

УДК 621.794.4, 546.48.24

Володимир Прокопів

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
 м. Івано-Франківськ, Україна*

МЕХАНІЗМИ ФОРМУВАННЯ ДЕФЕКТНОЇ ПІДСИСТЕМИ У ПАРОФАЗНИХ КОНДЕНСАТАХ КАДМІЙ ТЕЛУРИДУ

Кадмій телурид, завдяки особливому комплексу фізико-хімічних властивостей є перспективним матеріалом для використання у перетворювачах сонячної енергії, детекторів X- та γ -випромінювання, що функціонують при кімнатних температурах.

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у тонких плівках кадмій телуриду

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K^0 , (см ⁻³ , Па)	ΔH , еВ
I	$CdTe^s = Cd^v + \frac{1}{2}Te_2^v$	$K_{CdTe} = P_{Cd}P_{Te_2}^{1/2}$	$1,2 \cdot 10^{10}$	3,03
II	$Cd^v = Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^0$	$K_{Cd,v} = [V_{Te}^0] \cdot P_{Cd}^{-1}$	$6,61 \cdot 10^{25} \cdot T^{-5/2}$	3,24
III	$\frac{1}{2}Te_2 = Te_{Te}^0 + V_{Cd}^0$	$K_{Te_2,v} = [V_{Cd}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$1,01 \cdot 10^{39} \cdot T^{-17/4}$	2,67
IV	$V_{Te}^0 = V_{Te}^+ + e^-$	$K_a = [V_{Te}^+] \cdot n / [V_{Te}^0]$	$3,5 \cdot 10^{14} \cdot T^{3/2}$	0,38
IVa	$V_{Te}^0 = V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 / [V_{Te}^0]$	$3,06 \cdot 10^{28} \cdot T^3$	0,84
V	$V_{Cd}^0 = V_{Cd}^- + h^+$	$K_b = [V_{Cd}^-] \cdot p / [V_{Cd}^0]$	$2,44 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,05
Va	$V_{Cd}^0 = V_{Cd}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Cd}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Cd}^0]$	$2,14 \cdot 10^{29} \cdot T^3$	0,47
VI	"0" = $e^- + h^-$	$K_i = n \cdot p$	$5 \cdot 10^{39} \cdot T^3$	1,5
VII	$n + [V_{Cd}^-] + 2[V_{Cd}^{2-}] = p + [V_{Te}^+] + 2[V_{Te}^{2+}]$			

Тонкі плівки кадмій телуриду одержували з парової фази методом гарячої стінки [1]. Процес утворення цих дефектів при вирощуванні плівок описується системою рівнянь квазіхімічних реакцій наведених у табл.

Тут $K = K_0 \exp(-\Delta H / kT)$ – константи рівноваги; P_{Cd} , P_{Te_2} – парціальні тиски пари кадмію і телуру відповідно; e^- – електрони; h^+ – дірки; n і p – концентрації електронів і дірок відповідно; „V” – пара.

Реакція (I) описує сублімацію твердого кадмій телуриду із розкладом на компоненти, (II)–(III) – проникнення атомів кадмію та телуру з парової фази у

плівку з утворенням нейтральної металічної V_{Cd}^0 та аніонної V_{Te}^0 вакансій відповідно. (IV)–(V) – реакції йонізації утворених дефектів; (IV) – збудження власної провідності. Слід відмітити, що реакції (II)–(VI) проходять на підкладці і їх константи рівноваги є функціями температури підкладки T_{II} , а реакція (I) відбувається у випарнику і її константа рівноваги є функцією температури випаровування T_B .

Рівняння (VII) – загальна умова електронейтральності.

Рівняння (I)–(VII) дають можливість визначити концентрацію електронів n через константи рівноваги K та парціальний тиск пари кадмію P_{Cd} . Отримуємо рівняння 4-го степеня відносно n :

$$An^4 + Bn^3 - Cn - D = 0$$

$$\text{де: } A = 2 \frac{K'_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe}}{K_i^2 \cdot P_{Cd}}; \quad B = 1 + \frac{K_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe}}{K_i \cdot P_{Cd}}; \quad C = K_i + K_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd};$$

$$D = 2K'_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd} = 0.$$

Знаючи концентрацію електронів, користуючись співвідношеннями (I)–(VI), можна знайти холлівську концентрацію вільних носіїв заряду n_H , концентрацію дірок p , одно- та двозарядних вакансій кадмію $[V_{Cd}^-]$, $[V_{Cd}^{2-}]$, та телуру $[V_{Te}^+]$, $[V_{Te}^{2+}]$:

$$n_H = n - K_i / n, \quad p = K_i / n,$$

$$[V_{Cd}^-] = \frac{K_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot n}{K_i \cdot P_{Cd}} \quad [V_{Te}^+] = \frac{K_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd}}{n}$$

$$[V_{Te}^{2+}] = \frac{K'_a \cdot K_{Cd,V} \cdot P_{Cd}}{n} \quad [V_{Cd}^{2-}] = \frac{K'_b \cdot K_{Te_2,V} \cdot K_{CdTe} \cdot n^2}{K_i \cdot P_{Cd}}$$

Ефективні значення перед експоненційних множників K_0 і ентальпій реакцій ΔH для констант реакцій (табл.) взяті ті ж, що і для кристалів [2].

Деякі результати розрахунку залежностей концентрації вільних носіїв заряду від температури підкладки T_{II} і температури випаровування T_B наведено на рис. 1–2.

З графіків видно, що при низьких температурах випаровування T_B і високих підкладки T_{II} одержуємо плівки р-типу провідності. При цьому з підвищенням температури випаровування T_B , при постійній температурі підкладки T_{II} концентрація дірок p зменшується, при деякій температурі T_{II} настає інверсія провідності з р- на n-тип та в подальшому зростає концентрація електронів (рис. 1).

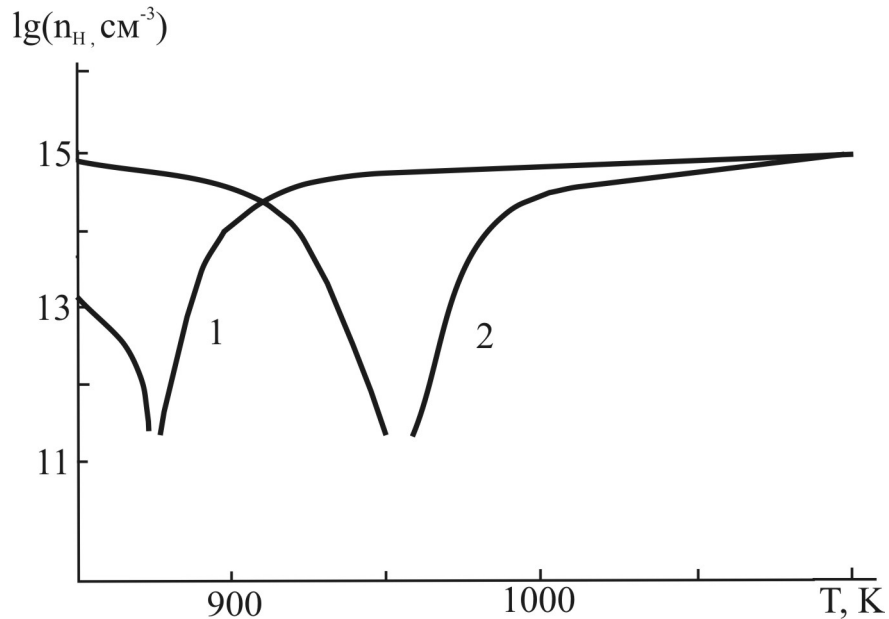


Рисунок 1 - Залежності холлівської концентрації вільних носіїв заряду n_H від температури випаровування T_B при температурі підкладки T_H , К: 1 – 700, 2 – 800.

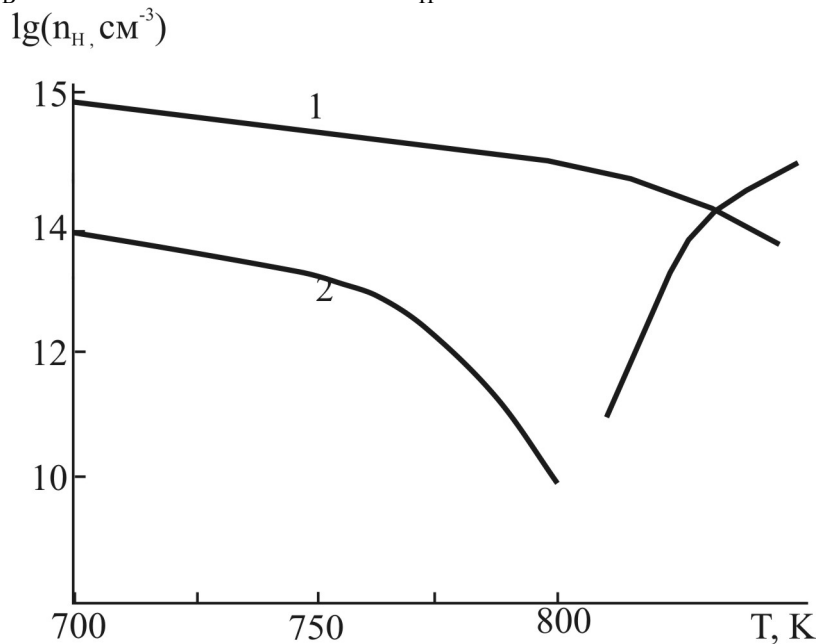


Рисунок 2 - Залежності холлівської концентрації вільних носіїв заряду n_H від температури підкладки T_H при температурі випаровування T_B , К: 1 – 1100, 2 – 850.

При високих температурах випаровування T_B одержуємо плівки тільки n-типу провідності для всієї області зміни температури підкладки T_H . При цьому, зі збільшенням температури підкладки, при постійній температурі випаровування T_B концентрація електронів спадає і якщо $T_B < 900$ К настає інверсія провідності з n- на p-тип (рис. 2).

1. Д.М. Фрейк, М.А. Галушак, Л.И. Межиловская, *Фізика и технология полупроводниковых пленок* (Вища школа, Львов, 1988), 152 с.
2. Д.М. Фрейк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець, *Фізика і хімія твердого тіла* **4**, 547 (2004).