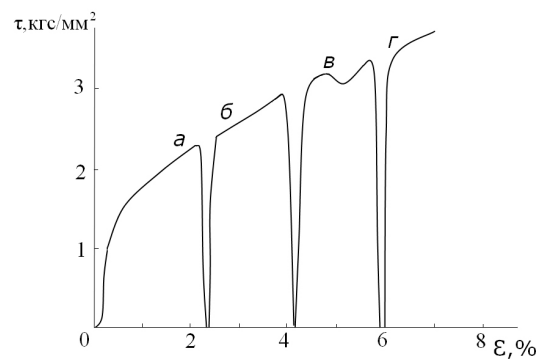


Рис. 1. Крива навантаження зразка $Cd_{0,16}Hg_{0,84}Te_3$ з проміжними циклами повного розвантаження.

механізмів. Перший зумовлений бар'єрною дією “debris”-шару [9], що утворюється в процесі попереднього навантаження кристалу внаслідок домінуючої плинності поверхневих шарів [10 - 12]. Видалення цього приповерхневого спектру бар'єрів, що виступає додатковим джерелом далекодіючих і короткодіючих напруг, зменшує значення деформуючої напруги (рис. 1,г).

Висновок про переважну локалізацію пластичної деформації в приповерхневих шарах деформованих кристалів підтверджується вивченням швидкості розчинення W методом циклічного травлення (рис. 2). Травлення здійснювалося в 5 % розчині Br_2 в метанолі. Глибину стравлюваного шару контролювали оптиметром МІІ-7 по стандартній методиці.

Другий механізм зумовлений переповзанням дислокацій близько поверхні під час розвантаження кристалу [11]. Він дозволяє пояснити виникнення вторинного “зуба” після 24 год. витримки в розвантаженому стані попередньо деформованого зразка. Зокрема в процесі його стиску внаслідок збільшення термодинамічного потенціалу утворення вакансій виникає їх пересичення, рівне [9]:

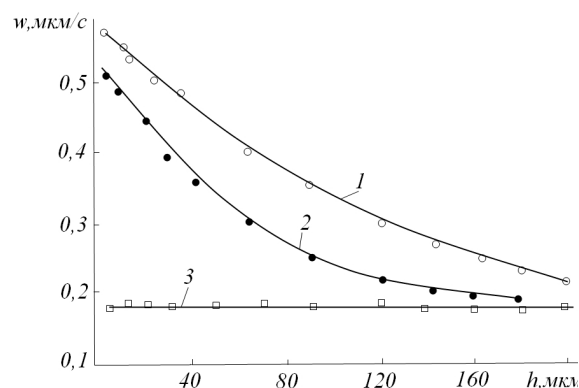


Рис. 2. Залежність швидкості розчинення деформованих зразків $Cd_{0,19}Hg_{0,81}Te$ від глибини стравлюваного шару: 1 – деформований до макроскопічної межі плинності, $\epsilon \approx 1\%$; 2 – $\epsilon \approx 1,9\%$; 3 – вихідний недеформований зразок.

$$\frac{c_0}{c} = \frac{c_1 + c}{c} \approx \exp\left(\frac{tn_a}{kT}\right),$$

де c_0, c, c_1 – рівноважна, дійсна і надлишкова концентрація вакансій в полі нормальних напруг τ , n_a – атомний об'єм. При розвантаженні кристалу та під час його витримки розвантаженому стані з вільної поверхні “засмоктуються” вакансії. Це, в свою чергу веде до перепозання (неконсервативного руху) кінців дислокацій, що виходять на вільну поверхню та їх більш жорсткому закріпленню внаслідок збільшення кількості неконсервативно рухомих порогів. Тому при наступному повторному навантаженні виникає бар'єрний ефект і для його переборення рухомі дислокації повинні рухатися під дією додаткової напруги Δt .

Аналіз умов виявлення ефекту Хаазена-Келі показує, що різкий “зуб плинності” можна отримати не лише при розвантаженні і повторному навантаженні, але й при штучному моделюванні бар'єрного шару в приповерхневих шарах деформованого кристалу. Останнє, зокрема, можна реалізувати різними видами механічної обробки поверхні зразка. На рис. 3 для прикладу представлені діаграми τ - ϵ зразків $Cd_{0,21}Hg_{0,79}Te$ з найбільш часто застосовуваною обробкою поверхні. Використовувались зразки, що не володіли первинним “зубом”. Спостережуваний “зуб” на діаграмах можна класифікувати як ефект Хаазена-Келі, “спровокований” спеціальною обробкою поверхні. Порушені шари, що володіють підвищеною концентрацією дефектів і утворенні в процесі обробки поверхні, сприяють утворенні “debris”-шару при навантаженні зразка.

З приведених прикладів слідує, що в якості контролю за ефективністю видалення поверхневого деформованого шару можна успішно застосовувати аналіз діаграм τ - ϵ .

Таким чином, одна з причин недостатньої відтворюваності діаграм навантаження τ - ϵ зумовлена поверхневими дефектами, що вносяться при

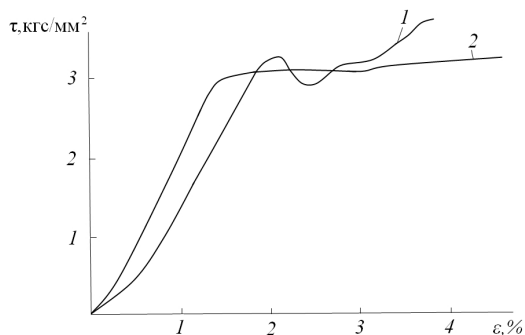


Рис. 3. Криві навантаження зразків $Cd_{0,21}Hg_{0,79}Te$ з різним типом фінішної обробки поверхні: 1 – хімічне полірування в 20% розчині Br_2 в метанолі; 2 – механічна шліфівка на абразиві М5.

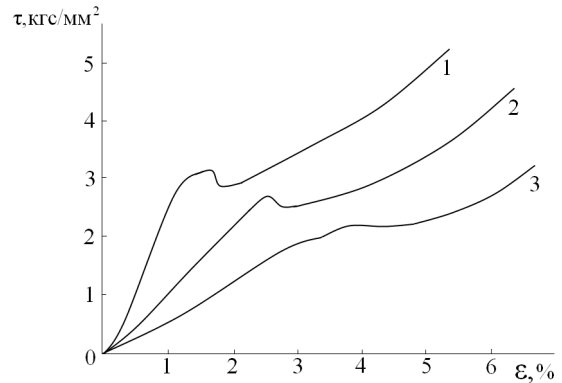


Рис. 4. Криві навантаження зразків $Cd_{0,21}Hg_{0,79}Te$: 1 – деформація на повітрі, $T = 290$ К; 2 – в 5 % розчині Br_2 в метанолі; 3 – в 10 % розчині Br_2 в метанолі.

підготовці зразків до вимірювань. Приведені приклади виявлення “зуба” є частковим випадком ефекту Хаазека-Келі. Тим не менше, без спеціальних досліджень важко встановити той факт, що спостережувані на залежностях τ - ϵ (рис. 4) “зуби” плинності є не первинними, а вторинними, тобто зумовлені попередньою деформацією зразка.

Традиційна точка зору на природу первинного “зуба” наступна: а) домішкове закріплення дислокацій по Котрелю; б) динамічна природа “зуба”, яка пояснюється з позицій різкого розмноження дислокацій в цій області. Однак автори роботи [11] на основі власних експериментальних результатів, а також результатів досліджень по відпаду первинного “зуба” припускають, що за його виявлення може бути в певній мірі відповідальним і власний поверхневий “debris”-шар. Таке припущення основане на встановленому експериментальному факті про початок пластичної плинності зразка значно нижче мікроскопічної межі плинності.

Альтернативний підхід до трактування природи “зуба” плинності, розвинутий на основі відомої теорії деформації Александера-Хаазена [13], запропонований в теоретичних роботах [14, 15]. Автор вважає, що таке явище зумовлене зміною динаміки руху та розмноження дислокацій на різних стадіях кривої навантаження та ефектом “динамічного старіння” дислокацій з утворенням надлишкової концентрації домішок в ядрі. На протигагу такому підходу, в роботі [16], методом математичного моделювання показана можливість реалізації “зуба” на деформаційній кривій в абстрактній моделі площадки, з хаотично розміщеними на ній стопорами (дефектами) для рухомих дислокацій.

Запропоновані теоретичні моделі знаходять лише деяке опосередковане підтвердження в малодислокаційних монокристалах Si з нейтральними домішками, однак далекі від пояснення існуючих сьогодні багаточисельних

експериментальних результатів. Основним їх недоліком є ігнорування особливої ролі поверхні в перебігу процесів пластичної плинності кристалу. Тим не менше, в монографії [9] на прикладі великої кількості кристалів різного типу (від ковалентних до чисто іонних) прямими методами показана активна роль поверхні у розвитку процесів макро- і мікропластичності. Підтвердженням цього факту є фундаментальні результати молодшої галузі механіки – мезомеханіки, отримані в сьогоденні, із застосуванням самих сучасних методик. Згідно її основних положень поверхневий шар в деформованому твердому тілі є самостійною системою. З ростом деформацій в ньому розвиваються самостійні процеси, що здійснюють визначальний вплив на стадійність локалізації пластичної плинності руйнування зразка. Ключову роль при цьому в мезомеханіці поверхневого шару відіграє «ефективна» товщина та інтерфейс з об'ємом кристалу [17].

Щоб в'яснити питання про питомий вклад бар'єрної дії власного “debris”-шару в утворення первинного “зуба” плинності кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ при одночасній дії інших механізмів був поставлений експеримент по методиці Крамера [18]: поверхневий деформований шар стравлювався в процесі навантаження зразка. Зразки із серії, що виявляли первинний “зуб”, одночасно деформувалися з реєстрацією діаграми $\tau - \epsilon$. Навантаження першого зразка здійснювали в звичайних умовах. Деформація двох других – в розчині Br_2 в метанолі. Швидкість видалення поверхневого шару регулювали концентрацією травника. Результати експериментів представлені на рис. 5. Як видно, перший зразок володіє стандартною кривою навантаження з “зубом” плинності $\Delta t = 0,32 \frac{e \tilde{A} \tilde{n}}{i i^2}$. Деформація другого зразка в розчині, що забезпечує швидкість травлення недеформованого шару 3 мкм/хв., супроводжується зменшенням “зуба” до $\Delta t = 0,01 \frac{e \tilde{A} \tilde{n}}{i i^2}$. При навантаженні в 10 % травнику ($W = 6$ мкм/хв)

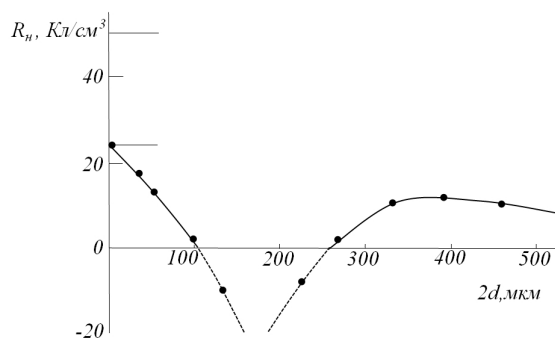


Рис. 5. Товщинна залежність коефіцієнту Хола при пошаровому стравлюванні зразка $Cd_{0,19}Hg_{0,81}Te$ (умови в тексті).

первинний “зуб” не спостерігається.

Приведені результати приводять до висновку, що за природу первинного “зуба” повну відповідальність несе власний “debris”-шар, що утворюється на стадії до макроскопічної межі плинності. Він, в подальшому, здійснює бар'єрну дію для дислокацій, генерованих в процесі деформації внутрішніми джерелами. Існування такого шару підтверджується і результатами дослідження поверхневих шарів зразків, деформованих до макроскопічної межі плинності і виявляючих первинний “зуб” (рис. 2). Аналогічні дослідження зразків без обговорюваної особливості на діаграмі $\tau - \epsilon$ демонструють відсутність в них різкого градієнтного шару. Очевидно, зразки першої групи, що виявляли первинний “зуб” володіють певною мікроскопічною структурою, яка дозволяє створити при навантаженні на псевдопружній стадії поверхневий градієнтний шар. В зразках другої групи структура кристалу не забезпечує умов для створення шару, що володіє бар'єрною дією для дислокацій від “внутрішніх” джерел.

1.2 Ефекти перебудови дефектно-домішкової структури в пластично-деформованих кристалах $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($e \leq 2\%$)

Вплив деформації на електрофізичні властивості напівпровідникових кристалів досліджується відносно давно [наприклад, 19 - 21]. Однак таким дослідженням властиві наступні недоліки: по-перше, основною рисою проведених досліджень цього плану є той факт, що вимірювання проводилися на структурно-досконалих орієнтованих стехіометричних монокристалах (Si, Ge) і в меншій кількості на кристалах бінарних сполук. Це зручні модельні об'єкти і вплив пластичної деформації в них може трактуватися практично з однозначних позицій. Наслідком такого підходу є спрощені модельні представлення та звужені висновки. По-друге, спостережувані зміни трактувалися, як правило з позицій “обірваних” зв'язків на дислокаціях, а в подальшому – домішкових хмар Котрела, зв'язаних з дислокаціями. Ефекти взаємодії нестехіометричних дефектів з дислокаціями та їх вплив на електрофізичні властивості ігнорувалися. По-третє, не враховувалися неоднорідний характер розподілу напружень та деформації в зразках на різних стадіях їх навантаження. Отримані, таким чином, результати несуть інтегральну інформацію про зміни в деформованому кристалі. Автори [22] закономірно припустили, що в спостережуваних ними деформаційних явищах в $CdHgTe$, основний вклад вносять електронні стани точкових дефектів, утворених в процесі руху дислокацій.

Однак, утворення в приповерхневих шарах деформованих кристалів $CdHgTe$ “debris”-шару зумовлює структурно-просторову перебудову дефектно-домішкової структури таких кристалів. Зокрема, утворений шар по своїй природі володіє густо розвинутою дислокаційною сіткою в приповерхневому шарі деформованого зразка з густиною

дислокацій $10^7 \div 10^9 \text{ м}^{-2}$, що утворює градієнтний шар між поверхневою областю зразка та його об'ємом. Введені таким чином "свіжі" дислокаційні петлі не можуть залишатися чистими і тому інтенсивно блокуються точковими дефектами кристалу. Процес такої взаємодії достатньо вивчений в фізиці дислокацій і служить основою для пояснення багатьох ефектів в фізиці пластичності конструктивних матеріалів та пояснення властивостей деформованих напівпровідникових кристалів [23 - 25].

В досліджуваних об'єктах, внаслідок локалізації деформаційних процесів на початковій стадії деформації кристалів, в приповерхневих шарах виникають специфічні процеси взаємодії дислокацій з власними дефектами кристалічної решітки $CdHgTe$. Зокрема, утворення градієнтного "debris"-шару стимулює дифузію V_{Hg} в приповерхневий шар та подальшу їх ефективну взаємодію з його дислокаційною сіткою. Це, зрозуміло, приведе до збіднення об'єму зразку V_{Hg} , внаслідок чого їх концентрація (акцепторів) буде зменшуватися аж до повної електричної перекомпенсації: існуюча концентрація донорних електронів ($10^{14} - 10^{16} \text{ м}^{-3}$) вже не зможе нейтралізуватися акцепторними центрами. Описаний процес і приведе до інверсії типу провідності області кристалу за "debris"-шаром. Якщо "зняти" (стравити) цей шар, насичений дислокаційними петлями з локалізованими на них V_{Hg} , то отриманий зразок буде володіти інвертованим типом провідності, зокрема $p - n$.

На рис. 5 приведені результати, що демонструють зміну коефіцієнта Хола R_H після поетапного (пошарового) травлення деформованого зразка $CdHgTe$ в 10% розчині Br_2 в метанолі. Концентрацію носіїв контролювали за значенням константи Хола на стадії насичення температурної залежності $R_H(T)$ в області домішкової провідності. Вихідний зразок p -типу з концентрацією $\delta_{77} = 8 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$, що володів типовим, первинним "зубом" плинності величиною $\Delta t = 0,3 \text{ мкс}$, після деформації до $\epsilon \approx 1,8\%$ підвищив концентрацію акцепторів до $6 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}$. Наступне пошарове травлювання в 10% розчині Br_2 в метанолі з поетапним контролем R_H демонструє його зменшення (збільшення концентрації акцепторів імовірно за рахунок V_{Hg}) аж до його інверсії. Інвертований тип провідності зберігається в інтервалі знятих товщин ($2d = 100 \div 250 \text{ мкм}$). Подальше травлювання (понад 250 мкм) знову повертає зразок у p -тип ($R_H > 0$), оскільки ця область, внаслідок просторової віддаленості, не зазнала ефективного відтоку V_{Hg} в "debris"-шар з наступним їх

закріпленням на дислокаційних петлях.

При деформації зразків $p - Cd_{0,19}Hg_{0,81}Te$ з високою вихідною концентрацією акцепторів ($\delta_{77} = 2 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-3}$) і наступним травлюванням "debris"-шару кристали зберігають p -тип провідності, але мають нижчу концентрацію ($\delta_{77} = 8 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$). Відсутність інверсії типу провідності пояснюється обмеженою здатністю локалізації V_{Hg} на генерованих дислокаціях "debris"-шару. Тому об'єм зразка і далі зберігає умову $N_A > N_D$ ($p > n$).

Проаналізуємо акцепторну дію центрів, введених пластичною деформацією.

Спостережувані зміни концентрації акцепторів після деформації (рис. 5) кристалів $Cd_xHg_{1-x}Te$ можна пов'язати зі зміною концентрації заряджених дефектів близько дислокацій. Сильна акцепторна дія, що спостерігається в деформованих зразках, зумовлена комплексами вакансій V_{Hg} на дислокаціях.

Зокрема, взаємодія вакансій з дислокаціями в кристалах $Cd_xHg_{1-x}Te$ залежить від пружної взаємодії між дислокацією і вакансією через відмінність радіусу вакансії і вибувшого атома, а також внаслідок електростатичного механізму.

Енергія взаємодії краю дислокації з вакансією, зумовлена першим механізмом [22] в припущенні, що точковий дефект спотворює решітку сферично симетрично, при врахуванні дилатації, створеної вакансією $d \approx 10\%$, рівна

$$U_1 = - \frac{4(n+1)mbr_0^3 d}{3(1-n)R} \cdot \sin Q \approx 0,1 \text{ eV},$$

де R, Q – циліндричні координати точкового дефекту.

Розрахунок електростатичної взаємодії можна оцінити наступним чином. Енергія взаємодії зарядженої дислокації з вакансією в загальному випадку рівна:

$$U_{\vec{a}\vec{e}\cdot\vec{n}\vec{o}} = q\vec{a} \cdot \vec{j}_{\vec{a}},$$

де $q\vec{a}$ – ефективний заряд вакансій; $\vec{j}_{\vec{a}}$ – електростатичний потенціал дислокацій. На відстанях, багато менших радіуса екранування (радіуса рідовського циліндра) справедливо:

$$\vec{j}_{\vec{a}} \approx \frac{2q}{e} \ln(R_{\vec{a}\vec{e}\vec{o}}/r),$$

де q – лінійна густина заряду дислокації. В такому випадку

$$U_{\vec{a}\vec{e}\cdot\vec{n}\vec{o}} \approx (2q \cdot q\vec{a}) / e \ln(R_{\vec{a}\vec{e}\vec{o}}/r), \text{ де } q = \frac{ej}{\vec{a}}$$

При $q\vec{a} = \vec{a} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Е}\vec{e}$; $j = 0,1$;
 $\vec{a} \approx 4 \cdot 10^{-10} \text{ м}$;

$$r \approx 4i \text{ м} = 4 \cdot 10^{-9} \text{ м}, \quad R_{\vec{a}\vec{e}\vec{o}} \approx 4 \cdot 10^{-7} \text{ м}$$

Таблиця 1

Енергії пружної взаємодії типових фонових домішок з краєвою дислокацією в CdHgTe

Домішка	Тип домішки	Радіуси атомів, Å		ε	U _{пр.} , eV
		Заміщуючого домішкового, r	Заміщеного в тв. розчині, r ₀		
Електроактивні					
Cu	p	1.35	1.48	-0.088	-0.094
Al	n	1.26	1.48	-0.17	-0.150
Au	p	1.50	1.48	+0.013	+0.019
In	n	1.44	1.48	-0.028	-0.036
Амфотерні					
Si		1.17	1.48	-0.26	-0.186
Ge		1.22	1.48	-0.21	-0.168
Sn		1.40	1.48	-0.067	-0.066
Pb		1.46	1.48	-0.014	-0.018
Антиструктурні					
S		1.04	1.48	-0.42	-0.204
Se		1.14	1.48	-0.30	-0.192
Te		1.32	1.48	-0.12	-0.120
O		0.66	1.48	-0.012	-0.156

$$U_{\text{дв.}} \approx 2e^2j / e \ln(R_{\text{дв.}} / r) \approx 0,5 \text{ eV}$$

Таким чином, в досліджуваних кристалах взаємодія дислокацій з вакансіями здійснюється в основному за рахунок дії електростатичного механізму.

Оскільки в деформованому кристалі завжди переважають вакансії по Hg і Cd, що мають акцепторні властивості, то процес деформації повинен супроводжуватися підвищенням концентрації акцепторів для зразків p-типу та зниженням концентрації носіїв в зразках n-типу за рахунок локалізації електронів провідності на комплексах акцепторів, зв'язаних з дислокаціями. Однак такі процеси, що відбуваються в деформованому кристалі не єдині. Так, при високих температурах деформації зразків ($\dot{\epsilon} \geq 390 \text{ s}^{-1}$), коли мобільність домішкових атомів велика, крім описаних процесів проходить також блокування дислокацій домішковими хмарами. Внаслідок цього дія акцепторних комплексів послаблюється і навіть може спостерігатися протилежний ефект – донорна дія пластичної деформації.

При помірних температурах процес взаємодії V_{Hg} з дислокаціями буде домінувати над процесами взаємодії з неконтрольованими домішками, неминуче присутніми в кристалі, з наступних причин. По-перше, в реальному кристалі концентрація нестехіометричних V_{Hg} перевищує концентрацію фонових домішок; по-друге, енергія взаємодії V_{Hg} з краєвими дислокаціями значно переважає енергію пружної взаємодії з типовими домішками, притаманним цим кристалом. Типові фонові домішки, виявлені в цих кристалах, приведені в табл. 1.

Енергію пружної взаємодії атомів домішок з

краєвою дислокацією можна оцінити за формулою [22]:

$$U_{i\delta} = 4G \cdot \hat{a} \cdot e \cdot r_0^3 \cdot \frac{\sin \alpha}{R},$$

де R і α – полярні координати домішкового атома відносно дислокації; G – модуль зсуву

($1,8 \cdot 10^{10} \text{ дин/см}^2$), $e = \frac{r - r_0}{r}$ – параметр невідповідності.

Результати розрахунків приведені в табл. 1. Вони демонструють наступне: 1) енергії пружної взаємодії розглянутих типових домішок є незначні і близькими за абсолютною величиною; 2) отримані значення пружних енергій для домішок є значно меншими енергії електростатичної взаємодії краєвої дислокації з вакансією.

Таким чином, блокування “свіжовведених” дислокацій “debris”-шару буде здійснюватися в основному V_{Hg} по електростатичному механізму.

Висновки

Суто механічне явище, а саме утворення “зуба” плинності на початковій стадії деформації ($\epsilon \leq 2\%$), стимульоване утворенням в при поверхневому шарі деформованого кристалу “debris”-шару – своєрідного гетерного шару для засмоктування з об'єму зразка, приводить до структурної перебудови його дефектно-домішкової структури. Це відображається у зміні електрофізичних характеристик деформованого кристалу при пошаровому стравлюванні, аж до інверсії його типу провідності. Домінуючим механізмом блокування дислокаційних петель

“debris”- шару є їх взаємодія з V_{Hg} по електростатичному механізму.

Коман Б.П. - доцент кафедри фізики напівпровідників факультету електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка .

- [1] И.В. Курило. *Физико-механические свойства теллуридов кадмия, ртути и их твердых растворов.* // Препринт Института металлургии Академии наук СССР, М., 92 с. (1982).
- [2] Б.П. Коман. *Особенности пластической деформации узкозонных монокристаллов $Cd_xHg_{1-x}Te$ – Полупроводники с узкой запрещенной зоной и полуметаллы.* Мат. V Всесоюз. Симпозиума. Львов, Сс. 43-44 (1980).
- [3] И.В. Курило, Й.М. Спитковский, А.Д. Шнейдер. *Термически активированное скольжение в кристаллах $HgTe$, $CdTe$, $Cd_xHg_{1-x}Te$.* // Изв. Вузов. Физика, 9, сс. 111-113 (1974).
- [4] Б.П. Коман, М.В. Пашковський. *Особенности термически активированного скольжения в кристаллах $Cd_xHg_{1-x}Te$.* // **23**(1), сс. 23-27 (1978).
- [5] Б.П. Коман, М.В. Пашковський. *Влияние структурных дефектов на температурную зависимость микротвердости кристаллов $Cd_xHg_{1-x}Te$.* // УФЖ, **25**(4), сс.47-51 (1980).
- [6] J. Diehe. *Zuverformung von Kupfer-Einkristallen Verfestigungskuzzen und Overlachenerscheinungen.* // Z. Metallkunde, **47**(5), pp. 171-178 (1956).
- [7] S. Cole. *Plastic bending of $Cd_xHg_{1-x}Te$.* // J. Mater. Sci. **15**(20), pp. 231-235 (1980).
- [8] P. Haasen, H. Kelly. *A yield phenomenon of in face-centered cubic single crystals.* // Acta Metal., 5, pp. 211-231 (1957).
- [9] В.П. Алехин. *Физика прочности и пластичности поверхностных слоев материалов.* Наука, М. 423 с. (1983).
- [10] В.П. Алехин, О.В. Гусев, М.Х. Шоршоров. *О причинах появления аномальной пластичности в поверхностных слоях кристаллов на начальной стадии деформации.* // ФХОМ, 6, сс. 47-53 (1969).
- [11] В.П. Алехин, Г.Г. Алиев, М.Х. Шоршоров. *Образование градиента плотности дислокаций в приповерхностных слоях кристаллов кремния на начальной стадии деформации.* // ФХОМ, 7, сс.131-137 (1971).
- [12] В.П. Алехин. *Физическая природа низкотемпературной микропластической деформации в полупроводниковых кристаллах.* // ФХОМ, 6, сс. 77-83 (1978).
- [13] H. Alexander. In *Dislocation in solids*, ed. By F.R.N. Nabarro (Amsterdam – Oxford – N.Y.– Tokyo, North – Holland), **7**(35), p. 113 (1986).
- [14] Б.В. Петухов. *Теория зуба текучести в малодислокационных кристаллах.* // ЖТФ, **71**(11), сс.42-47 (2001).
- [15] Б.В. Петухов. *Закономерности влияния примесей на предел текучести кристаллов кремния.* // ФТП, **38**(4), сс. 385-389 (2004).
- [16] В.В. Благовещенский, И.Г. Панин. *К вопросу о «зубе» текучести.* // ФММ, **109**(3), сс. 310-313 (2010).
- [17] В.Е. Панин, А.В. Панин. *Эффект поверхностного слоя в деформируемом твердом теле.* // Физическая мезомеханика, **8**(5), сс. 7-15 (2005).
- [18] C. Friend, I.R. Kramer. *The effect of surface Remosal on the Yield Point Phenomena of Metals.* // Trans, AIME, 239, pp. 211-220 (1967).
- [19] В.И. Никитенко, Ю.А. Осипьян. В сб.: *Проблемы современной кристаллографии.* Под ред. акад.Ю. Осипьяна. Наука, М. (1975).
- [20] F. Buch, C.N. Ahlquist. *Influence of dislocations on electrical conductivity of CdTe.* // J. Appl. Phys., **45**(4), pp. 1756-1761 (1974).
- [21] В. Тимофеев, С. Шевченко, Ю. Осипьян. *Электронные свойства дислокаций в полупроводниках.* Едиториал УРСС, М. 320 с. (2010).
- [22] С.Г. Гасан-заде, С.В. Старый, И.В. Стриха, Г.А. Шепельский. *Электрическая активность дислокаций и точечных дефектов деформационного происхождения в кристаллах $CdHgTe$.* // ФТП, **37**(1), сс. 7-16 (2003).
- [23] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций.* Атомиздат, М. 474 с.(1972).
- [24] В.И. Никитенко. В сб. *Динамика дислокаций/Под ред. акад. Ю.А. Осипьяна.* Наукова думка, К., с. 7. (1975).

B.P. Koman

The Correlation of The Mechanical and Electrophysical Properties of The Intrinsic-Defective Crystals CdHgTe

*Ivan Franko Lviv National University, department of electronics,
50, Dragomanova Str., Lviv, 79005, bogdan_28@mail.ru*

Specialties of the surface macroplastic deformation monocrystals semiconductor alloys CdHgTe had been researched. The existence had been found at the first stage of the deformation in the process of the one-axial pressure with the constant speed of “tooth-yield”, which connected formation of the “debris”-layer. It's nature and impact of the transformation of the defective-impurities structure intrinsic-defected crystals CdHgTe had been installed. The behavior of the coefficient Hall was researched in the process of layer-by-layer etching “debris”-layer. On the base of the calculations a conclusion was made, which is a dominating mechanism of the blocking dislocated loops “debris” layer is their interaction with vacancies of the mercury on the electrostatic mechanism.