

НЕЙТРАЛЬНІ ТА ІОНІЗОВАНІ ДЕФЕКТИ В МОНОКРИСТАЛАХ ТА ПЛІВКАХ CdTe

асп. Косяк В.В., доц. Опанасюк А.С.

Для виготовлення детекторів рентгенівського та гама випромінювання, електронно-оптичних модуляторів, сонячних елементів та інших приладів електроніки необхідно одержувати монокристали і плівки CdTe з програмованим ансамблем точкових дефектів. Це, як правило, роблять змінюючи умови вирощування та термообробки матеріалу.

Нажаль, сьогодні не існує єдиної думки відносно типу і електричної активності атомних дефектів у CdTe. Це приводить до того, що різні автори для опису стану дефектів в матеріалі використовують різні моделі.

В роботі використана модель, яка враховує найбільш повний спектр дефектів у халькогеніді. Вона включає дефекти як за підградкою кадмію (V_{Cd}^0 - вакансія кадмію, Cd_i^0 - міжвузловий кадмій), так і за підградкою телуру (V_{Te}^0 - вакансія телуру, Te_i^0 - міжвузловий телур), а також враховує існування антиструктурного дефекту Te_{Cd}^0 .

В цьому випадку процес утворення нейтральних точкових дефектів в напівпровіднику, згідно закону діючих мас, можна описати наступними реакціями:

$$[V_{Cd}^0] = n_0 \cdot \exp\left[-\frac{F(V_{Cd}^0) + \mu_{Cd}}{kT_s}\right], \quad (1)$$

$$[Cd_i^0] = n_0 \cdot \exp\left[-\frac{F(Cd_i^0) + \mu_{Cd}}{kT_s}\right], \quad (2)$$

$$[Te_i^0] = n_0 \cdot \exp\left[-\frac{F(Te_i^0) + \mu_{Cd}}{kT_s}\right], \quad (3)$$

$$[V_{Te}^0] = n_0 \cdot \exp\left[-\frac{F(V_{Te}^0) + \mu_{Cd}}{kT_s}\right], \quad (4)$$

$$[Te_{Cd}^0] = n_0 \cdot \exp\left[-\frac{F(Te_{Cd}^0) + \mu_{Cd} - \mu_{Te}}{kT_s}\right], \quad (5)$$

де F – вільна енергія утворення твердої фази з відповідними точковими дефектами; μ_{Cd} , μ_{Te} – хімічні потенціали кадмію та телуру відповідно; n_0 – концентрація атомів в вузлах кристалічної ґратки; k – стала Больцмана; T_s – температура отримання або відпалу матеріалу.

Концентрацію акцепторних та донорних заряджених дефектів можна розрахувати знаючи енергію їх залягання в забороненій зоні напівпровідника та положення рівня Фермі в матеріалі за допомогою рівнянь (6)-(7):

$$[X^{z-}] = \frac{g_{X^0}}{g_{X^-}} \exp\left(\frac{z\mu_F - E_a}{kT_s}\right) \quad (6)$$

$$[X^{z+}] = \frac{g_{X^0}}{g_{X^+}} \exp\left(\frac{E_d - z\mu_F}{kT_s}\right) \quad (7)$$

де g_{X^0} , g_{X^-} , g_{X^+} – фактори виродження нейтральних та іонізованих дефектів; μ_F – енергія Фермі; E_a , E_d – енергії залягання акцепторних та донорних центрів відповідно.

Результати моделювання процесів дефектоутворення в монокристалах та плівках $CdTe$, для випадків повної рівноваги дефектів та їх закалювання наведені на рис. 1.

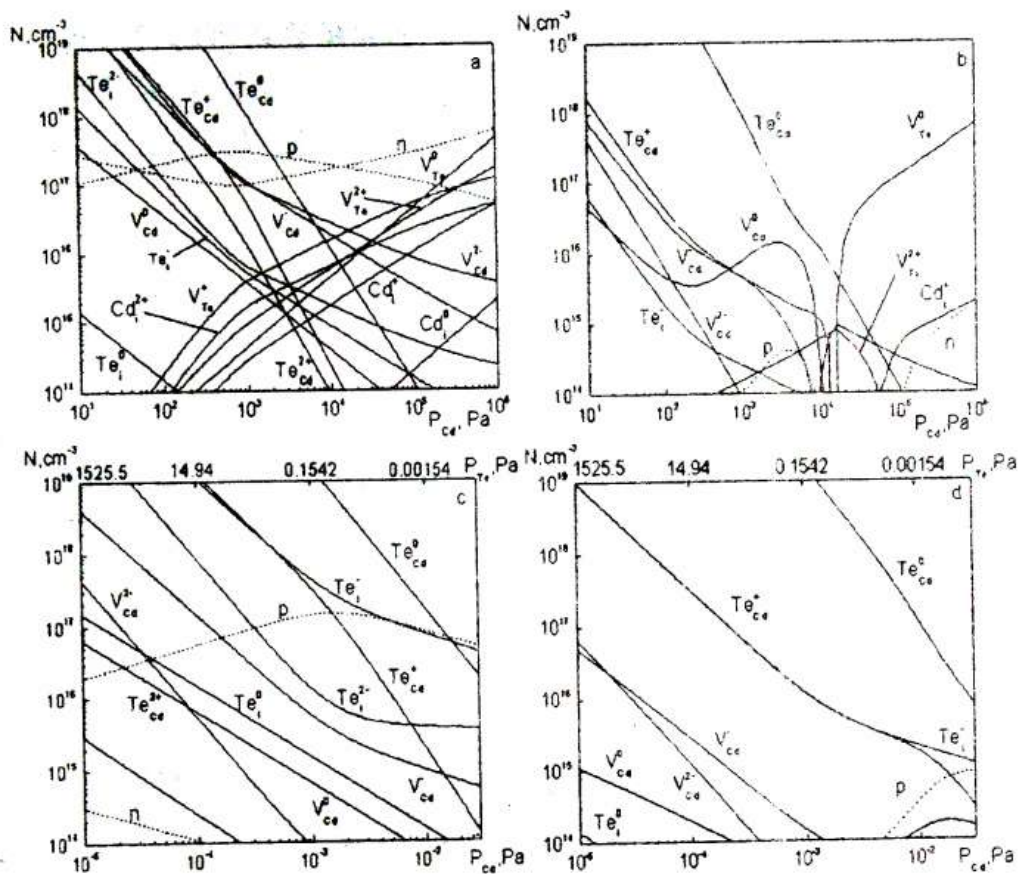


Рисунок 1. Залежність концентрації точкових дефектів від парціального тиску кадмію: a,b - відпалювання монокристалу ($T_s = 900^{\circ}\text{C}$), відповідно повна рівновага та закалювання; c,d - конденсація тонкої плівки, відповідно повна рівновага ($T_s = 550^{\circ}\text{C}$, $T_e = (600-1000)^{\circ}\text{C}$) та закалювання ($T_s = 20^{\circ}\text{C}$, $T_e = 600-1000^{\circ}\text{C}$)

Проведені розрахунки дозволяють обирати технологічні умови одержання халькогеніду кадмію з програмованою структурою точкових дефектів.

Запропонована модель є найбільш загальною з можливих і з врахуванням відповідних констант матеріалів може бути використана для розрахунку ансамблю точкових дефектів у будь-якому з'єднанні A_2B_6 .