

## Acerca de la difusión del In en el PbSnTe

D.A.Yaskov, V.A.Moshnikov. Instituto Electrotécnico de Leningrado V.I.Uliánov (Lenin), Cátedra de Dieléctricos y Semiconductores (URSS)

S.M. López-Silva. UCT- LIEES, Facultad de Física, Universidad de La Habana

### RESUMEN

Se analiza la dependencia con la temperatura del coeficiente de difusión del indio en la solución sólida  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ . Se presentan resultados experimentales para diferentes concentraciones iniciales de defectos eléctricamente activos del tipo p ( $3,5 \cdot 10^{17}$  y  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ). Se consideran los mecanismos de difusión del In en el  $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}$ , estableciéndose que las dependencias obtenidas deben ser referidas a la difusión de átomos de indio por intersticios.

### ABSTRACT

The temperature dependence of the diffusion coefficient of indium in the  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$  solid solution is analyzed. Experimental results for different initial concentrations ( $3,5 \cdot 10^{17}$  and  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ) of electrically active p-type intrinsic defects are presented. Diffusion mechanisms of In in  $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}$  are considered, thus obtaining the reference of the reported results to interstitial diffusion of indium atoms.

## INTRODUCCIÓN

Las soluciones sólidas de  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  son de interés como materiales перспекivos para los dispositivos optoelectrónicos que trabajen en el infrarrojo lejano [1,2]. Una de las propiedades que diferencian a estos materiales es el efecto de inversión de las bandas energéticas [3] que se manifiesta en la reducción de la diferencia energética entre las bandas de conductividad y valencia. Otra particularidad de la naturaleza físico-química de estos materiales es la gran dependencia de las propiedades electrofísicas de la relación entre la concentración de átomos en la subred del metal y la del no metal, es decir que las soluciones sólidas  $PbTe - SnTe$  son genuinos representantes de las fases de composición variable [4]. Según los datos [5,6] el tipo de defecto predominante en el  $PbTe$  y sus soluciones sólidas son los defectos de Frenkel en la subred del metal, y la concentración de portadores de carga está condicionada por la carga de las vacancias en dicha subred.

Las propiedades electrofísicas del  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  es posible estabilizarlas al dopar soluciones sólidas con elementos del grupo III, específicamente con el indio In, que sustituye al plomo Pb. Diferentes modelos físicos que explican los efectos de estabilización de las propiedades de estos materiales son analizados en [7-11], sin embargo, algunos resultados experimentales no pueden explicarse con ayuda de dichos modelos y en estos no se tiene en cuenta la influencia de los defectos eléctricamente activos. Es por esto que el estudio de los procesos de difusión del In en el  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  presenta gran interés.

## ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

Investigaciones acerca de la difusión del In en el  $Pb_{1-x}Sn_xTe$  se efectuaron en [12-14]. El perfil de la concentración del In difundido en cristales de  $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$  desde la fase gaseosa, suponiendo el coeficiente de difusión constante con la temperatura, se puede expresar según [12-14] por la relación:

$$C = C_0 \operatorname{erfc} \frac{Z}{2\sqrt{Dt}} \quad (1)$$

donde Z es la coordenada en la dirección de la difusión,

$C_0$  es la concentración de In en la superficie,

D es el coeficiente de difusión,

t es el tiempo de difusión a la temperatura de recocido.

En [13-14] se estudió la dependencia del coeficiente de difusión del indio  $D_{In}$  en el  $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$  con la temperatura para diferentes concentraciones iniciales de defectos eléctricamente activos de tipo p. En la figura 1 se muestran los resultados obtenidos para las concentraciones  $N_A = 3,5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  y  $N_A = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Como se ve en la figura 1, en ambos casos las dependencias del coeficiente de difusión del In  $D_{In}$  con la temperatura se corresponden con la ley de Arrhenius:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{KT}\right) \quad (2)$$

donde  $D_0$  es un parámetro de la difusión que prácticamente no varía en el intervalo de temperatura analizado,  $E_a$  es la energía de activación en el proceso de difusión.

En la figura 1 de la misma manera, se ve que  $D_0$  en gran medida depende de la concentración de portadores de carga en el cristal inicial. Estos resultados experimentales no se encuentran en completa concordancia entre sí. Realmente partiendo de la dependencia del coeficiente de difusión del In con la concentración de defectos eléctricamente activos en el cristal inicial, se desprende que el perfil de la concentración no debe ser expresado a través de (1) con un coeficiente de difusión constante. Esto resulta del hecho de que al difundirse el In debe variar la concentración de vacancias en la subred del metal.

Para hallar explicación a estas cuestiones, en nuestro trabajo se efectuaron estudios del perfil de distribución del In en zonas de baja concentración.

Los experimentos se llevaron a cabo, al igual que en [13-14] con ayuda del microanálisis espectral de rayos X en la microsonda MS-46. El análisis se efectuó por la intensidad de la emisión de rayos X característica InL $\alpha$  con la utilización del cristal analizador PET. En calidad de patrón se utilizó una muestra de InSb.

Para el tratamiento estadístico de los resultados experimentales se realizaron mediciones en puntos que se encontraban en la dirección de la difusión, con un tiempo de conteo no menor de 100 seg. El valor óptimo del coeficiente de difusión del indio  $D_{In}$  se determinó por el método de los mínimos cuadrados con la utilización de la relación (1). Los cálculos se efectuaron en la microcomputadora D3 - 28.

Como resultado de los experimentos efectuados se determinó que el perfil de concentración del indio coincide satisfactoriamente con (1) para las muestras tipo p con una concentración inicial menor que  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Para las muestras con concentraciones de aceptores mayores que  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  en la región de bajos valores de concentración de impurezas, la curva calculada a través de (1) no describe adecuadamente los resultados experimentales. Además, en este caso no es posible hacer coincidir estos resultados experimentales y los obtenidos del cálculo con suficiente exactitud, aunque se utilice la suma de dos funciones erfc.

Del análisis realizado se desprende que la difusión del In en los cristales de  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$  tiene un carácter complicado. Los átomos de indio se difunden tanto por los nodos como por los intersticios. Como la sensibilidad analítica del microanálisis espectral de rayos X se halla en el nivel

$(0,6 - 1,0) \cdot 10^{19}$  at.In/cm<sup>3</sup>, la desviación de la distribución de la concentración se observa sólo en los cristales con una concentración de vacancias en la subred del metal suficientemente grande (más de  $10^{19}$  cm<sup>-3</sup>). En este caso la difusión por vacancias, como se debía esperar, no se corresponde con la función erfc.

De los resultados de los experimentos llevados a cabo, se deduce que la mayor parte de los átomos de indio se difunde por intersticios. Como la concentración máxima de átomos de indio que se obtuvo en los experimentos fue aproximadamente de  $10^{20}$  cm<sup>-3</sup> y la concentración de intersticios es mayor que  $10^{22}$  cm<sup>-3</sup>, la variación de la concentración de átomos en intersticios no ejerce una influencia sustancial en los parámetros del proceso de difusión. Por eso, las dependencias del coeficiente de difusión del indio con la temperatura mostradas en la figura 1 deben ser referidas a la difusión de átomos de indio por intersticios. De esta manera se explica la buena correspondencia que se observa en [13,14] al expresar el perfil de concentración del In con la relación del tipo (1) con un coeficiente de difusión constante.

#### AGRADECIMIENTO

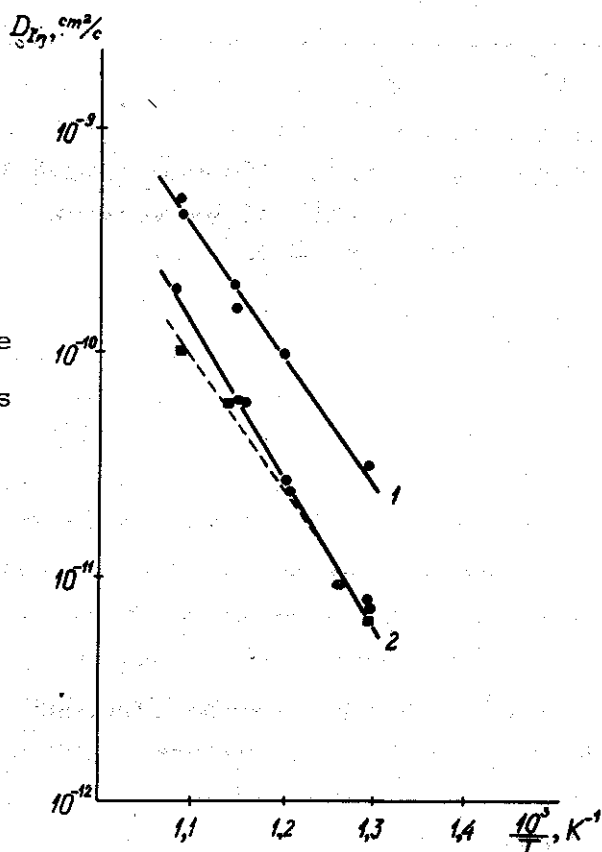
Deseo expresar mi agradecimiento al C.Dr. Juan Fuentes Betancourt y Lic. Octavio Calzadilla por la ayuda prestada durante la traducción, redacción y discusión del presente trabajo y por sus constructivas críticas y sugerencias.

Figura 1.

Dependencia del coeficiente de difusión del indio  $D_{In}$  en el  $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$  con la temperatura para diferentes concentraciones iniciales de defectos eléctricamente activos tipo p:

1.  $N_A = 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>,
2.  $N_A = 3,5 \cdot 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>

■, --- [13]  
 • [14]



## BIBLIOGRAFÍA

---

1. Melngailis I.; T.C.Harman  
Semiconductors and Semimetals, v.5, Eds. R.K.Willardson, A.C.Beer,  
N.Y. - London, Acad. Press, p. 111 - 164.
2. Abrikosov, N.J.; L.E.Shelimova  
Poluprovodnikovie materiali na osnove soediñenií A<sup>IV</sup>B<sup>VI</sup>,  
Moskva, Nauka, 1975.
3. Dimmock, I.O.; I.Melngailis; A.J.Strauss  
Phys. Rev. Letters, 1966, v. 16, No.2, p. 1193 - 1196.
4. Kröger, F.A.  
The Chemistry of Imperfect Crystals, Amsterdam, 1964.
5. Zlomanov, V.P.; A.M.Gas'kov  
Rost poluprovodnikovix kristalov i plenok, v.2, Novosibirsk, Nauka,  
Sibirskoe otdeleniie, 1985, p. 116-133.
6. Fujimoto, M.; V.Sato  
Jap. J. appl. Phys., 1966, v.5, No.2, p. 128 - 133.
7. Rosenberg, A.J.; F.Wald  
J. Phys. Chem. Solids, 1965, v. 26, No.6, p. 1079-1086.
8. Averkin, A.A.; V.I.Kaidanov; R.P.Melnik  
Fizika i tehnika poluprovodnikov, v.5, 1971, No.1, p.91-95.
9. Drabkin, I.A.; B.Ia.Moizhes  
Rost i leguirovañie kristalov i plenok, v.1, Novosibirsk, Nauka,  
1977.
10. Parada, N.I.; G.W.Pratt  
Phys. Rev. Letters, 1969, v.22, No.4, p. 180 - 183.
11. Volkov, B.A.; O.A.Ponkratov  
Dokladi AN SSSR, v. 255, 1980, No.1, p.93 - 97.
12. Zaitov, F.A.; A.V.Gorshnov; T.M.Shaliapina; E.V.Susov; T.F.Terejovich  
Izv. AN SSSR, Neorganicheskie materiali, 1979, v.15, No.11,  
p. 2077-2078.
13. Bakin, A.C.; T.T.Dedegkaev; D.I.Ivanov; V.A.Moshnikov; D.B.Chesnakova  
Fizika tverdovo tela, 1983, v.25, No.5, p.1515-1516.
14. Bestaev, M.V.; T.T.Dedegkaev; V.A.Moshnikov  
Fizika tverdovo tela, 1985, v.27, No.6, p.1868 - 1870.

Recibido: 18 de enero de 1986.