УДК 621.315.592

## М.Б. ЛІТВІНОВА, О.Д. ШТАНЬКО

Херсонський навчально-науковий інститут Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова

# МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ЦЕНТРУ EL2 В АРСЕНІДІ ГАЛІЮ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ ВИСОКОТЕМПЕРАТУРНОЇ ДИФУЗІЇ ДОМІШОК

Вивчено природу впливу відпалу та дифузії домішок атомів кадмію і селену на зміну квантової ефективності випромінювання, що індукується центрами EL2 в монокристалах арсеніду галію. Використано порівняльну методику високотемпературної дифузії домішок в умовах вакууму і атмосфери миш'яку. За одержаними результатами здійснено моделювання структурних, випромінювальних та інших фізичних властивостей центрів EL2 в монокристалах арсеніду галію. Встановлено, що характер і степінь зміни квантової ефективності випромінювання через ці центри визначаються вакансійним складом кристалів і обумовлено вірогідністю формування комплексів EL2-домішка.

Для досліджень були використані кристали напівізолюючого нелегованого GaAs n-muny провідності, що вирощені методом Чохральського з орієнтацією (100) і питомим опором  $\rho = 7 \times 10^7 - 2 \times 10^8$  Ом × см. Концентрація центрів EL2, що є глибокими донорами, в них становила  $N = (1.2 - 1.8) \times 10^{16}$  см<sup>-3</sup>. Уведення домішки селену або кадмію здійснювалося в зразки товщиною ~2 мм при температурі 900°С протягом 4-8 годин з подальшим загартуванням. Також проводився контрольний відпал зразків без уведення домішок. Він відбувався у вакуумі та при надмірному тиску парів миш'яку в тих же умовах, що і при дифузії селену та кадмію. Вивчення та моделювання механізмів формування спектрів фотолюмінесценції, селективного збудження люмінесценції та фотогасіння випромінювання через центри EL2 проводилося за стандартними методиками.

Зроблений аналіз отриманих даних з позиції моделювання структури центрів EL2. Встановлено, що в кристалах з дефіцитом галію поблизу антиструктурних дефектів As<sub>Ga</sub> (атоми миш'яку на позиції галію) знаходяться вакансії Ga. У той самий час збільшення концентрації вакансій миш'яку визначає саме їх локалізацію поблизу антиструктурних дефектів As<sub>Ga</sub>. Отже найбільш вірогідним вирішенням питання стосовно складу центру EL2 є те, що ймовірність утворення комплексів певного складу визначається концентрацією тих чи інших точкових дефектів в кристалі. Зміна концентрації точкових дефектів обумовлює зміну структури комплексу AsGa-точковий дефект на користь домінуючого дефекту або відсутність точкового дефекту поблизу As<sub>Ga</sub>.

Ключові слова: арсенід галію, моделювання, антиструктурний дефект, точковий дефект, домішки, дифузія, фізичні властивості.

#### M. B. LITVINOVA, O. D. SHTANKO

Educational-Scientific Institute of Admiral Makarov National University of Shipbuilding

# SIMULATION OF THE EL2 CENTER PHYSICAL PROPERTIES IN GALLIUM ARSENIDE ACCORDING TO THE RESULTS OF THE IMPURITIES HIGH-TEMPERATURE DIFFUSION

The nature of the annealing and diffusion effects of impurities of cadmium and selenium atoms on the change of the radiation induced by EL2 centers quantum efficiency in gallium arsenide single crystals was studied. A comparative technique of high-temperature diffusion of impurities in vacuum and arsenic atmosphere was used. According to the obtained results, modeling of structural, radiative and other physical properties of EL2 centers in single crystals of gallium arsenide was carried out. It was established that the nature and degree of change in the quantum efficiency of radiation through these centers is determined by the vacancy composition of the crystals and is determined by the probability of the formation of EL2-impurity complexes.

Crystals of semiinsulating unalloyed n-type GaAs conductivity grown by the Czochralsky method with (100) orientation and resistivity  $p=7 \times 10^7 - 2 \times 10^8$  Om×cm were used for the research. The concentration of EL2 centers, which are deep donors, in them was  $N=(1.2-1.8)\times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>. The impurity of selenium or cadmium was introduced into samples with a thickness of ~2 mm at a temperature of 900°C for 4-8 hours followed by quenching. A control annealing of samples without inclusion of impurities was also carried out. It took place in a vacuum and under excessive pressure of arsenic vapors under the same conditions as during the diffusion of selenium and cadmium. The study and modeling of the mechanisms of formation of photoluminescence spectra, selective excitation of luminescence and photoquenching of radiation through EL2 centers was carried out according to standard methods.

An analysis of the obtained data was made from the point of view of modeling the structure of EL2 centers. It has been established that Ga vacancies are found in gallium-deficient crystals near  $As_{Ga}$  antistructural defects (arsenic

atoms at gallium positions). At the same time, an increase in the concentration of arsenic vacancies determines precisely their localization near  $As_{Ga}$  antistructural defects. Therefore, the most likely solution to the question regarding the composition of the EL2 center is that the probability of formation of complexes of a certain composition is determined by the concentration of certain point defects in the crystal. A change in the concentration of point defects causes a change in the structure of the AsGa-point defect complex in favor of the dominant defect or the absence of a point defect near  $As_{Ga}$ Key words: gallium arsenide, modeling, antistructural defect, point defect, impurities, diffusion, physical properties.

#### Постановка проблеми

Нелегований арсенід галію є одним із напівпровідникових сполучень, що широко використовуються для створення елементів високочастотної інтегральної мікроелектроніки і детекторів іонізуючого випромінювання. Антиструктурні дефекти EL2 відіграють основну роль у визначенні напівізолюючих властивостей монокристалів нелегованого арсеніду галію. Дані про структурні та рекомбінаційні характеристики цих центрів сприяють отриманню якісних кристалів із заданими властивостями.

### Аналіз останніх досліджень і публікацій

Незважаючи на тривале вивчення центру EL2, відкритого ще 1963 р. та ідентифікованого як глибокий донор у 1976 р., досі не існує єдиної думки про його структуру [1-6]. Починаючи з 1982 основою різних моделей цього центру є антиструктурний дефект – миш'як на позиції галію  $As_{Ga}$  [7-8]. Однак до теперішнього часу одні автори вважають, що EL2 – це ізольовані дефекти  $As_{Ga}$  [1,2], інші вважають їх комплексами  $As_{Ga}$  з міжвузловими атомами миш'яку  $As_i$  ( $As_{Ga}$ - $As_i$ ) [3], або з вакансіями галію  $V_{Ga}$  ( $As_{Ga}$ - $V_{Ga}$ ) [4] або з подвійним вакансійним складом ( $As_{Ga}$ - $V_{As}V_{Ga}$ ) [5]. Існують також дані, що дозволяють говорити про центри EL2 як сім'ю дефектів  $As_{Ga}$ +X [6], які в процесі термообробки можуть змінювати свій склад по елементу X.

Рекомбінаційні процеси за участю центрів EL2 індукують появу в спектрах низькотемпературної (T=77 K) фотолюмінесценції смуги випромінювання з енергією максимуму hv<sub>m</sub>  $\approx 0.65$  eB, яка є суперпозицією смуг з hv<sub>m</sub>  $\approx 0.63$  i hv<sub>m</sub>  $\approx 0.68$  eB (рис. 1 (a)) [1]. Перша з них викликана випромінювальним захопленням вільних електронів е зарядженими дефектами EL2<sup>+</sup> (перехід е $\rightarrow$ EL2<sup>+</sup>), друга – вільних дірок h нейтральними дефектами EL2<sup>0</sup> (перехід h $\rightarrow$ EL2<sup>0</sup>) (вставка на рис. 1(a)). На ефективність рекомбінації через центри, що розглядаються, впливають ряд факторів. Насамперед, це процеси самодифузії в GaAs. Дифузія від поверхні кристалів вакансій миш'яку під час високотемпературної термообробки (TO) матеріалу в умовах вакууму викликає зменшення концентрації центрів EL2 (N<sub>FL2</sub>) внаслідок реакції

$$AsGa+VAs \Leftrightarrow VGa+AsAs, \tag{1}$$

та зниження інтенсивності випромінювання з hv<sub>m</sub>=0.65 eB (I0.65). Навпаки, формування нових центрів EL2 при TO за умов надлишкового тиску парів As ( $\rho_{As}$ >9.8·10<sup>4</sup> Па) веде до збільшення I<sub>0.65</sub>[2].

Також відомо, що зниження інтенсивності випромінювання з hv<sub>m</sub>≈0.65 eB має місце під час уведення до кристалів GaAs атомів міді, що зумовлено пасивацією дефектів EL2 у результаті формування комплексів EL2-Cu [3]. Однак вплив інших донорних і акцепторних домішок на ефективність рекомбінації через центри, що розглядаються, є маловідомим.

### Мета роботи

Метою роботи є за результатами порівняльної дифузії домішок селену і кадмію в умовах вакууму та атмосфери миш'яку в монокристали арсеніду галію провести моделювання фізичних властивостей центрів EL2.

### Викладення основного матеріалу дослідження

Нами були використані кристали напівізолюючого нелегованого (НІН) GaAs n-типу провідності, що вирощені методом Чохральського з орієнтацією (100) і питомим опором ρ=7×107-2×108

Ом×см. Концентрація центрів EL2 була знайдена методом оптичного поглинання квантів світла з енергією hv=1.04 eB [7] і становила N=(1.2-1.8)×10<sup>16</sup> см<sup>-3</sup>. Вихідна різниця інтенсивностей смуг ФЛ з hv<sub>m</sub>≈0.63 і hv<sub>m</sub>≈0.68 eB при 77 К не перевищувала 6%. Оскільки в спектральній ділянці, що вивчається, також можуть бути смуги, що індукуються атомами кисню [4, 5] (hv<sub>m</sub>≈0.63 eB), нами також було проведено дослідження спектрів селективного збудження ФЛ. Результати фотогасіння випромінювальної рекомбінації через дефекти EL2 до і після введення домішки в зразки дозволили пов'язати всі виявлені в цій роботі ефекти з центрами EL2.

Уведення домішки (селену або кадмію) здійснювалося в зразки товщиною ~2 мм при температурі 900° С протягом 4-8 годин з подальшим загартуванням. Надходження домішки відбувалося з термічно напиленого шару Cd (Se) товщиною 1 мкм, що забезпечило умови дифузії з постійного джерела. Поверхневий шар Ga2Se3, що утворився після дифузії Se, видаляли в кислотному травнику.

Дифузія домішок проводилася у вакуумі та при надмірному тиску парів миш'яку. При термообробці зразки поміщалися в кварцові ампули з робочим об'ємом ~4 см<sup>-3</sup>, які були попередньо знежирені і протруєні в царській горілці, що знижувало неконтрольоване забруднення кристалів міддю. Ампули відкачувалися до тиску <10<sup>-3</sup> Па. Для створення надлишкового тиску парів As у них містилася добавка миш'яку масою 20 мг. Оскільки значення коефіцієнта дифузії для домішок при температурі 900°С ( $D_{cd} \cong 3 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>,  $D_{se} \cong 7 \cdot 10^{17}$  см<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup> [6]) є істотно нижчим, ніж для вакансій миш'яку ( $D_{VAs} \cong 1 \cdot 10^{-15}$  см<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>), дифузія у вакуумі забезпечувала надходження домішки в кристали з дефіцитом миш'яку, а при надмірному тиску парів As – в кристали з його надлишком.

Також проводився контрольний відпал зразків без напилення домішки. Він відбувався у вакуумі та при надмірному тиску парів миш'яку в тих же умовах, що і при дифузії селену та кадмію. Концентрацію носіїв заряду з n > 10<sup>16</sup> см<sup>-3</sup> визначали за півшириною крайової смуги ФЛ при 300 К [1].

Вивчення спектрів ФЛ та селективного збудження люмінесценції (СЗЛ) проводилося за стандартними методиками [8]. Джерелом збудження ФЛ був гелій-неоновий лазер із довжиною хвилі випромінювання 0.63 мкм. Для отримання спектрів СЗЛ використовувалася лампа КГМ потужністю 60 Вт. Селективне виділення смуг збудження напівшириною w<sub>ex</sub>≤0.8 меВ потужністю 4-6 мВт в області hv<sub>ex</sub>=1.0-1.52 еВ здійснювалося монохроматором МДР-2. Інтенсивність випромінювання (I<sub>m</sub>) при 77 К в області значень hv<sub>m</sub>>1 еВ реєструвалася за допомогою ФЕУ-68, а при hv<sub>m</sub>< 1 еВ – за допомогою германієвого фотодіода ФД-9Г, що охолоджувався. Далі відбувався автоматичний перерахунок значень відносної інтенсивності випромінювання I<sub>arb</sub>=I<sub>m</sub>/I<sub>ex</sub> (I<sub>ex</sub> – відповідна інтенсивність збудження ФЛ).

При вивченні фотогасіння випромінювання через центри EL2 зразок спочатку нагрівався до T=(155±5) К і витримувався при такій температурі 10-11 хв. Потім він різко охолоджувався до T=77 К. Вимірювання інтенсивності  $I_m$  відбувалося після повної стабілізації її величини. Процедура повторювалася перед визначенням кожного нового значення  $I_m(hv_{ex})$ , крок вимірювань складав  $\Delta hv_{ex} = 2$  меВ.

#### Модель випромінювання через центри EL2

а. НІН GaAs (*n-mun провідності*). При власному збудженні ФЛ у стаціонарному випадку інтенсивності смуг люмінесценції, що обумовлені дефектами  $EL2^+$  ( $I_{0.63}$ ) і  $EL2^0$  ( $I_{0.68}$ ) (рис. 1(а)) є однаковими [1, 3]:

$$I_{0.68} = I_{0.63}.$$
 (2)

Тоді у високоомному нелегованому матеріалі:

$$\mathbf{I}_{0.68} = \mathbf{c}_{\mathbf{p}}^{\circ} \cdot \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{\circ}} \cdot \delta \mathbf{p},\tag{3}$$

$$I_{0.63} = cn^{+} \cdot N_{EL2^{+}} \cdot \delta n = cn^{+} \cdot (N_{EL2} - N_{EL2^{0}})\delta n,$$
(4)



де бп и бр – нерівноважні концентрації електронів і дірок (бп,бр>>n<sub>o</sub>, p<sub>o</sub>; n<sub>o</sub>, p<sub>o</sub> – їх рівноважні концентрації); сп<sup>+</sup> и с<sub>p</sub><sup>o</sup> – коефіцієнти випромінювального захвату електронів дефектами EL2<sup>+</sup> и дірок дефектами EL2<sup>0</sup>, відповідно; N<sub>EL2</sub><sup>+</sup> и N<sub>EL2</sub><sup>o</sup> – концентрації цих дефектів; N<sub>EL2</sub> – їх сумарна концентрація. З виразів (2), (3) і (4) випливає, що

$$\mathbf{c}_{\mathbf{p}}^{o} \cdot \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{o}} \cdot \delta \mathbf{p} = \mathbf{cn}^{+} \cdot (\mathbf{N}_{\mathrm{EL2}} - \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{o}}) \cdot \delta \mathbf{n},$$
(5)

$$N_{EL2^{o}} = (cn + \delta N_{EL2} \cdot \delta n) / (c_{p}^{o} \cdot \delta p + cn^{+} \cdot \delta n).$$
(6)

Оскільки с  $_{\rm p}^{\rm o} {<\!\!<\!\!} {\rm cn}^{\scriptscriptstyle +}$ , то  ${\rm N}_{\rm EL2^{\rm o}} {\cong} {\rm N}_{\rm EL2}$ і, як наслідок,

$$_{0.65} = \mathbf{c}_{\mathbf{p}}^{o} \cdot \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}} \cdot \delta \mathbf{p}.$$

$$\tag{7}$$

б. GaAs(Cd). В низькоомному матеріалі з р-типом провідності (p<sub>o</sub>>>δn,δp) в рівновазі всі центри заповнені дірками і рівноважна концентрація  $N_{EL2^0}=0$ , а нерівноважна –  $\delta N_{EL2^0} << N_{EL2}$ . Тому в умовах лінійної рекомбінації носіїв заряду інтенсивність випромінювання через центри EL2 складає:

$$I_{0.65} = c_n^{+} \cdot (N_{EL2} - \delta N_{EL2^0}) \delta n \approx c_n^{+} \cdot N_{EL2} \cdot \delta n.$$
(8)

в. *GaAs(Se)*. В низькоомному матеріалі n-типу провідності ( $n_o >> \delta n, \delta p$ ) всі центри заповнені електронами, рівноважна концентрація  $N_{EL2^+}=0$  і  $N_{EL2^0}=N_{EL2^-}$ . Тоді із (2) випливає, що

$$\mathbf{c}_{n}^{+} \cdot \delta \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{+}} \cdot \delta \mathbf{n} = \mathbf{c}_{p}^{\circ} \cdot (\mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{0}} + \delta \mathbf{N}_{\mathrm{EL2}^{0}}) \cdot \delta \mathbf{p}.$$
(9)

Оскільки N<sub>FL20</sub>>>N<sub>FL20</sub>о, то в умовах лінійної рекомбінації носіїв заряду:

$$\mathbf{I}_{0.65} = \mathbf{c}_{p}^{o} \cdot \mathbf{N}_{\text{EL2}} \cdot \delta \mathbf{p}.$$
 (10)

### Результати порівняльної дифузії домішок

Дифузія кадмію. Після дифузії атомів кадмію поверхня кристалів характеризувалася р-типом провідності. Легування в умовах вакууму викликало зниження 10.65 тією ж мірою, що й без домішки (рис.1(b), кр.2, 4). При надмірному тиску пари As дифузія Cd призводила до зменшення інтенсивності випромінювання через центри EL2, а відпал контрольних зразків без домішки – до його збільшення. Значення 10.65 на поверхні легованих кристалів були на 2-3 порядки нижче значень, що характерні для відпалу без домішки (рис. 1(b), кр.3, 5).







Рис. 3 Спектр СЗЛ при Т=77 К: а) – полоси з hv<sub>m</sub> =0.68 eB; b) – полоси з hv<sub>m</sub> =0.63 eB. 1- у вихідному кристалі; 2 – після дифузії кадмію в атмосфері As; 3 – після дифузії селену в атмосфері As

Залежність I0.65 від концентрації домішки показала (рис. 2, кр.4), що відбувається зниження  $I_{0.65}(N_{Cd})$  зі збільшенням вмісту атомів кадмію в кристалі. Оскільки на поверхні легованих кристалів спостерігається лінійна рекомбінація носіїв заряду, а час їхнього життя ( $\tau_n = (2-3) \cdot 10^{-10}$ с) мало змінювався порівняно з НІН GaAs (це свідчить про відсутність нових, більш ефективних каналів випромінювальної та безвипромінювальної рекомбінації), то із співвідношень (10) і (11) випливає, що  $I_{0.65} \sim N_{EL2}$ . Тому зниження  $I_{0.65}$  після ТО в атмосфері As, як і при легуванні Cu [1], викликане зниженням концентрації ізольованих центрів EL2 внаслідок утворення комплексів EL2-Cd.

Дійсно, оскільки атоми Cd у GaAs займають вакансії Ga, то до складу комплексів вони можуть входити як EL2-Cd<sub>Ga</sub>. Як зазначалося, значення коефіцієнта дифузії для Cd істотно нижче, ніж для вакансій миш'яку. Тому можна вважати, що кадмій дифундує в область кристала де при надмірному тиску парів As знижується [V<sub>As</sub>] і, відповідно до виразу [2]:

$$[\mathbf{V}_{As}] \cdot [\mathbf{V}_{Ga}] = \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{As^{1/2}} \tag{11}$$

 $([V_{As}] i [V_{Ga}] - концентрації вакансій As i Ga), зростає <math>[V_{Ga}]$  (дефіцит галію) [6]. Збільшення числа  $V_{Ga}$  поблизу антиструктурних дефектів  $As_{Ga}$  сприяє утворенню комплексів EL2-Cd<sub>Ga</sub>. У той же час дифузія у вакуумі відбувається в поверхневу область кристала з високою  $[V_{As}]$  і, відповідно, низькою  $[V_{Ga}]$ . Це визначає малу ймовірність формування комплексів  $As_{Ga}$ -Cd<sub>Ga</sub> і введення Cd не впливає на  $I_{0.65}$ .

Дифузія селену. Після введення атомів селену поверхня кристалів характеризувалася n-типом провідності. Дифузія в умовах вакууму призводила до зниження I<sub>0.65</sub> більшою мірою, ніж відпал зразків без домішки (рис. 1(с), кр.2, 4). У той самий час дифузія Se у атмосфері As викликала збільшення I<sub>0.65</sub>, щодо значень бездомішкового відпалу (рис. 1(с), кр.3, 5). Обидва ефекти посилювалися зі зростанням концентрації домішки (NSe) (рис. 2, кр.5, 6).

В умовах лінійної рекомбінації носіїв заряду, коли час життя  $\tau_n$  в області легування Se відповідав значенням у HIH GaAs, з (8) і (11) випливає, що  $I_{0.65} \sim N_{EL2}$  і зміна I0.65 визначається зміною  $N_{EL2}$ .

Збільшення інтенсивності випромінювання через центри EL2 після дифузії Se в атмосфері миш'яку, найімовірніше, викликано частковим витісненням атомів As домішкою, що вбудовується в підгратку миш'яку [6]. При цьому витіснені атоми можуть займати вакансії галію, утворюючи антиструктурні дефекти (як зазначалося, [V<sub>Ga</sub>] збільшується біля поверхні кристалів при TO в атмосфері As). Зменшення I<sub>0.65</sub> внаслідок дифузії селену при ТО у вакуумі можна, як у випадку з кадмієм та міддю, пов'язати зі зниженням ефективності випромінювання через дефекти EL2 у результаті утворення комплексів EL2-Se. Справді, селен дифундує вузлами підгратки As [7] і може утворювати комплекси EL2-Se<sub>As</sub>. При ТО у вакуумі, в результаті вильоту миш'яку, домішка потрапляє в область кристала з високою [V<sub>As</sub>] (дефіцитом As) і комплексоутворення обумовлено тим, що вакансії As присутні поблизу антиструктурних дефектів As<sub>Ga</sub>. Останнє можливе, якщо ймовірність рекомбінації між As<sub>Ga</sub> i V<sub>As</sub> (вираз (1)) менше одиниці, тобто існує потенційний бар'єр для такої рекомбінації.

Фотогасіння випромінювання через центри EL2. Певний внесок у випромінювання з hv<sub>m</sub>≈0.63 eB, поруч із дефектами EL2, можуть вносити атоми кисню. Для з'ясування ступеня впливу цієї домішки (або будь-яких інших дефектів, що зумовлюють випромінювання з hv<sub>m</sub>≈0.63–0.68 eB [8]) на отримані в цій роботі результати було досліджено спектри селективного збудження смуг люмінесценції (C3Л) з hv<sub>m</sub>=0.63 (I<sub>arb.0.63</sub>) і hv<sub>m</sub>=0.68 eB (I<sub>arb.0.68</sub>) у кількох контрольних кристалах GaAs до і після введення домішки в них. На спектрі C3Л HIH GaAs при T=77 K (рис. 3 a, b, кр. 1) видно, що у області hv<sub>ex</sub>≈1.102-1.458 eB має місце практично повне гасіння I<sub>arb.0.68</sub> і неповне гасіння I<sub>arb.0.63</sub>. Після введення атомів Se або Cd з максимальною для цієї роботи концентрацією NSe (NCd) величини I<sub>arb.0.68</sub> та I<sub>arb.0.63</sub> (криві 2, 3 на рис. 3) в області фотогасіння не відрізнялися від відповідних значень у вихідних кристалах.

Відомо, що ефект гасіння випромінювання з hv<sub>m</sub>=0.63 і hv<sub>m</sub>=0.68 еВ при hv<sub>ex</sub>≈1.1-1.45 еВ визначається переходом дефектів EL2 до оптично неактивного метастабільного стану [1]. Залишкове (після фотогасіння) випромінювання з hv<sub>m</sub>=0.63 еВ, найімовірніше, визначається атомами кисню [5] (ефект фотогасіння киснево-обумовленої смуги hv<sub>m</sub>=0.63 еВ дуже малий порівняно з такою ж смугою дефекту EL2). Існування фотогасіння і той факт, що введення як кадмію, так і селену не змінює величини залишкової інтенсивності I<sub>arb.0.63</sub> і I<sub>arb.0.68</sub>. Це свідчить про те, що зміни I<sub>0.65</sub> в домішковій дифузійній зоні обумовлені дефектами EL2.

#### Висновки

За результатами моделювання фізичних властивостей центрів EL2 на основі порівняльної методики дифузії домішок в умовах вакууму та атмосфери миш'яку в монокристали арсеніду галію встановлено наступне.

 Мідь є не єдиною домішкою, що викликає зміну квантової ефективності випромінювання через дефекти EL2 в кристалах GaAs. Введення акцепторної домішки кадмію призводить до її зниження в кристалах з дефіцитом галію і не змінює її величини в кристалах з дефіцитом миш'яку. Ефект викликаний зниженням концентрації ізольованих центрів EL2 внаслідок утворення комплексів EL2-Cd<sub>Ga</sub>.
 Уведення донорної домішки селену збільшує квантовий вихід випромінювання через

2. Уведення донорної домішки селену збільшує квантовий вихід випромінювання через дефекти EL2 у кристалах з дефіцитом галію і знижує його в кристалах з дефіцитом миш'яку. Перший ефект, найімовірніше, обумовлений збільшенням концентрації центрів EL2 в результаті витіснення домішкою атомів As з підгратки миш'яку; другий – утворенням комплексів EL2-Se<sub>As</sub>.

3. Можливим вирішенням питання про склад комплексів AsGa-точковий дефект є наступним: зміна концентрації ТД (вакансій та міжвузельних атомів) у кристалі зумовлює відповідну зміну в структурі комплексів на користь домінуючого дефекту або відсутність ТД поблизу As<sub>ca</sub>.

#### Список використаної літератури

- Kovalenko V. F., Shutov S. V., Baganov Ye. A., Smyikalo M. M. Near band-edge luminescence of semi-insulating undoped gallium arsenide at high levels of excitation *Journal of Luminescence*. 2009. Vol. 129, Iss. 9. P. 1029-1031. DOI: 10.1016/j.jlumin.2009.04.017
- Zhukov N., Kabanov V., Mihaylov A., Mosiyash D. et al. Peculiarities of the Properties of III–V Semiconductors in a Multigrain Structure. *Semiconductors*. 2018. Vol. 52, Iss. 1. P. 78-83. DOI: 10.1134/S1063782618010256.
- Gabibov F. S., Zobov E. M., Zobov M. E. The Effect of Ultrasonic Treatment on the Energy Spectrum of Electron Traps in n-GaAs Single Crystals. *Technical Physics Letters*. 2015. Vol. 41, Iss. 4. P. 362-365. DOI:10.1134/S1063785015040239

- 4. Shtan'ko A. D., Litvinova M. B., Kurak V. V. Decrease of exciton radiation intensity in compensated gallium arsenide single crystals under influence of low electric field. *Functional Materials*. 2010. Vol. 17, N 1. P. 46–51.
- 5. Shishkin M. I., Zhukov N. D., Kryl'skiy D. V. On the Synthesis and Photoluminescence and Cathodoluminescence Properties of CdSe, CdTe, PbS, InSb, and GaAs Colloidal Quantum Dots. *Semiconductors*. 2019. Vol. 53, Iss. 8. P. 1082-1087.
- 6. Badea A., Dragan F., Fara L., Sterian P. Quantum mechanical effects analysis of nanostructured solar cell models. *Renew Energy and Environmental Sustainability*. 2016. Vol. 1 (3). P. 1–5. DOI:10.1051/rees/2016003
- Litvinova M. B., Hertcova N. Y., Seliverstova S. R. The optical measurement technique of the definition of the GaAs structure deflection degree from stexiometry. *Proceedings of CAOL'2003*. *Ist International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers*. 16-20 Sept., 2003, Alushta, Crimea, Ukraine. Vol. 2. P. 278.
- 8. Litvinova M. B., Shtan'ko A. D. Influence of structural defects on the mechanical stress in the impurity diffusion zone of GaAs single crystals. *Inorganic Materials*. 2005. Vol. 41, N 4. P. 903-906.

## References

- 1. Kovalenko, V. F., Shutov, S. V., Baganov, Ye. A., & Smyikalo, M. M. (2009). Near band-edge luminescence of semi-insulating undoped gallium arsenide at high levels of excitation. *Journal of Luminescence*. **129** (9), 1029-1031. DOI: 10.1016/j.jlumin.2009.04.017
- 2. Zhukov, N., Kabanov, V., Mihaylov, A., Mosiyash D., & et al. (2018). Peculiarities of the Properties of III–V Semiconductors in a Multigrain Structure. *Semiconductors*. **52** (1), 78-83. DOI:10.1134/S1063782618010256
- Gabibov, F. S., Zobov, E. M., & Zobov, M. E. (2015). The Effect of Ultrasonic Treatment on the Energy Spectrum of Electron Traps in n-GaAs Single Crystals. *Technical Physics Letters*. 41 (4), 362-365. DOI:10.1134/S1063785015040239
- 4. Shtan'ko, A. D., Litvinova, M. B., & Kurak, V. V. (2010). Decrease of exciton radiation intensity in compensated gallium arsenide single crystals under influence of low electric field. *Functional Materials*. **17** (1), 46-51.
- 5. Shishkin, M. I., Zhukov, N. D., & Kryl'skiy, D. V. (2019). On the Synthesis and Photoluminescence and Cathodoluminescence Properties of CdSe, CdTe, PbS, InSb, and GaAs Colloidal Quantum Dots. *Semiconductors*. **53** (8), 1082-1087.
- 6. Badea, A., Dragan, F., Fara, L., & Sterian, P. (2016). Quantum mechanical effects analysis of nanostructured solar cell models. *Renew Energy and Environmental Sustainability*. **1** (3), 1–5. DOI:10.1051/rees/2016003.
- 7. Litvinova, M.B., Hertcova, N. Y., & Seliverstova, S. R. (2003). The optical measurement technique of the definition of the GaAs structure deflection degree from stexiometry *Proceedings* of *CAOL'2003. 1st International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers.* 16-20 Sept., Alushta, Ukraine, **2**, 278.
- 8. Litvinova, M. B., & Shtan'ko, A. D. (2005). Influence of structural defects on the mechanical stress in the impurity diffusion zone of GaAs single crystals. *Inorganic Materials*. **41** (4), 903-906.

Літвінова Марина Борисівна – доктор педагогічних наук, кандидат фіз.-мат. наук, професор, професор кафедри інформаційних технологій та фіз.-мат. дисциплін Херсонського навчально-наукового інституту Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова, e-mail: lmb965@gmail.com, ORCID:0000-0002-4917-2132.

Штанько Олександр Дмитрович – кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри інформаційних технологій та фіз.-мат. дисциплін Херсонського навчально-наукового інституту Національного університету кораблебудування імені адмірала Макарова, e-mail: sadmar954@gmail.com, ORCID:0000-0003-3572-7915.