

Л.Й. Межиловська, А.М. Дмитрів, М.А. Лоп'янюк

## Домішково-дефектна підсистема сфалеритної структури у легуваних хлором кристалах телуриду кадмію

*Прикарпатський університет імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76000, Україна*

Методом кристалоквазімії досліджено механізми утворення точкових дефектів та їх розташування у кристалах CdTe:Cl при відпалі у парах кадмію і телуру. Показано, що при відпалі p-CdTe:Cl у парах кадмію (високі тиски кадмію  $p_{Cd}$ ) одержують матеріал з електронною провідністю як за механізмом заповнення вакансій кадмію, так і його вкорінення у октаедричні порожнини підгратки телуру. Відпал p-CdTe:Cl у парах телуру (низькі тиски  $p_{Cd}$ ) також дає матеріал з електронною провідністю, яка обумовлена антиструктурними дефектами заміщення телуром кадмію.

**Ключові слова:** телурид кадмію, відпал, дефекти, сфалерит, легування.

*Стаття поступила до редакції 17.06.2003; прийнята до друку 23.09.2003.*

### I. Вступ

Одним із найбільш перспективних матеріалів для виготовлення високочутливих неохолоджуючих детекторів іонізуючого випромінювання є компенсований хлором телурид кадмію [1].

CdTe відноситься до широкозонних напівпровідників  $A^{II}B^{VI}$  для яких характерне явище самокомпенсації. Суть явища самокомпенсації полягає у нейтралізації дії введених домішок донорного чи акцепторного типу утворенням власних дефектів з протилежною дією. Це є енергетично вигідним процесом для кристала. Крім того, власні дефекти, взаємодіючи з домішками, за певних умов, можуть утворювати різного типу електрично активні і неактивні комплекси [2, 3].

Незважаючи на проведені фундаментальні дослідження монокристалів CdTe:Cl [2, 4-6], квазімічного моделювання дефектної підсистеми при їх відпалі у парах кадмію і телуру, залишається невирішеною проблема визначення розміщення дефектів у кристалічній ґратці. Кристалоквазімія, як новий науковий напрям, дає більш розширену характеристику утворення дефектів. У квазімії немає необхідності знати кристалічну природу дефектів [6-10]. Кристалоквазімія розглядає дефекти у відповідності з кристалічною будовою речовини і дає нову інформацію про їх властивості, яка відсутня в окремо взятих кристалохімії і квазімії [10].

Мета даної роботи – аналіз дефектної сфалеритної структури та огляд пов'язаних з нею фізичних властивостей монокристалів CdTe:Cl при їх

відпалі у парах кадмію і телуру.

### II. Методика експерименту і результати

Методом Бріджмена [4] вирощували монокристали телуриду кадмію із розплаву. Легування здійснювали у процесі росту кристалів шляхом додавання в ампулу наважки CdCl<sub>2</sub> у кількості 2г. Концентрація введеної в розплав домішки хлору знаходилася у межах  $N_{Cl} = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

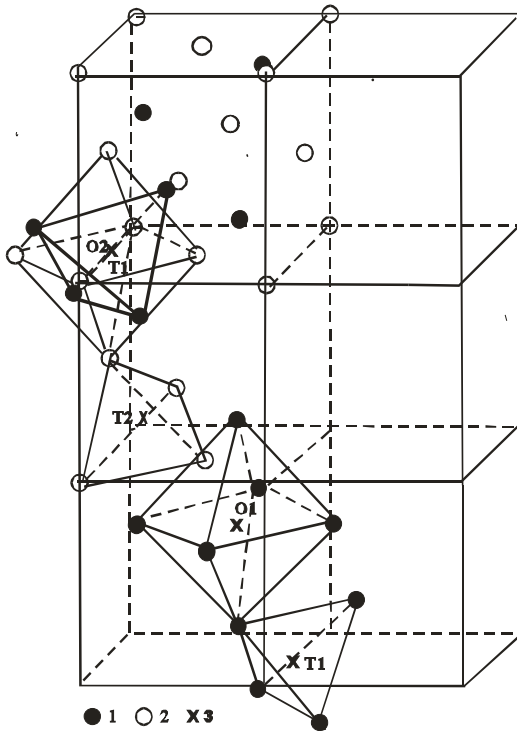
Компенсовані хлором кристали телуриду кадмію піддавали відпалу під контрольованим тиском кадмію чи телуру. Відпал проводили при температурах 1000 і 1173 К. Верхня границя температури відпалу 1173 К це та температура, при якій ще не відбувається деформація зразка із-за сублімації CdTe. Нижня границя температури відпалу вибиралася з врахуванням тривалості дифузійних процесів. Час відпалу склав 24 год. [4].

Встановлено [6], що при низькому значенні парціального тиску пари кадмію  $p_{Cd} \sim 10^2$  Па кристали мають n-тип провідності. Із збільшенням  $p_{Cd}$  концентрація електронів зменшується і при тиску  $p_{Cd}^* \sim 10^{2.2}$  Па настає термодинамічний n-p-перехід. У межах  $p_{Cd} = 10^{2.2}-10^{3.8}$  Па кристали мають діркову провідність. При подальшому зростанні  $p_{Cd}$  тип провідності змінюється знову на електронний і концентрація електронів зростає ( $p_{Cd} = 10^{3.8}-10^4$  Па). Таким чином, у зазначених межах зміни парціального тиску при відпалі кристалів CdTe:Cl, реалізується подвійний термодинамічний n-p-

перехід. Зауважимо, що для одержання низьких значень  $r_{Cd}$  відпал проводили у парі телуру [4].

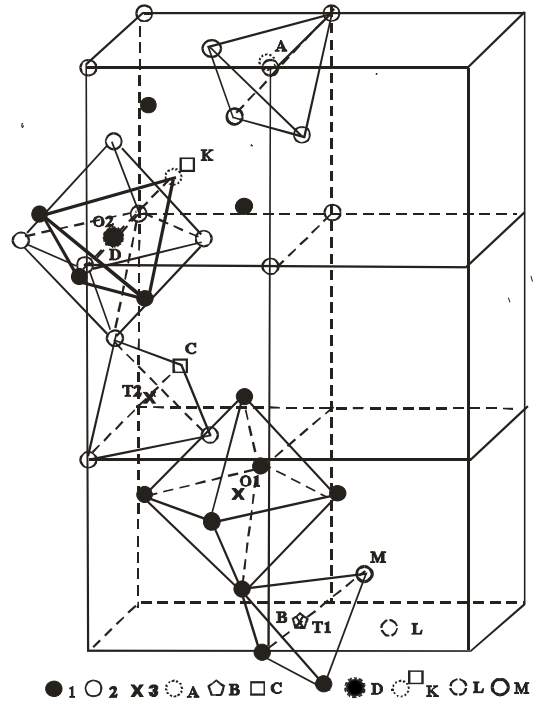
### III. Кристалічна модель дефектів CdTe:Cl

Кристалічна ґратка для сфалериту показана на рис. 1. В'юрцитну модифікацію CdTe у чистому вигляді не одержали [3]. Сфалеритна структура характеризується міжвузловими порожнини з тетраедричним і октаедричним оточенням, центри яких позначаються Т і О. Ґратка кристалів телуриду кадмію складається із двох підґраток утворених атомами металу і халькогену (на рис. 1 вони показані відповідно чорними і світлими кружечками). В такій ґратці виникає вже два види тетраедричних  $T_1$  і  $T_2$  і два види октаедричних порожнин  $O_1$  і  $O_2$ , які відрізняються типом оточуючих атомів. При чому октапорожнини незаповнені, а тетра – наполовину заповнені.



**Рис. 1.** Сфалеритна кристалічна структура напівпровідників  $A^{II}B^{VI}$ : 1 – катіони А; 2 – аніони В; 3 – центри тетра- і октапорожнин.

На рис. 2 показано можливе розміщення точкових дефектів у кристалічній ґратці телуриду кадмію при легуванні його хлором з наступним відпалом в парах кадмію і телуру. Дефектна підсистема в кінцевому результаті може бути утворена: донорним дефектом заміщення  $Cl_{Te}$ ; вакансіями у катіонній і аніонній підґратках  $V_{Cd}''$ ,  $V_{Te}''$  відповідно; міжвузловим атомом кадмію  $Cd_i^{\bullet}$  в октаедричних порожнинах



**Рис. 2.** Дефектна кристалічна модель CdTe:Cl: 1 – катіони А; 2 – аніони В; 3 – центри тетра- і октапорожнин, А –  $V_{Cd}''$ , В –  $Te_i^{\bullet}$ , С –  $Cl_{Te}^{\bullet}$ , D –  $Cd_i^{\bullet}$ , К –  $(V_{Cd}''Cl_{Te}^{\bullet})'$ , L –  $V_{Te}''$ , М –  $Te_{Cd}^{\bullet}$ .

аніонної підґратки; акцепторним комплексом  $(V_{Cd}''Cl_{Te}^{\bullet})'$ ; міжвузловим атомом телуру  $Te_i^{\bullet}$  у тетрапорожнинах підґратки металу, який займає вакансії кадмію з утворенням антиструктурного дефекту  $Te_{Cd}^{\bullet}$ .

Користуючись даними радіусів атомів і порожнин наведених у таблиці, проаналізуємо можливість геометричного розміщення вказаних дефектів у кристалічній ґратці сфалеритної структури телуриду кадмію. Можливе розміщення кадмію в октапорожнинах аніонної підґратки (рис. 2 – дефект D) підтверджується співставленням його іонного радіусу ( $r_i = 0,99 \text{ \AA}$ ) з граничними розмірами октаедричних порожнини підґратки телуру ( $r_{i(\min)}^o - r_{i(\max)}^o = 0,874 - 1,544 \text{ \AA}$ ). Кадмію також може входити і у тетраедричні порожнини підґратки телуру, що узгоджується з їх радіусами тетраедричних порожнин ( $r_{i(\min)}^t - r_{i(\max)}^t = 0,475 - 1,055 \text{ \AA}$ ).

Міжвузловий телур у будь-якому стані (нейтральний атом, іон) не може бути розміщений ні в тетраедричних, ні в октаедричних порожнинах підґратки металу із-за значного перевищення власних розмірів над розмірами відповідних порожнин. Більш імовірним є заміщення телуром кадмію з утворенням антиструктурного дефекту

Таблиця.

Радіуси атомів і порожнин у CdTe:Cl [11]-[13].

Елемент	Електронна конфігурація	$r_0, \text{Å}$	$r_k, \text{Å}; r_{k(r)}, \text{Å}; r_{k(o)}, \text{Å}$	$r_i, \text{Å}$	$r_{k(\min)}^T - r_{k(\max)}^T, \text{Å}$	$r_{i(\min)}^T - r_{i(\max)}^T, \text{Å}$	$r_{k(\min)}^O - r_{k(\max)}^O, \text{Å}$	$r_{i(\min)}^O - r_{i(\max)}^O, \text{Å}$
Cd	$4d^{10}5s^2$	1,71	1,48; 1,48; 1,38	0,99(2+)	0,333 – 0,740	0,222 – 0,496	0,612 – 1,083	0,410 – 0,725
Te	$4d^{10}5s^25p^4$	1,42	1,36; 1,34; 1,64	2,11(2-)	0,306 – 0,680	0,475 – 1,055	0,563 – 0,995	0,874 – 1,544
Cl <sub>2</sub>	$3s^23p^5$	1,00	0,99; 1,06;	1,67(1-)	-	--	-	-

$\text{Te}_{\text{Cd}}$ , так як їх тетраедричні ковалентні радіуси співрозмірні ( $r_{k(r)}^{\text{Cd}} = 1,48 \text{ Å}$ ,  $r_{k(r)}^{\text{Te}} = 1,34 \text{ Å}$ ). Геометричні співвідношення також сприяють хлору ( $r_{k(r)}^{\text{Cl}} = 1,06 \text{ Å}$ ) зайняти тетравузли телуру.

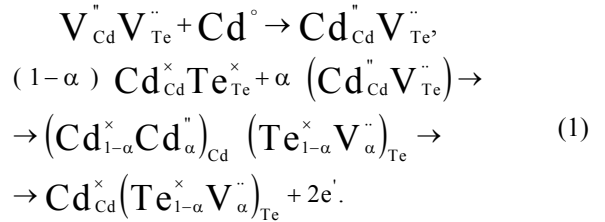
Можливим є і утворення комплексу  $(V_{\text{Cd}}^{\cdot\cdot}\text{ClTe})'$  так як відстані між центрами вакансій кадмію і заміщеним телуру хлором у тетрапозиції кристалічної ґратки складають всього  $2,80 \text{ Å}$  [3].

#### IV. Кристалоквазіхімічні рівняння утворення дефектів

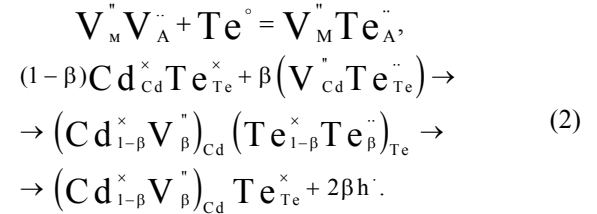
В основу методу покладено суперпозицію кристалоквазіхімічної формули досліджуваної матриці  $\text{Cd}_{\text{Cd}}^{\times}\text{Te}_{\text{Te}}^{\times}$  із кристалоквазіхімічним складом (кластером). Кристалоквазіхімічний склад формується шляхом накладання антиструктури телуриду кадмію  $V_{\text{Cd}}^{\cdot\cdot}V_{\text{Te}}^{\cdot\cdot}$ , яку утворюють двократно іонізовані негативні та позитивні вакансії кадмію і телуру з кристалохімічним складом доданої речовини. Заряди дефектів у кристалоквазіхімії позначають таким чином:  $\times$  – нейтральні,  $\cdot$  – позитивні,  $'$  – негативні, кількість цих знаків відповідає кратності іонізації,  $e'$  – концентрація електронів,  $h'$  – концентрація дірок.

Згідно уявлень кристалоквазіхімії [5] нестехіометричний телурид кадмію з надлишком

кадмію описується такими рівняннями:

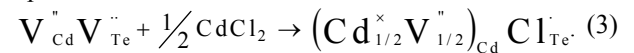


При надлишку халькогену відповідно:

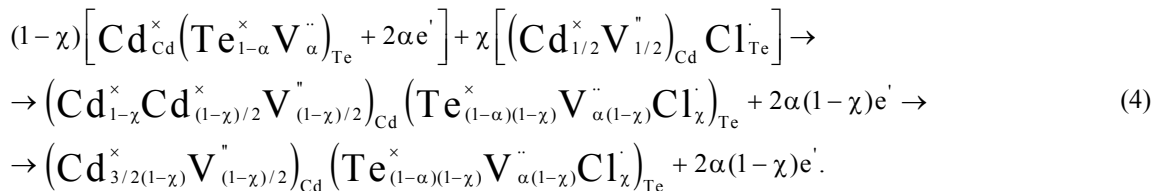


Де,  $\alpha$  і  $\beta$  – відхилення від стехіометрії. При аналізі рівнянь (1), (2) видно, що електронний тип провідності телуриду кадмію пов'язаний із вакансіями телуру  $V_{\text{Te}}^{\cdot\cdot}$ , які утворюються за рахунок надстехіометричного кадмію, а дірковий – із вакансіями кадмію  $V_{\text{Cd}}^{\cdot\cdot}$ , при надлишку телуру.

Тепер розглянемо кристалоквазіхімічний кластер легуючої домішки  $\text{CdCl}_2$ . Згідно попереднього представлення він запишеться як:



При суперпозиції матриці CdTe n-типу (1) з кластером (3) одержимо:



Утворений матеріал (4) характеризується переважною електронною провідністю, яка обумовлена вакансіями  $V_{\text{Te}}^{\cdot\cdot}$  у підґратці халькогену.

Суперпозиція матеріалу CdTe p-типу (2) з (3) приводить до:

$$\begin{aligned}
 & (1-\delta) \left[ \left( \text{Cd}_{1-\beta}^{\times} \text{V}_{\beta}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \text{Te}_{\text{Te}}^{\times} + 2\beta h^{\cdot} \right] + \delta \left[ \left( \text{Cd}_{1/2}^{\times} \text{V}_{1/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \text{Cl}_{\text{Te}}^{\cdot} \right] \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)}^{\prime\prime} \text{Cd}_{\delta/2}^{\times} \text{V}_{\delta/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)}^{\times} \text{Cl}_{\delta}^{\cdot} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)h^{\cdot} \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)+\delta/2}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)-\delta/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)}^{\times} \right)_{\text{Te}} \left[ \text{V}_{\text{Cd}}^{\prime\prime} \text{Cl}_{\text{Te}}^{\cdot} \right]^{-} + 2\beta(1-\delta)h^{\cdot}.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Дірковий тип провідності матеріалу (5) зберігається за рахунок центрації вакансій  $\text{V}_{\text{Cd}}^{\prime\prime}$  у підґратці металу.

При відпалі CdTe:Cl у парі кадмію надлишковий, відносно стехіометричного складу, кадмій може утворювати вакансії телуру  $\text{Cd}^{\vee} \Leftrightarrow \text{Cd}_{\text{Cd}}^{\circ} + \text{V}_{\text{Te}}^{2+} + 2e^{-}$ , або вкорінюватися у міжвузля ґратки  $\text{Cd}^{\vee} \Leftrightarrow \text{Cd}_i^{2+} + 2e^{-}$  [4]. Тому вплив надлишкового кадмію на матеріал (5) проводили за

механізмом заміщення і вкорінення.

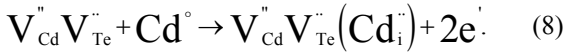
Для механізму входження кадмію у свої ж вакансії одержуємо кластер:



У випадку CdTe р-типу провідності накладання матриці (5) на кластер (6) приводить до утворення матеріалу з переважаючою електронною провідністю згідно одержаного матеріалу (7).

$$\begin{aligned}
 & (1-\varepsilon) \left[ \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)+\delta/2}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)+\delta/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)}^{\times} \text{Cl}_{\delta}^{\cdot} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)h^{\cdot} \right] + \varepsilon \left( \text{Cd}_{\text{Cd}}^{\prime\prime} \text{V}_{\text{Te}}^{\prime\prime} \right) \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)+\delta/2}^{\times} \text{V}_{(\beta(1-\delta)+\delta/2)(1-\varepsilon)}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)(1-\varepsilon)}^{\times} \text{Cl}_{\delta(1-\varepsilon)}^{\cdot} \text{V}_{\varepsilon}^{\prime\prime} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)(1-\varepsilon)h^{\cdot} + 2\varepsilon e^{\cdot}.
 \end{aligned} \tag{7}$$

При вкоріненні кадмію у міжвузля кластер запишеться:



Суперпозиція матриці (5) з кластером (8) дає наступний результат (9):

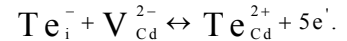
$$\begin{aligned}
 & (1-\phi) \left[ \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)+\delta/2}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)+\delta/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)}^{\times} \text{Cl}_{\delta}^{\cdot} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)h^{\cdot} \right] + \phi \left[ \text{V}_{\text{Cd}}^{\prime\prime} \text{V}_{\text{Te}}^{\prime\prime} (\text{Cd}_i^{\cdot}) \right] \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{((1-\beta)(1-\delta)+\delta/2)(1-\phi)}^{\times} \text{V}_{((\beta(1-\delta)+\delta/2)(1-\phi))+\phi}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)(1-\phi)}^{\times} \text{Cl}_{\delta(1-\phi)}^{\cdot} \text{V}_{\phi}^{\prime\prime} (\text{Cd}_{i\phi}^{\cdot}) \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)(1-\phi)h^{\cdot} \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{((1-\beta)(1-\delta)+\delta/2)(1-\phi)}^{\times} \text{V}_{((\beta(1-\delta)+\delta/2)(1-\phi))+\phi}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)(1-\phi)}^{\times} \text{Cl}_{\delta(1-\phi)}^{\cdot} \text{V}_{\phi}^{\prime\prime} (\text{Cd}_{i\phi}^{\cdot}) \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)(1-\phi)h^{\cdot} + 2\phi e^{\cdot}.
 \end{aligned} \tag{9}$$

При аналізі одержаних рівнянь (7) і (9) видно, що вони характеризуються переважаючою електронною провідністю, яка обумовлена появою вакансій телуру для (7) та міжвузловим кадмієм в аніонній підґратці для матриці (9).

Використанні позначення грецькими буквами:  $\chi$ ,  $\delta$ ,  $\varepsilon$ ,  $\phi$ ,  $\varphi$ , у методі кристалоквазімії означають відхилення від стехіометрії або мольні частки тієї речовини, яку додають у процесі дослідження.

При відпалі р-CdTe:Cl при низьких тисках пари кадмію, а саме у парі телуру, одержують матеріал з

високою концентрацією електронів за рахунок утворення антиструктурного дефекту  $\text{Te}_{\text{Cd}}^{\cdot}$  за рівнянням:



Кристалоквазімічне рівняння дефектоутворення для такого процесу приведено нижче:



Суперпозиція матриці (5) з кластером (10) дає:

$$\begin{aligned}
 & (1-\varphi) \left[ \left( \text{Cd}_{(1-\beta)(1-\delta)+\delta/2}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)+\delta/2}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)}^{\times} \text{Cl}_{\delta}^{\cdot} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)h^{\cdot} \right] + \varphi \left( \text{V}_{\text{Cd}}^{\prime\prime} \text{V}_{\text{Te}}^{\prime\prime} (\text{Te}_i^{\cdot}) + h^{\cdot} \right) \rightarrow \\
 & \rightarrow \left( \text{Cd}_{((1-\beta)(1-\delta)+\delta/2)(1-\varphi)}^{\times} \text{V}_{\beta(1-\delta)+\delta/2}^{\prime\prime} \text{Te}_{\varphi}^{\prime\prime} \right)_{\text{Cd}} \left( \text{Te}_{(1-\delta)(1-\varphi)}^{\times} \text{Cl}_{\delta(1-\varphi)}^{\cdot} \text{V}_{\varphi}^{\prime\prime} \right)_{\text{Te}} + 2\beta(1-\delta)(1-\varphi)h^{\cdot} + \varphi h^{\cdot} + 5\varphi e^{\cdot}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

## V. Аналіз результатів дослідження

Експериментальні результати [4-6], які визначають залежність типу провідності легованих  $\text{CdCl}_2$  кристалів телуриду кадмію від значення парціальних тисків компонентів, із врахуванням кристалохімічної (рис. 1, 2) і кристалоквазіхімічної (1) – (11) моделей можна пояснити наступними чином.

Початково синтезовані кристали  $\text{CdTe}$ , які мають р-тип ровідності [4], характеризуються згідно (2) переважанням вакансій кадмію – тетраедричні порожнини в оточенні телуру (рис. 2 – дефект типу А). При легуванні цього матеріалу  $\text{CdCl}_2$  акцепторний тип кристалів зберігається за рахунок утворення додаткових вакансій у катіонній підґратці згідно (5):  $[V_{\beta}^{\bullet}]_{\text{Cd}} < [V_{\beta+\delta(0,5-\beta)}^{\bullet}]_{\text{Cd}}$ ,  $\beta \ll 0,5$  (рис. 2 – дефект типу А).

Відпал кристалів у парах телуру (область низьких значень парціального тиску кадмію) згідно (11) веде до утворення антиструктурних дефектів  $\text{Te}_{\text{Cd}}^{\bullet}$  (рис. 2 – дефект М). Це пов'язано із тим, що при високих концентраціях телуру, займаючи тетраедричне міжвузля у кристалічній ґратці, він має високу зовнішню релаксацію і буде притягуватися до областей, де напруги можуть бути усунені. Ці області локалізовані у місцях значної концентрації вакансій кадмію  $[V_{\text{Cd}}^{\bullet}]$ , у яких відбувається релаксація і зсув сусідніх атомів. Із-за утворення при цьому значної кількості електронів ( $5\beta e' > [2\beta(1-\delta)(1-\phi) + \phi]h'$ ) (11), відпалений  $\text{CdTe}:\text{Cl}$  у парах телуру має значну ефективну електронну провідність.

Відпал легованих хлором кристалів  $\text{CdTe}$  при високих парціальних тисках парів кадмію знову ж таки приведе до синтезу кристалів із переважаючою електронною провідністю. Але механізм донорної дії тут буде зовсім інший ніж у попередньому випадку. Так, при механізмі заміщення (7) надлишкові електрони у кристалічній ґратці  $\text{CdTe}$  появляються за рахунок „заліковування” вакансій кадмію:  $(\beta(1-\delta) + \delta/2) / ((1-\epsilon)[\beta(1-\delta) + \delta/2]) = 1/(1-\epsilon) > 1$ .

При механізмі вкорінення (9) ці ж електрони провідності утворюються вже у процесі іонізації міжвузлових атомів кадмію (рис. 2 – дефект D).

Для області середніх парціальних тисків пари кадмію переважаючими дефектами є вакансії у катіонній підґратці згідно (2) (рис. 2 – дефект А), що і обумовлює р-тип провідності матеріалу.

Окремим цікавим питанням є утворення комплексів (асоціатів) за рахунок взаємодії між собою

різноманітних заряджених власних атомних дефектів із домішковими дефектами. У нашому випадку згідно кристалоквазіхімічних рівнянь (4), (5), (7), (9) і (11) може утворюватися заряджений центр типу  $[V_{\text{Cd}}^{\bullet}\text{Cl}_{\text{Te}}^{\bullet}]$  (рис. 2 – дефект К). Він окремо виділений у (5). Крім того, в останній час [2], пропонується ідеї про утворення нейтральних центрів типу  $[V_{\text{Cd}}^{\bullet}\text{Cl}_{\text{Te}}^{\bullet}]^{\circ} [V_{\text{Cd}}^{\bullet}2\text{Cl}_{\text{Te}}^{\bullet}]^{\circ}$ . В усіх випадках утворення центрів, як заряджених, так і нейтральних, має місце зв'язування електронів у кристалічній ґратці.

## VI. Висновки

1. Запропоновано кристалічну модель дефектоутворення у сфалеритній структурі  $\text{CdTe}:\text{Cl}$ .

2. Методами кристалоквазіхімії проаналізовано процеси легування  $\text{CdCl}_2$  кристалів р- $\text{CdTe}$  з наступним відпалом у парах кадмію і телуру.

3. Встановлено, що при низьких значеннях пари кадмію матеріал (відпал у парах телуру) характеризується електронною провідністю, за рахунок утворення антиструктурних дефектів  $\text{Te}_{\text{Cd}}^{\bullet}$ .

4. Відпал кристалів при високих парціальних тисках парів кадмію, за рахунок заміщення кадмієм вакансій у катіонній підґратці та іонізації міжвузлаоого кадмію, обумовлює також електронну провідність  $\text{CdTe}:\text{Cl}$ .

5. Середні значення парціальних тисків парів кадмію при відпалі кристалів  $\text{CdTe}:\text{Cl}$  забезпечує їх р-тип через переважання вакансій у підґратці металу.

6. Показано, що результати кристалоквазіхімії підтверджуються співставленням іонного радіусу кадмію з розмірами октаедричних і тетраедричних порожнин щільної упаковки атомів телуру.

Автори висловлюють вдячність проф. **Фрейку Д.М.** за постановку задачі дослідження і надані консультації.

**Л.Й. Межиловська** – к.ф.-м.н., доцент;

**А.М. Дмитрів** – аспірант кафедри фізики твердого тіла;

**М.А. Лоп'янюк** – к.ф.-м.н., доцент кафедри фізики твердого тіла.

[1] K.R. Zanio. Cadmium Telluride / Semiconductors and Semimetals. – New York; San Francisco: Acad. press (1978).

[2] Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук, П.М. Ткачук. Домішково-дефектна структура  $\text{CdTe}:\text{Cl}$  – матеріалу для детекторів іонізуючого випромінювання (Огляд) // *Український фізичний журнал*, **44**(6), сс. 730-737 (1999).

[3] Физика и химия соединений  $\text{A}^2\text{B}^6$  / Перев. Под ред. С.А. Медведева. Мир, М. (1970).

- [4] О.А. Матвеев, А.И. Терентьев. Самокомпенсация в CdTe<Cl> в условиях фазового равновесия кристалл-пар кадмия (теллура) // *ФТП*, **32**(2), сс. 159-163 (1998).
- [5] О.А. Матвеев, А.И. Терентьев. Антиструктурные дефекты Te<sub>Cd</sub> в кристаллах CdTe // *Письма в ЖТФ*, **23**(4), сс. 30-34 (1997).
- [6] Д.М. Фрейк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець, А.М. Дмитрів. Подвійний термодинамічний n-p-перехід у кристалах телуриду кадмію, легovanого хлором // *Фізика і хімія твердого тіла*, **3**(4), сс. 642-646 (2002).
- [7] А. Риз. *Хімія кристаллов с дефектами*. М.: Иностранная литература, с. 136 (1956).
- [8] А.Н. Мень, Ю.П. Воробьев, Г.И. Чуфаров. *Кристаллохимия и термодинамика взаимодействующих дефектов. Серия химия твердого тела*. Т.І. М.: ВИНТИ, с. 88 (1973).
- [9] Ф. Крегер. *Химия несовершенных кристаллов*. Мир, М., с. 654 (1969).
- [10] С.С. Лисняк. Кристаллоквазихимическая модель исследований в химии твердого тела // *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, **29**(9), сс. 1913-1917 (1992).
- [11] С.А. Семилетов. Тетраэдрические и октаэдрические ковалентные радиусы // *Кристаллография*, **21**(4), сс. 752-758 (1976).
- [12] К.Б. Яцимирський, В.К. Яцимирський. *Хімічний зв'язок*. К.: Вища школа, с.309 (1993).
- [13] В.М. Лебедев. *Ионно-атомные радиусы и их значения для геохимии и химии*. Изд-во Ленингр. ун-та, с. 156 (1969).

L.Y. Mezhylovska, A.M. Dmytriv, M.V. Lopjanko

## Impurity-Defect Subsystem of Blende Structure on Cadmium Telluride Crystals, Doped by Chlorine

*Physical-Chemical Institute at the 'Vasyl Stefanyk' Prekarpathion University,  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine*

The method of crystalquasichemistry is investigates possible variants of accommodation of dot defects in crystals CdTe:Cl under their disappeared in pairs cadmium and tellurium. Is shown, that with disappeared p-CdTe:Cl in pairs cadmium receive a material with electronic conductivity as behind the mechanism of entry cadmium at vacancies cadmium, and rooting in emptiness understructure tellurium. Has disappeared p-CdTe:Cl in pairs tellurium also gives a material with electronic conductivity, which caused by antistructural defect of replacement  $\text{Te}_{\text{Cd}}^{\bullet}$ .