

УДК 621.315.592:535

Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М.Писклинець  
**Термодинамічний n-p-перехід у кристалах  
телуриду кадмію**

*Фізико-хімічний інститут при Прикарпатському університеті імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна*

На основі квазіхімічного моделювання високотемпературної рівноваги дефектів при відпалі кристалів телуриду кадмію одержано аналітичний вираз для визначення парціального тиску пари кадмію  $P_{Cd}^*$ , що відповідає термодинамічному n-p-переходу. Побудовані фазові діаграми рівноваги, визначені умови формування матеріалу n- і p-типу провідності із заданою концентрацією носіїв струму.

**Ключові слова:** телурид кадмію, дефекти, квазіхімія, константи рівноваги.

*Стаття постуила до редакції: 10.11.2001; прийнята до друку 12.03.2002.*

## I. Вступ

Телурид кадмію характеризується високим квантовим виходом люмінесценції при фото- і катодозбудженні. Однак найбільший квантовий вихід можна одержати тільки в гомо-n-p-переходах. Для цього потрібно мати можливість отримувати матеріал як електронного так і діркового типу провідності. Тому дослідження термодинамічного n-p-перехід у кристалах телуриду кадмію є важливим не тільки з теоретичної точки зору, але і для практики.

В нелегованому телуриді кадмію тип і концентрація вільних носіїв заряду зумовлені власними точковими дефектами кристалічної ґратки: вакансіями металу і халькогену та міжвузловими атомами [1]. Ступінь відхилення від стехіометрії визначається умовами вирощування та обробки матеріалу (температура, тиск, склад пари). Для встановлення залежностей типу провідності і концентрації носіїв струму від технологічних факторів використали метод квазіхімічного моделювання.

## II. Квазіхімічний аналіз

Рівноважний стан власних атомних дефектів кристалів CdTe при їх термічному відпалі у парі кадмію можна описати системою квазіхімічних рівнянь (див. табл.). Тут: індекс V – пара;  $Cd_{Cd}$  – атоми у вузлі;  $Cd_i$ ,  $Te_i$  – міжвузлові атоми;  $V_{Cd}$ ,  $V_{Te}$  – вакансії кадмію і телуру відповідно;  $e^-$  – електрони;  $h^+$  – дірки; -, + – знаки заряду.

У вибраній моделі реакція I описує збудження власної провідності, реакція II – рівновагу “пара кадмію – вакансії телуру”; реакції III і VI – рівновагу “пара кадмію – міжвузлові атоми кадмію і телуру” відповідно; реакція IV-V – рівновагу “пара кадмію – вакансії кадмію”; VII – повне рівняння електронейтральності.

Сумісний розв’язок системи рівнянь I-VI дає можливість визначити концентрацію дефектів через константи рівноваги K, парціальний тиск пари кадмію  $P_{Cd}$  та концентрацію електронів n:

Таблиця

Квазіхімічні реакції утворення власних атомних дефектів у кристалах телуриду кадмію та їх константи рівноваги  $K = K^0 \exp(-\Delta H / kT)$  [1].

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	$K^0$ , ( $\text{см}^{-3}$ , Па)	$\Delta H$ , еВ
I	$0 \Leftrightarrow e^- + h^+$	$K_i = np$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50
II	$\text{Cd}^V \Leftrightarrow \text{Cd}_{\text{Cd}}^0 + \text{V}_{\text{Te}}^{2+} + 2e^-$	$K_8 = [\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] \text{P}_{\text{Cd}}^{-1} n^2$	$3 \cdot 10^{57}$	1,47
III	$\text{Cd}^V \Leftrightarrow \text{Cd}_i^{2+} + 2e^-$	$K_9 = [\text{Cd}_i^{2+}] n^2 \text{P}_{\text{Cd}}^{-1}$	$8 \cdot 10^{60}$	2,09
IV	$\text{Cd}_{\text{Cd}}^0 + 2e^- \Leftrightarrow \text{V}_{\text{Cd}}^{2-} + \text{Cd}^V$	$K_{10} = [\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}] \text{P}_{\text{Cd}} n^{-2}$	$1 \cdot 10^{-15}$	1,14
V	$\text{Cd}_{\text{Cd}}^0 + e^- \Leftrightarrow \text{V}_{\text{Cd}}^- + \text{Cd}^V$	$K_{11} = [\text{V}_{\text{Cd}}^-] \text{P}_{\text{Cd}} n^{-1}$	$8 \cdot 10^6$	2,08
VI	$\text{CdTe} + e^- \Leftrightarrow \text{Te}_i^- + \text{Cd}^V$	$K_{12} = [\text{Te}_i^-] \text{P}_{\text{Cd}} n^{-1}$	395	1,19
VII	$n + [\text{V}_{\text{Cd}}^-] + 2[\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}] + [\text{Te}_i^-] = p + 2[\text{Cd}_i^{2+}] + 2[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}]$			

$$[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] = K_8 \cdot \text{P}_{\text{Cd}} / n^2. \quad (5)$$

$$[\text{V}_{\text{Cd}}^-] = K_{11} \cdot n / \text{P}_{\text{Cd}}; \quad (1)$$

$$[\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}] = K_{10} \cdot n^2 / \text{P}_{\text{Cd}}; \quad (2)$$

$$[\text{Te}_i^-] = K_{12} \cdot n / \text{P}_{\text{Cd}}; \quad (3)$$

$$[\text{Cd}_i^{2+}] = K_9 \cdot \text{P}_{\text{Cd}} / n^2; \quad (4)$$

Маючи вирази для концентрації дефектів (1)-(5) і враховуючи умову повної електронейтральності (табл., VII), можна записати рівняння для визначення концентрації електронів n:

$$2 \cdot K_{10} \cdot n^4 + (K_{11} + K_{12} + \text{P}_{\text{Cd}}) \cdot n^3 - K_i \cdot \text{P}_{\text{Cd}} \cdot n - 2 \cdot \text{P}_{\text{Cd}}^2 \cdot (K_8 + K_9) = 0. \quad (6)$$

Холлівську концентрацію носіїв струму  $n_X$ , що визначають на експерименті, знаходять з умови, що  $n_X = n-p$ . Оскільки  $p = K_i/n$  (табл., I), тоді

$$n_X = n - K_i/n. \quad (7)$$

Маючи на увазі, що термодинамічний

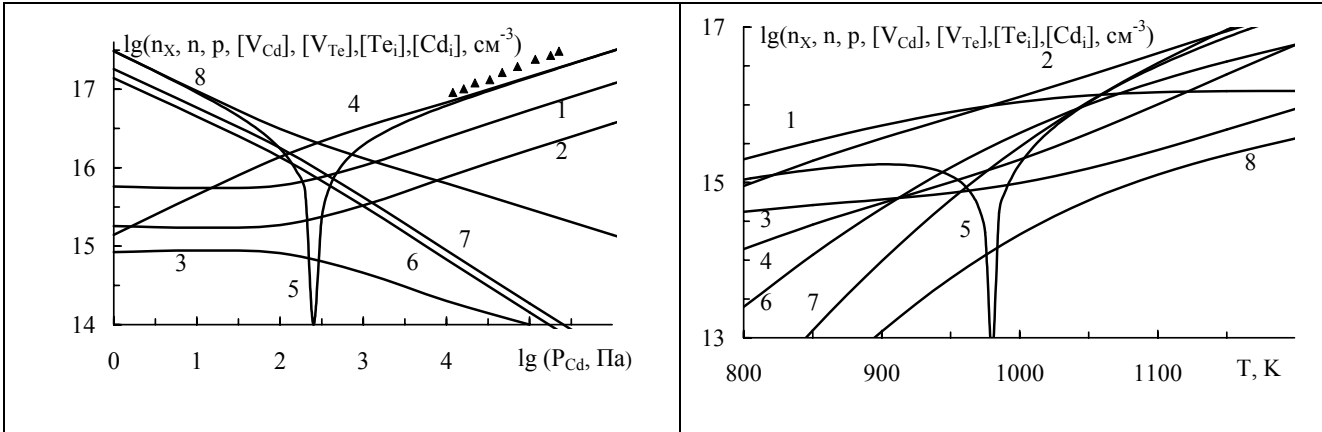
n-p-перехід настає за умови  $n = p$ , з рівняння електронейтральності (табл., VII) одержимо вираз для парціального тиску кадмію  $\text{P}_{\text{Cd}}^*$ , що відповідає термодинамічному n-p переходу:

$$\text{P}_{\text{Cd}}^* = \left( \frac{(K_i)^{3/2} \cdot (K_{11} + K_{12} + 2 \cdot K_{10} \cdot (K_i)^{3/2})}{2 \cdot (K_8 + K_9)} \right)^{1/2}. \quad (6)$$

### III. Обговорення результатів

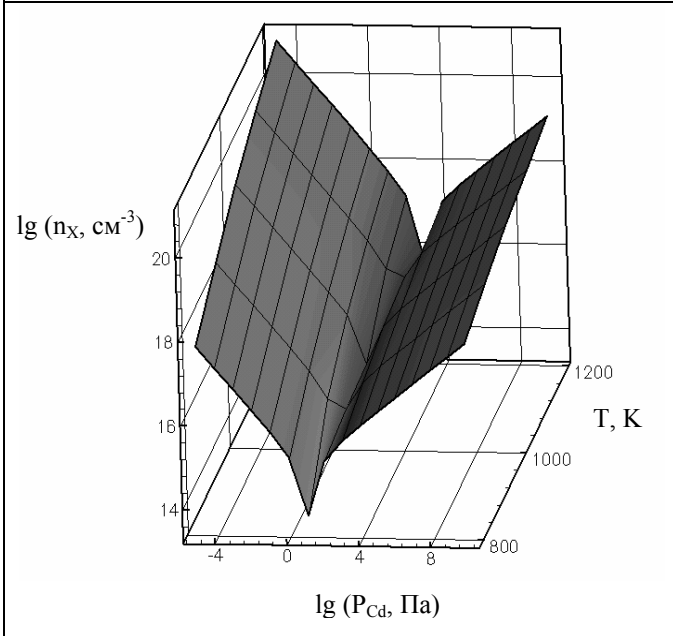
Результати розрахунку, отримані на основі теоретичних моделей і експериментальні дані, наведені на рис. 1-4. Із графіків видно, що при відпалі кристалів CdTe змінюються не тільки концентрація холлівських носіїв струму, але і тип провідності. Результати теоретичного аналізу вказують на те, що збільшення парціального тиску

пари кадмію  $\text{P}_{\text{Cd}}$  (рис. 1), як і зниження температури відпалу T (рис. 2), зумовлюють топологічно ідентичні зміни. При низьких значеннях парціального тиску пари кадмію  $\text{P}_{\text{Cd}}$  одержуємо матеріал p-типу провідності. Із збільшенням  $\text{P}_{\text{Cd}}$  спостерігається зменшення концентрації дірок p, інверсія провідності з p- на n-тип (термодинамічний p-n-перехід) і подальше зростання концент-

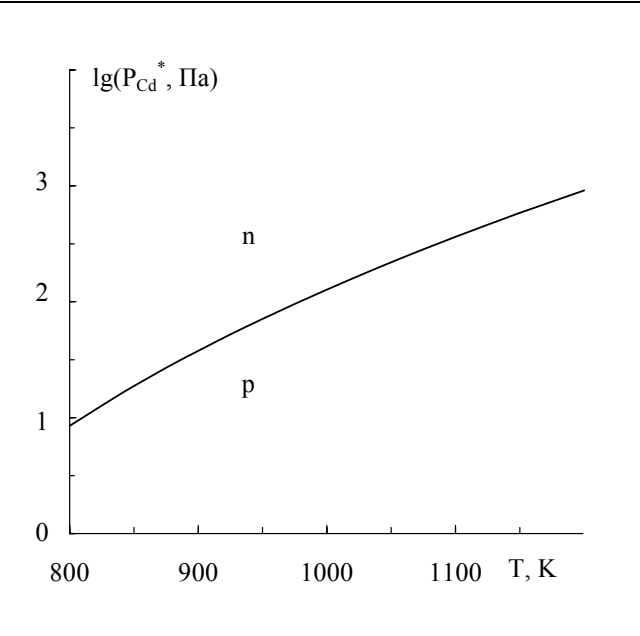


**Рис. 1.** Залежність концентрації носіїв струму і точкових дефектів в CdTe від тиску кадмію  $P_{Cd}$  при температурі відпалу  $T = 1070$  K:  
 1 –  $Cd_i^{2+}$ ; 2 –  $V_{Te}^{2+}$ ; 3 –  $V_{Cd}^{2-}$ ; 4 – n; 5 –  $n_x$ ; 6 –  $Te_i^-$ ; 7 –  $V_{Cd}^-$ ; 8 – p, ▲ – експеримент [2].

**Рис. 2.** Залежність концентрації носіїв струму і точкових дефектів в CdTe від температури відпалу при тиску кадмію  $P_{Cd} = 10^2$  Па  
 1 – n; 2 – p; 3 –  $V_{Te}^{2+}$ ; 4 –  $Cd_i^{2+}$ ; 5 –  $n_x$ ; 6 –  $Te_i^-$ ; 7 –  $V_{Cd}^-$ ; 8 –  $V_{Cd}^{2-}$ .



**Рис. 3.** Розрахункова просторова фазова  $n_x$ - $P_{Cd}$ - $T$ -діаграма рівноваги CdTe.



**Рис. 4.** Залежність тиску пари кадмію термодинамічного р-n переходу  $P_{Cd}^*$  від температури відпалу.

рації електронів n (рис. 1). У випадку температурної залежності холлівської концентрації носіїв струму, при низьких значеннях температури відпалу  $T$  одержуємо матеріал n-типу провідності; із підвищення  $T$  спочатку відбувається спадання концентрації електронів n, аж до моменту настання p-р-переходу, а потім зростання концентрації дірок p (рис. 2).

Зауважимо, що підвищення температури відпалу  $T$  зміщує значення парціального тиску кадмію, що відповідає термодинамі-

чному р-n-переходу в сторону більш високих значень (рис. 3,4). При цьому, змінити тип провідності матеріалу змінюючи лише температуру відпалу  $T$  можна для інтервалу тисків кадмію 10 -1000 Па. При тисках  $P_{Cd} < 10$  Па одержуємо матеріал тільки р-типу, а при  $P_{Cd} > 1000$  Па – тільки n-типу провідності для всього інтервалу температур відпалу  $T$  (800-1200 K).

#### IV. Висновки

На основі квазіхімічного моделювання високотемпературної рівноваги дефектів при відпалі кристалів телуриду кадмію одержано аналітичні вирази для визначення концентрацій носіїв струму і переважаючих атомних дефектів n, p,  $[V_{Cd}^-]$ ,  $[V_{Cd}^{2-}]$ ,  $[Te_i^-]$ ,  $[Cd_i^{2+}]$ ,  $[V_{Te}^{2+}]$ , а також парціального тиску пари кадмію  $P_{Cd}^*$ , що відповідає термодинамічному n-p-переходу.

Розраховані, барична і температурна залежності концентрацій носіїв струму і переважаючих атомних дефектів.

Побудована просторова фазова діаграма рівноваги, що дозволяє знаходити значення технологічних факторів процесу

відпалу кристалів CdTe (температура відпалу T, парціальний тиск пари кадмію  $P_{Cd}$ ) для формування матеріалу n- і p-типу провідності із заданою концентрацією носіїв струму.

*Д.М. Фреїк* – д.х.н., професор, директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики твердого тіла;

*В.В. Прокопів* – к.ф.-м.н, доцент кафедри фізики твердого тіла;

*У.М. Писклинець* – аспірант кафедри фізики твердого тіла.

- [1] П.М. Фочук, О.О. Коров'янюк, О.Е. Панчук. Розрахунок констант впровадження легуючих елементів в CdTe // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(3), сс. 475 – 480 (2001).
- [2] Е.С. Никонюк, О.Э. Панчук, П.И. Фейчук, Н.И. Кучма, Л.П. Щербак. Электрическая активность таллия в CdTe // *Неорганические материалы*, **22**(10), сс. 1646 – 1650 (1986).

D.M. Freik, V.V. Prokopiv, U.M. Pysklynetsj

### Thermodynamic n-p-Junction in Cadmium Telluride Crystals

*Physics-Chemical Institute at the Vasyl Stefanyk Prekarpathian University  
57, Shevchenko St., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, e-mail: [prk@pu.if.ua](mailto:prk@pu.if.ua)*

From quasi-chemical modeling of high temperature equilibrium of defects at an annealing of cadmium telluride crystals the analytical expression for definition of partial pressure a cadmium pair  $P_{Cd}^*$ , to meet the thermodynamic n-p-junction is obtained. Are constructed phase diagram of equilibrium, the conditions of materials formation of n- and p-type conductivity with known carriers concentration are determined.