

УДК 539.2

Ш.Р. Адилов¹, М.Е. Кумеков², С.Е. Кумеков^{1*}, Е.И. Теруков³¹Казахский национальный технический университет им. К.И. Сатпаева, г. Алматы²Таразский государственный университет им. М.-Х. Дулати, г. Тараз³Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. С.-Петербург

*E-mail: skumekov@mail.ru

О механизме формирования поликристаллического гетероперехода n-ZnO/p-CuO

Аннотация. Рассматривается модель формирования гетероперехода на базе поликристаллических пленок оксидов цинка и меди. На основе анализа кристаллической структуры оксидов цинка и меди выявлены грани элементарных ячеек, между которыми выполняются эпитаксиальные соотношения. Показано также, что наряду с выполнением правила эпитаксиальных соотношений близость значений ионных радиусов двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} дает возможность реализации поликристаллического гетероперехода в системе ZnO / CuO.

Ключевые слова: поликристаллические пленки оксидов цинка, поликристаллические пленки оксидов меди, эпитаксиальные соотношения, гетеропереход.

В работах [1-5] сообщалось о получении гетероперехода в системе n-ZnO /p-CuO. Хотя переходы были получены разными технологиями, электрофизические характеристики были практически идентичны и свидетельствовали об их выпрямляющих свойствах. Измерения при различных температурах выше комнатной показывают, что крутизна вольт-амперных характеристик возрастает вплоть до температур 400°С [2-4]. Технологические приемы, использованные при получении гетеропереходов, позволяют говорить лишь о поликристаллической структуре слоев n-ZnO и p-CuO. Каким образом возникают условия для формирования гетероперехода между веществами с разной кристаллической сингонией? Ответ на этот вопрос и является предметом настоящего доклада.

Как известно [6], образование гетероперехода, требующее стыковки кристаллических решеток, возможно лишь при совпадении типа, ориентации и периода кристаллических решеток сращиваемых материалов. Эти условия определяют эпитаксиальные отношения для получения гетероперехода в случае двух различных материалов с одинаковой кристаллической структурой. Эпитаксия легко осуществляется, если разность параметров обеих решеток не превышает

10% [7]. При этих условиях гетеропереход формируется в монокристаллическом блоке.

Наиболее часто для получения гетеропереходов используют вещества с кубической сингонией, имеющие близкие значения постоянной решетки. На рисунке 1 приведена зависимость постоянной решетки и ширины запрещенной зоны типичных веществ со структурой алмаза и цинковой обманки, используемых для создания гетеропереходов [8]. Так как углы между гранями в кубической системе одинаковы, то, зная значения постоянной решетки d , можно делать предположения о возможности создания гетеропереходов на исследуемых веществах с кубической решеткой. Из рисунка видно, что постоянные решеток имеют близкие значения для групп различных веществ с разными энергиями запрещенной зоны E_g : $d \approx 5,4 \text{ \AA}$ (ZnS, AlP, GaP, Si); $d \approx 5,67 \text{ \AA}$ (ZnSe, AlAs, GaAs, Ge); $d \approx 6,1 \text{ \AA}$ (ZnTe, CdSe, AlSb, GaSb, InAs, HgSe).

Изучая возможности наращивания гетеропереходов в системах с разными сингониями, мы пришли к выводу [3, 4], что для неразрывного продолжения решетки одного вещества другим, в принципе достаточно, чтобы хотя бы по одной из граней каждой решетки имели близкие геометрические параметры. Технологически форми-

рование гетероперехода из материалов с разными сингониями осуществимо последовательным напылением пленок двух разных материалов и последующей их кристаллизацией методом отжига. Процессы, происходящие при такой методике образования гетероперехода, сложны и многообразны. Они включают формирование кристаллографической структуры системы зерно – межзеренная граница – зародыш. Рост зародышей, а иногда и их образование облегчаются, если между зародышем, одним из зерен и межзеренной границей существуют эпитаксиальные отношения [9]. Таким образом, кристаллизация на межзеренных границах в соответствии с необходимым минимумом энергии будет происходить в местах, удовлетворяющих эпитаксиальным отношениям.

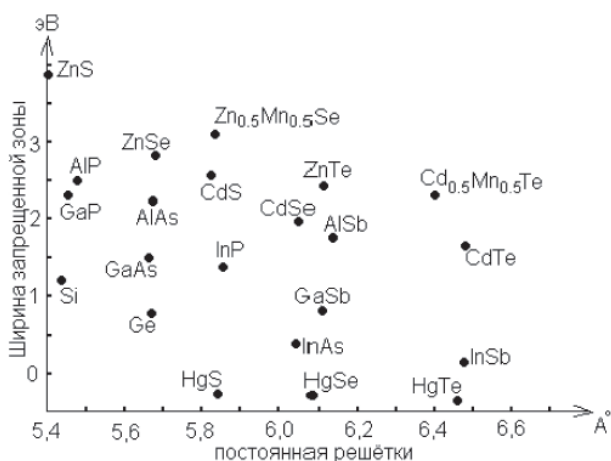


Рисунок 1 – Постоянные решёток и ширина запрещённой зоны для веществ с кубической сингонией [8]

Согласно рентгенографическим измерениям на пленках ZnO и CuO, проведенных в [2-5], параметры кристаллических решеток можно свести в таблицу:

| Вещество | ZnO | CuO |
|--|------------------------|-----------------------|
| Сингония | Вюрцит | Моноклинная |
| Базисный вектор a | $a=3.2489 \text{ \AA}$ | $a=4.684 \text{ \AA}$ |
| Базисный вектор b | $b=3,249 \text{ \AA}$ | $b=3,425 \text{ \AA}$ |
| Базисный вектор c | $c=5,206 \text{ \AA}$ | $c=5,129 \text{ \AA}$ |
| Угол между b и c , a и c | α | α |
| Угол между b и a | $\gamma=120^\circ$ | $\gamma=99^\circ 28'$ |

Как видно из таблицы, эпитаксиальные отношения выполняются для граней, образуемых векторами **b** и **c** и с углами $\alpha = \beta = 90^\circ$ (см. рисунок 2).

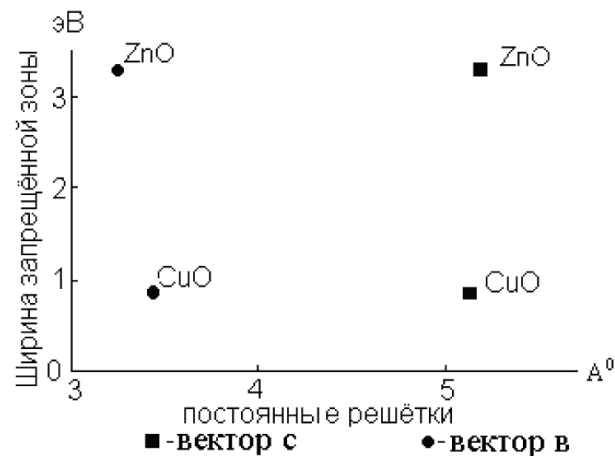


Рисунок 2 – Постоянные решёток и ширина запрещённой зоны для оксидов цинка и меди

Известно, что изменение химического состава при образовании гетероперехода между полупроводниковыми материалами типа $A^{III}B^V$ и их твердыми растворами на основе арсенидов, фосфидов и антимонидов Ga и Al происходит без изменения периода решетки также благодаря близости ковалентных радиусов Ga и Al. В случае оксидов меди и цинка возможность образования гетероперехода должна определяться ионными радиусами двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} . Имеющиеся в литературе данные показывают, что ионные радиусы двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} составляют близкие значения: $0,8 \text{ \AA}$ и $0,83 \text{ \AA}$ соответственно [10]. Поэтому наращивание гетероперехода в системе ZnO/CuO на плоскостях граней с векторами **b** и **c** также не приводит к изменению периода решетки.

Выводы: таким образом, в этой работе на основе анализа кристаллической структуры оксидов цинка и меди и значений ионных радиусов двухзарядных ионов Cu^{++} и Zn^{++} показана возможность формирования поликристаллического гетероперехода в системе оксидных полупроводников ZnO и CuO, относящихся к различным кристаллическими сингониями.

Литература

- 1 Nakamura Y., Yoshioka H., Miyayama M., Yanagida H. Selective CO Gas Sensing Mechanism with CuO/ZnO Heterocontact // J. Electrochem. Soc. – 1990. – V.137, N.3. – P. 940-943.
- 2 Лисицкий О.Л., Кумеков М.Е., Кумеков С.Е., Теруков Е.И. Поликристаллический тонкопленочный гетеропереход n-ZnO/p-CuO // Физика и техника полупроводников, 2009. – Т.43. – В.6. – С. 794-796.
- 3 Верменичев Б.М., Лисицкий О.Л., Кумеков М.Е., Кумеков С.Е., Теруков Е.И., Токмолдин С.Ж. Электрофизические свойства гетероструктур n-ZnO/p-CuO // Физика и техника полупроводников. – 2007. – Т. 41. – В.3. – С. 298-300.
- 4 F. Ozyurt kuş, T. Serin, N. Serin. Current transport mechanisms of n-ZnO/p-CuO Heterojunctions// Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 2009. – Vol. 11, N. 11. – P. 1855 – 1859.
- 5 Sungmook Jung, Seongho Jeon and Kijung Yong. Fabrication and characterization of flower-like CuO-ZnO heterostructure nanowire arrays by photochemical deposition// Nanotechnology. – 2011. – Vol. 22. – P. 015606 (8 p.).
- 6 Алферов Ж.И. Гетеропереход // Физика, БЭС. – 1998. – 943 с.
- 7 Палатник Л.С., Папилов И.И. Эпитаксиальные пленки. – М., 1971. – 253 с..
- 8 Питер Ю, Мануэль Кардона. Основы физики полупроводников. – М., 2002. – 560 с.
- 9 Харбеке Г. Поликристаллические полупроводники. Физические свойства и применения. – М.: Мир. 1989. – 341 с.
- 10 Таблицы физических величин / Справочник. – М.: Атомиздат, 1976. – 1006 с.

Ш.Р. Адиллов, М.Е. Кумеков, С.Е. Кумеков, Е.И. Теруков

n-ZnO/p-CuO поликристаллдық гетерооткелдің қалыптастыруының механизмі туралы

Мырыш және мыс оксидтерінің поликристаллдық қабыршықтарының негізінде гетерооткелдің қалыптасу моделі қарастырылған. Мырыш және мыс оксидтерінің кристаллдық құрылымын талдау нәтижесінде элементар ұяшықтарының қырлары арасында эпитаксиалдық қатынас орындалатыны табылған. Эпитаксиалдық қатынас орындалуымен қатар және де олардың иондарының Cu^{++} , Zn^{++} иондық радиустарының мәндерінің жақындығы ZnO/CuO жүйесінде поликристаллдық гетерооткелдің пайда болу мүмкіндігі көрсетілген.

Түйін сөздер: цинк оксидтерінің поликристалл қабыршақтары, мыс оксидтерінің поликристалл қабыршақтары, эпитаксиаль байланыстары, гетерооткешу.

Sh.R. Adilov, M.E. Kumekov, S.E. Kumekov, E.I. Terukov

About the mechanism of formation of polycrystalline n-ZnO/p-CuO heterojunction

The model of formation of heterojunction on the basis of polycrystalline films of zinc and copper oxides is considered. On the basis of the analysis of crystal structure of zinc and copper oxides it is carried sides of elementary cells between which out epitaxy parities are revealed. It is shown also, that alongside with performance of a rule epitaxy parities the affinity of values of ionic radiuses double charged ions Cu^{++} and Zn^{++} enables the realization of polycrystalline heterojunction in system ZnO/CuO.

Keywords: film polycrystalline zinc oxide, copper oxide polycrystalline films, epitaxial relationships heterojunction.