

Л.Й. Межиловська, А.М. Дмитрів, Д.М. Фреїк, П.В. Жуковскі*
Точкові дефекти твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te$

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Галицька, 201, м. Івано-Франківськ, 76000, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua
*Люблінський технічний університет, 20-618 Люблін, Польща
E-mail: mario@elektron.pol.lublin.pl*

Запропоновано кристалоквазіхімічні рівняння утворення твердих розчинів n- і p-HgTe-CdTe для механізмів заміщення кадмієм вакансій ртутію і його вкорінення в октаедричні порожнини оточення телуру. Розраховано концентрації дефектів і носіїв заряду від вмісту телуриду кадмію.

Ключові слова: телурид кадмію, телурид ртутію, тверді розчини, точкові дефекти, кристалоквазіхімія.

Стаття поступила до редакції 07.03.2004; прийнята до друку 23.11.2004.

I. Вступ

Тверді розчини $Cd_xHg_{1-x}Te$ (КРТ) на сьогодні залишаються основним матеріалом інфрачервоної оптоелектроніки [1]. Зміною складу твердого розчину (x) можна одержати КРТ з шириною забороненої зони E_g від 0 до 1,6 еВ. Зрозуміло, що така можливість управляти величиною E_g дозволяє створювати багатокольорові приймачі ІЧ випромінювання на основі одного матеріалу, а висока рухливість електронів – швидкодіючі прилади [2].

Розширені можливості у використанні $Cd_xHg_{1-x}Te$ вимагають більш детального якісного і кількісного аналізу природи точкових дефектів у них. На даний час природа точкових дефектів як у сполуках CdTe, HgTe, так і у твердих розчинах на їх основі до кінця не встановлена.

Слабкий хімічний зв'язок між атомами у сполуці HgTe обумовлює наявність великої кількості власних дефектів, які впливають на властивості твердих розчинів $Cd_xHg_{1-x}Te$. Область гомогенності телуриду ртутію на T-x діаграмі побудована на основі експериментальних результатів [3,4] і розрахована на основі квазіхімічних рівнянь [5] представлена на рис. 1. Із діаграми видно, що при високих температурах область гомогенності телуриду ртутію є двосторонньою. Однак нижче 623 К стехіометричний склад знаходиться за межею області гомогенності. Максимальна розчинність ртутію спостерігається при температурі 900 К і складає $8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Максимальна розчинність телуру складає $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при 850 К. Із зменшенням температури розчинність телуру спадає повільніше ніж розчинність ртутію [5].

Кристалізуються телурид ртутію і кадмію в структурі типу сфалериту, просторова група $F\bar{4}3m$ [6]. Природа точкових дефектів у даних сполуках носить спірний характер. Зокрема, одержані у роботах [7,8,10] результати дозволили зробити висновок, що у телуриді ртутію, так як і в телуриді кадмію, у значній кількості присутні нейтральні

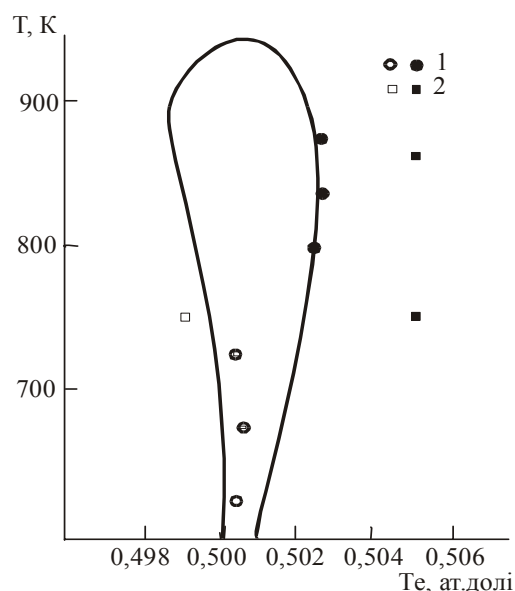


Рис. 1. Область гомогенності телуриду ртутію на T-x діаграмі: суцільна лінія – розрахунок на основі рівноваги точкових дефектів [5]; точки – результати експериментальних досліджень 1 – [3] і 2 – [4].

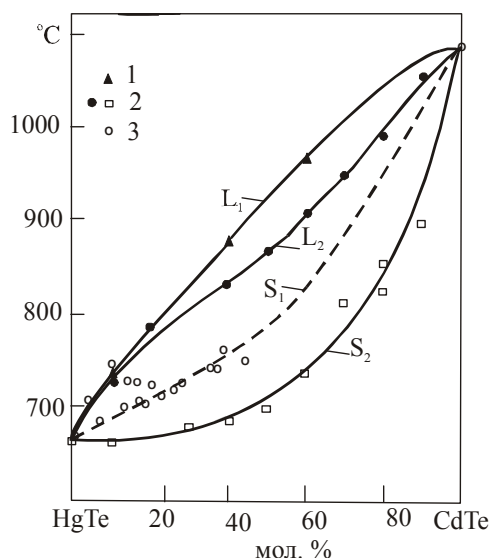


Рис. 2. Діаграми стану системи HgTe-CdTe [10] 1 – [11]; 2 – [12]; 3 – [13].

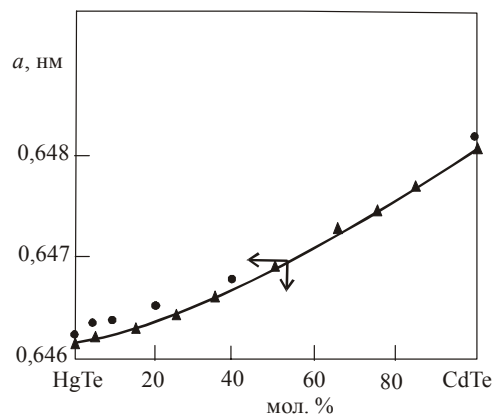


Рис. 3. Залежність параметра ґратки від складу в системі HgTe-CdTe [6].

точкові дефекти. У роботі [5] визначено, що в області гомогенності телуриду меркурію домінують дефекти Шотткі. Поряд з нейтральними вакансіями меркурію вагому роль відіграють і двократно заряджені вакансії меркурію, концентрація яких в області надлишку телуру навіть перевищує концентрацію нейтральних вакансій.

Сполуки HgTe і CdTe утворюють неперервний ряд твердих розчинів на основі кубічної структури сфалериту, у якій атоми ртуті і кадмію хаотично розміщуються у підґратці металу (рис. 2). Параметр ґратки TP змінюється лінійно у залежності від складу (рис. 3) [6,7].

У системі HgTe-CdTe, як і в HgTe акцепторами виступають вакансії меркурію, тому при високих температурах спостерігається p-тип провідності [6].

Найбільш детально електричні властивості досліджено TP складу $x=0,2$ – перспективного матеріалу для приладів ІЧ-техніки [8]. Показано, що концентрація донорів при 77 К у зразку n-типу складає $3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, холлівська рухливість – $7 \cdot 10^4 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$.

Бірюліном з співавторами [9] виявлено, що зразки Cd_xHg_{1-x}Te n-типу провідності з низькою концентрацією електронів, як правило, компенсовані. Ступінь компенсації порушується при термоконверсії провідності в r-тип. Визначена енергія іонізації донорного рівня із залежностей питомого опору від температури $\rho(T)$ складає 24-32 меВ. У цих же зразках після термоконверсії у r-тип визначені енергії іонізації акцепторів, пов'язаних з двократно зарядженими вакансіями $V_{\text{Hg}}^{\prime\prime}$: $E_a = 32$ і 48 меВ. Крім того виявлений глибокий рівень E_i невідомої домішки, яка має амфотерний характер з $E_i - E_v \approx 0,7E_g$.

У даній роботі, запропоновані кристалоквазіхімічні рівняння утворення твердих розчинів n- і p-HgTe-CdTe, на основі яких розраховано концентрацію точкових дефектів і носіїв заряду.

II. Кристалоквазіхімічні рівняння утворення твердих розчинів

В основу методу кристалоквазіхімії [14] покладена суперпозиція кристалоквазіхімічної формули досліджуваної матриці $\text{Hg}_{\text{Cd}}^x \text{Te}_{\text{Te}}^x$ із кристалоквазіхімічним складом (кластером). Кристалоквазіхімічний кластер формується шляхом накладання антиструктури телуриду меркурію $V_{\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{\text{Te}}^{\prime\prime}$, яку утворюють двократно іонізовані негативні та позитивні вакансії меркурію і телуру з кристалохімічним складом доданої речовини. Заряди дефектів у кристалоквазіхімії позначають таким чином: x – нейтральні, \bullet – позитивні, $'$ – негативні, кількість цих знаків відповідає кратності іонізації, e' – концентрація електронів, h' – концентрація дірок.

Тоді нестехіометричний телурид меркурію з надлишком металу описується такими рівняннями:

$$\begin{aligned}
 & V_{\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{\text{Te}}^{\prime\prime} + \text{Hg}^{\circ} \rightarrow \text{Hg}_{0,5\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{0,5\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{\text{Te}}^{\prime\prime} (\text{Hg}_{0,5}^{\circ})_i, \\
 & (1-\alpha) (\text{Hg}_{\text{Hg}}^x \text{Te}_{\text{Te}}^x) + \alpha (\text{Hg}_{0,5\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{0,5\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{\text{Te}}^{\prime\prime} (\text{Hg}_{0,5}^{\circ})_i) \rightarrow \\
 & \rightarrow (\text{Hg}_{1-\alpha}^x \text{Hg}_{0,5\alpha}^{\prime\prime} V_{0,5\alpha}^{\prime\prime})_{\text{Hg}} (\text{Te}_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{\prime\prime})_{\text{Te}} (\text{Hg}_{0,5\alpha}^{\circ})_i \rightarrow \quad (1) \\
 & \rightarrow (\text{Hg}_{1-\alpha+0,5\alpha}^x V_{0,5\alpha}^{\prime\prime})_{\text{Hg}} (\text{Te}_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{\prime\prime})_{\text{Te}} (\text{Hg}_{0,5\alpha}^{\circ})_i + 2\alpha e'.
 \end{aligned}$$

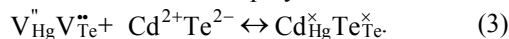
При надлишку халькогену відповідно:

$$\begin{aligned}
 & V_{\text{Hg}}^{\prime\prime} V_{\text{Te}}^{\prime\prime} + \text{Te}^{\circ} \rightarrow V_{\text{Hg}}^{\prime\prime} \text{Te}_{\text{Te}}^{\prime\prime}, \\
 & (1-\beta) \text{Hg}_{\text{Hg}}^x \text{Te}_{\text{Te}}^x + \beta (V_{\text{Hg}}^{\prime\prime} \text{Te}_{\text{Te}}^{\prime\prime}) \rightarrow \\
 & \rightarrow (\text{Hg}_{1-\beta}^x V_{\beta}^{\prime\prime})_{\text{Hg}} (\text{Te}_{1-\beta}^x \text{Te}_{\beta}^{\prime\prime})_{\text{Te}} \rightarrow \quad (2) \\
 & \rightarrow (\text{Hg}_{1-\beta}^x V_{\beta}^{\prime\prime})_{\text{Hg}} \text{Te}_{\text{Te}}^x + 2\beta h' \leftrightarrow \\
 & \leftrightarrow (\text{Hg}_{1-\beta}^x V_{0,5\beta}^{\prime\prime} V_{0,5\beta}^{\prime\prime})_{\text{Hg}} \text{Te}_{\text{Te}}^x + 1,5\beta h'.
 \end{aligned}$$

Де, α і β – відхилення від стехіометрії. При аналізі рівнянь (1), (2) видно, що електронний тип

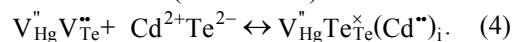
провідності телуриду меркурію пов'язаний із дефектами: $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ і $Hg_i^{\bullet\bullet}$, які утворюються за рахунок надлишкового меркурію, а дірковий – із дефектами: V_{Hg}^{\bullet} , $V_{Hg}^{\bullet\bullet}$, при надлишку телуру.

Утворення твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te$ може проходити, згідно уявлень кристалоквазіхімії, шляхом заповнення вакансій меркурію атомами кадмію (механізм А). Для цього випадку кристалоквазіхімічний кластер буде:



Крім того утворення твердого розчину може

відбуватися за механізмом вкорінення йонів кадмію в октаедричні порожнини щільної упаковки атомів телуру, які є вільними (механізм В):



Розглянемо суперпозицію легуючих кластерів (3), (4) з основною матрицею телуриду меркурію n-типу провідності рівняння (1) для різних механізмів утворення твердих розчинів.

Механізм (А):

$$(1-x) \left[\left(Hg_{1-\alpha+0,5\alpha}^{\bullet} V_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} \left(Te_{1-\alpha}^{\bullet} V_{\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Hg_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_i + 2\alpha e^{\bullet} \right] + x \left[Cd_{Hg}^{\bullet} Te_{Te}^{\bullet\bullet} \right] \rightarrow \\ \rightarrow \left(Hg_{(1-\alpha+0,5\alpha)(1-x)}^{\bullet} V_{0,5\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet} Cd_x^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} \left(Te_{(1-\alpha)(1-x)}^{\bullet} V_{\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet} Te_x^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Hg_{0,5\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet} \right)_i + 2\alpha(1-x)e^{\bullet} \quad (5)$$

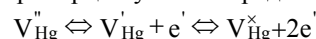
Механізм (В):

$$(1-x) \left[\left(Hg_{1-\alpha+0,5\alpha}^{\bullet} V_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} \left(Te_{1-\alpha}^{\bullet} V_{\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Hg_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet} \right)_i + 2\alpha e^{\bullet} \right] + x \left[V_{Hg}^{\bullet} Te_{Te}^{\bullet\bullet} (Cd^{\bullet\bullet})_i \right] \rightarrow \\ \rightarrow \left(Hg_{(1-\alpha+0,5\alpha)(1-x)}^{\bullet} V_{0,5\alpha(1-x)+x}^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} \left(Te_{(1-\alpha)(1-x)+x}^{\bullet} V_{\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet} \right)_{Te} \left(Hg_{0,5(1-x)}^{\bullet\bullet} Cd_x^{\bullet\bullet} \right)_i + 2\alpha(1-x)e^{\bullet} \quad (6)$$

Із рівнянь (5), (6) видно, що концентрація основних носіїв заряду – електронів зменшується на величину $(1-x)$, де x – мольна частка телуриду кадмію у твердому розчині $Cd_xHg_{1-x}Te$. При реалізації механізму заміщення (5) концентрація вакансій меркурію і міжвузлового атома меркурію, які відповідальні за n-тип провідності матеріалу зменшуються, так як $[(V_{\alpha}^{\bullet\bullet})_{Te}] > [(V_{\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet})_{Te}]$ і $[(Hg_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet})_i] > [(Hg_{0,5\alpha(1-x)}^{\bullet\bullet})_i]$. При цьому із збільшенням складу x лінійно збільшується концентрація нейтрального дефекту заміщення Cd_{Hg}^{\bullet} . У випадку проходження механізму заміщення (В) спостерігається аналогічне зменшення концентрації вакансій телуру $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ та вкорінених йонів $Hg_i^{\bullet\bullet}$ як і за механізмом А, але входження йонів Cd^{2+} в октаедричні порожнини оточені телуром

призводить до зростання вакансій меркурію у матеріалі: $[(V_{0,5\alpha}^{\bullet\bullet})_{Hg}] < [(V_{0,5\alpha(1-x)+x}^{\bullet\bullet})_{Hg}]$. І таке збільшення концентрації вакансій меркурію у матеріалі (6) якщо вони не будуть компенсуватися протилежними дефектами може призвести до зростання концентрації електронів у матеріалі.

При використанні р-HgTe як вихідного матеріалу для утворення твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te$ рівняння (2) кристалоквазіхімічні механізми А, В походять аналогічно як і в матеріалі (1) однак тут має місце диспропорціонування зарядженого дефекту:



Такий стан спричиняє збільшення концентрації нелокалізованих електронів, а отже і зменшення концентрації дірок.

Кристалоквазіхімічні рівняння утворення р- $Cd_xHg_{1-x}Te$ за механізмами заміщення (А) і вкорінення (В) приведено нижче.

Механізм (А):

$$(1-x) \left[\left(Hg_{1-\beta}^{\bullet} V_{0,5\beta}^{\bullet\bullet} V_{0,5\beta}^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} Te_{Te}^{\bullet} + 1,5\beta h^{\bullet} \right] + x \left[Cd_{Hg}^{\bullet} Te_{Te}^{\bullet\bullet} \right] \rightarrow \\ \rightarrow \left(Hg_{(1-\beta)(1-x)}^{\bullet} V_{0,5\beta(1-x)}^{\bullet\bullet} V_{0,5\beta(1-x)}^{\bullet\bullet} Cd_x^{\bullet\bullet} \right)_{Hg} Te_{Te}^{\bullet} + 1,5\beta(1-x)h^{\bullet} \quad (7)$$

Механізм (В):

$$(1-x) \left[\left(Hg_{1-\beta}^x V_{0,5\beta}^{\prime} V_{0,5\beta}^{\prime\prime} \right)_{Hg} Te_{Te}^x + 1,5\beta h^* \right] + x \left[V_{Hg}^{\prime} Te_{Te}^x (Cd^{\prime\prime})_i \right] \rightarrow$$

$$\rightarrow \left(Hg_{(1-\beta)(1-x)}^x V_{0,5\beta(1-x)}^{\prime} V_{0,5\beta(1-x)+x}^{\prime\prime} \right)_{Hg} Te_{Te}^x (Cd^{\prime\prime})_i + 1,5\beta(1-x)h^* \quad (8)$$

У випадку утворення твердого розчину за рівнянням (7) спостерігається зменшення концентрації дірок ($1,5\beta h^* > 1,5\beta(1-x)h^*$, $x < 1$), що пов'язано із перерозподілом вакансій між катіонною і аніонною підґратками. Водночас має місце і впровадження йонів Cd^{2+} в октаедричні порожнини щільної упаковки атомів телуру кристалічної структури $HgTe$ згідно рівняння (8).

III. Розрахунок концентрації точкових дефектів

Одержані кристалоквазіхімічні рівняння існування нестехіометричного $HgTe$ (1), (2) і твердих розчинів (5), (6), (7), (8) дають можливість розрахувати як концентрацію точкових дефектів у катіонній і аніонних підґратках так і вільних носіїв заряду (n , p).

Позначення α , β які використанні у кристалоквазіхімічних рівняннях (1), (2) визначають атомну частку відхилення від стехіометрії меркурію і телуру, а x в рівняннях (5-8) – мольну частку $CdTe$. Так як концентрацію дефектів і носіїв заряду природно виражати числом частинок в одиниці об'єму ($см^{-3}$) тому виразимо мольні частки концентрації дефектів в одиницях $см^{-3}$.

Згідно [15] концентрація частинок бінарної сполуки в $1 см^3$ визначається:

$$n = \frac{2\rho N_A}{M} \varepsilon, \quad (9)$$

де ρ – густина ($г\cdot см^{-3}$), $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ моль $^{-1}$, M – молярна маса ($г\cdot моль^{-1}$).

Враховуючи, що густину можна визначити через параметр елементарної комірки (а) [16] як

$$\rho = \frac{MZ}{N_A a^3}, \quad (10)$$

де Z – число структурних одиниць (молекул) в елементарній комірці ($Z = 4$). Для n остаточно отримаємо:

$$n = \frac{2Z}{a^3} \varepsilon. \quad (11)$$

Результати розрахунків наведено в табл. 1-4. Зауважимо, що у нашому випадку ε – це коефіцієнти в рівняннях (1), (2), (5), (6), (7) біля відповідних дефектів та вільних носіїв заряду.

Холлівська концентрація носіїв струму (n_H) визначається як різниця концентрацій вільних носіїв – електронів (n) і дірок (p)

$$n_H = n - p. \quad (12)$$

При утворенні твердого розчину $n-Cd_xHg_{1-x}Te$ за механізмом заміщення (А) рівняння

електронейтральності згідно (5) має вигляд:

$$\alpha(1-x)(V_{Te}^{\prime\prime}) + 0,5\alpha(1-x)(Hg_i^{\prime\prime}) = 0,5\alpha(1-x)(V_{Hg}^{\prime\prime}) + n, \quad (13)$$

де $n = 2\alpha(1-x)e^{\prime}$.

Тоді

$$n_H = \alpha(1-x)(V_{Te}^{\prime\prime}) + 0,5\alpha(1-x)(Hg_i^{\prime\prime}) - 0,5\alpha(1-x)(V_{Hg}^{\prime\prime}).$$

Для механізму В відповідно:

$$\alpha(1-x)(V_{Te}^{\prime\prime}) + 0,5\alpha(1-x)(Hg_i^{\prime\prime}) + x(Cd_i^{\prime\prime}) =$$

$$= 0,5\alpha(1-x) + x(V_{Hg}^{\prime\prime}) + n, \quad (14)$$

де $n = 2\alpha(1-x)e^{\prime}$.

$$\text{Тоді } n_H = \alpha(1-x)(V_{Te}^{\prime\prime}) + 0,5\alpha(1-x)(Hg_i^{\prime\prime}) + x(Cd_i^{\prime\prime}) -$$

$$- 0,5\alpha(1-x) + x(V_{Hg}^{\prime\prime}).$$

Рівняння електронейтральності для твердого розчину $p-Cd_xHg_{1-x}Te$ за механізмом заміщення:

$$0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime}) + 0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime\prime}) = p, \quad (15)$$

де $p = 1,5\beta(1-x)h^{\prime}$.

$$\text{Тоді } n_H = 0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime}) + 0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime\prime}).$$

Для механізму В відповідно:

$$0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime}) + 0,5\beta(1-x) + x(V_{Hg}^{\prime\prime}) = x(Cd_i^{\prime\prime}) + p,$$

де $p = 1,5\beta(1-x)h^{\prime}$.

Тоді

$$n_H = 0,5\beta(1-x)(V_{Hg}^{\prime}) + 0,5\beta(1-x) + x(V_{Hg}^{\prime\prime}) - x(Cd_i^{\prime\prime}).$$

IV. Аналіз результатів дослідження

Розраховані нами концентрації точкових дефектів і носіїв струму в n - і $p-Cd_xHg_{1-x}Te$ дають можливість як кількісно так і якісно зробити аналіз дефектної підсистеми у матеріалах.

Так, зокрема, при утворенні твердого розчину $n-Cd_xHg_{1-x}Te$ спостерігається тенденція до зменшення концентрації вільних носіїв n і холлівської концентрації n_H із збільшенням вмісту $CdTe$ як за механізмом заміщення (А) так і вкорінення (В) (див. табл. 1, 2). Але у матеріалі (6), утворення твердого розчину за механізмом вкорінення (табл. 2), із збільшенням складу (x) зростає концентрація дефекту вкорінення ($Cd_i^{\prime\prime}$), що призводить до зростання параметра ґратки (рис. 3) із ростом вмісту $CdTe$. При цьому відповідальними за n -тип провідності матеріалів (5), (6) є вакансії телуру в аніонній підґратці. Ефективність аніонних вакансій зростає із збільшенням над стехіометрії меркурію (α) і зменшується із ростом вмісту $CdTe$ (табл. 1,2).

Для твердого розчину $p-Cd_xHg_{1-x}Te$ характерна

Таблиця 1

Розраховані концентрації дефектів та носіїв заряду у твердому розчині n-Cd_xHg_{1-x}Te для механізму заміщення (А)

$\alpha, \%$	$a, \text{нм}$	x	$V_{\text{Te}}^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$\text{Hg}_i^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$V_{\text{Hg}}^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$n, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$n_{\text{H}}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$
0,004	0,646236	0,1	21,3427	10,6713	10,6713	21,3427	21,3427
	0,646327	0,15	20,1485	10,0742	10,0742	20,1485	20,1485
	0,646414	0,2	18,9556	9,4778	9,4778	18,9556	18,9556
	0,646635	0,3	16,5692	8,28458	8,28458	16,5692	16,5692
	0,646853	0,4	14,1878	7,09389	7,09389	14,1878	14,1878
	0,647289	0,6	9,43942	4,71971	4,71971	9,43942	9,43942
0,001	0,646236	0,1	5,33567	2,66784	2,66784	5,33567	5,33567
	0,646327	0,15	5,03712	2,51856	2,51856	5,03712	5,03712
	0,646414	0,2	4,7389	2,36945	2,36945	4,7389	4,7389
	0,646635	0,3	4,14229	2,07114	2,07114	4,14229	4,14229
	0,646853	0,4	3,54694	1,77347	1,77347	3,54694	3,54694
	0,647289	0,6	2,35985	1,17993	1,17993	2,35985	2,35985

Таблиця 2

Розраховані концентрації дефектів та носіїв заряду у твердому розчині n-Cd_xHg_{1-x}Te для механізму вкорінення (В)

$\alpha, \%$	$a, \text{нм}$	x	$V_{\text{Te}}^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$\text{Cd}_i^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{21}, \text{см}^{-3}$	$\text{Hg}_i^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$V_{\text{Hg}}^{\bullet\bullet}, \cdot 10^{21}, \text{см}^{-3}$	$n, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$	$n_{\text{H}}, \cdot 10^{19}, \text{см}^{-3}$
0,004	0,646236	0,1	21,3427	5,92852	10,6713	3,07098	21,3427	21,3427
	0,646327	0,15	20,1485	8,88903	10,0742	4,54526	20,1485	20,1485
	0,646414	0,2	18,9556	11,8473	9,4778	6,01841	18,9556	18,9556
	0,646635	0,3	16,5692	17,7527	8,28458	8,95918	16,5692	16,5692
	0,646853	0,4	14,1878	23,6463	7,09389	11,8941	14,1878	14,1878
	0,647289	0,6	9,43942	35,3978	4,71971	17,7461	9,43942	9,43942
0,001	0,646236	0,1	5,33567	5,92852	2,66784	2,99094	5,33567	5,33567
	0,646327	0,15	5,03712	8,88903	2,51856	4,4697	5,03712	5,03712
	0,646414	0,2	4,7389	11,8473	2,36945	5,94732	4,7389	4,7389
	0,646635	0,3	4,14229	17,7527	2,07114	8,89705	4,14229	4,14229
	0,646853	0,4	3,54694	23,6463	1,77347	11,8409	3,54694	3,54694
	0,647289	0,6	2,35985	35,3978	1,17993	17,7107	2,35985	2,35985

аналогічна зміна концентрації носіїв струму із збільшенням вмісту CdTe. Тільки за діркову провідність матеріалів (7), (8) відповідальними є вакансії ртуті (V_{Hg}^{\bullet} , V_{Hg}^{\bullet}). Із збільшенням вмісту CdTe у матеріалі p-Cd_xHg_{1-x}Te йони кадмію спочатку будуть заповнювати вакансії V_{Hg}^{\bullet} , концентрація яких із ростом (x) буде зменшуватися (табл. 3, 4). При наступному зростанні x ($x > 0,4$) йони кадмію можуть вкорінюватися в октаедричні порожнини оточення телуру рівняння (8).

Необхідно зазначити, що одержані результати концентрації дефектів і носіїв заряду (табл. 1-4) не враховують можливі механізми компенсації між

власними дефектами і неконтрольованими домішками у матеріалах, а також можливі варіанти утворення фаз іншої природи

V. Висновки

1. Запропоновано кристалоквазіхімічні рівняння твердих розчинів n-HgTe-CdTe для механізмів заміщення кадмієм вакансій ртуті і його вкоріненням в октаедричні порожнини щільної упаковки атомів телуру структури HgTe.

3. На основі кристалоквазіхімічних рівнянь виконано розрахунок концентрації атомних дефектів, вільних носіїв і холлівської концентрації у твердих

Таблиця 3

Розраховані концентрації дефектів та носіїв заряду у твердому розчині p-Cd_xHg_{1-x}Te для механізму заміщення (А)

β , %	a , нм	x	V'_{Hg} , 10^{19} , см ⁻³	V''_{Hg} , $\cdot 10^{19}$, см ⁻³	ρ , $\cdot 10^{19}$, см ⁻³	n_{h} , $\cdot 10^{19}$, см ⁻³
0,004	0,646245	0,1	5,33545	10,6709	16,0063	16,0063
	0,64634	0,15	5,03681	10,0736	15,1104	15,1104
	0,646421	0,2	4,73875	9,4775	14,2162	14,2162
	0,646664	0,3	4,14173	8,28346	12,4252	12,4252
	0,646872	0,4	3,54663	7,09326	10,6399	10,6399
	0,647308	0,6	2,35965	4,71929	7,07894	7,07894
0,001	0,646245	0,1	1,33386	2,66772	4,00159	4,00159
	0,64634	0,15	1,2592	2,51841	3,77761	3,77761
	0,646421	0,2	1,18469	2,36937	3,55406	3,55406
	0,646664	0,3	1,03543	2,07087	3,1063	3,1063
	0,646872	0,4	0,886658	1,77332	2,65997	2,65997
	0,647308	0,6	0,589912	1,17982	1,76974	1,76974

Таблиця 4

Розраховані концентрації дефектів та носіїв заряду у твердому розчині p-Cd_xHg_{1-x}Te для механізму заміщення (В)

β , %	a , нм	x	V'_{Hg} , 10^{19} , см ⁻³	V''_{Hg} , $\cdot 10^{21}$, см ⁻³	Cd^{2+} , $\cdot 10^{21}$, см ⁻³	ρ , $\cdot 10^{19}$, см ⁻³	n_{h} , $\cdot 10^{19}$, см ⁻³
0,004	0,646245	0,1	5,335	6,03498	5,92828	16,0063	16,0063
	0,64634	0,15	5,037	8,98923	8,88849	15,1104	15,1104
	0,646421	0,2	4,739	11,9416	11,8469	14,2162	14,2162
	0,646664	0,3	4,142	17,8331	17,7503	12,4252	12,4252
	0,646872	0,4	3,547	23,7151	23,6442	10,6399	10,6399
	0,647308	0,6	2,36	35,4419	35,3947	7,07894	7,07894
0,001	0,646245	0,1	1,334	5,95495	5,92828	4,00159	4,00159
	0,64634	0,15	1,25	8,91368	8,88849	3,77761	3,77761
	0,646421	0,2	1,185	11,8706	11,8469	3,55406	3,55406
	0,646664	0,3	1,035	17,771	17,7503	3,1063	3,1063
	0,646872	0,4	0,8867	23,6619	23,6442	2,65997	2,65997

розчинах n- і p-Cd_xHg_{1-x}Te для різних механізмів їх утворення.

Межиловська Л.Й. – кандидат фізико-математичних наук, доцент;
Фрейк Д.М. – заслужений діяч науки і техніки України, доктор хімічних наук, професор, директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри

фізики і хімії твердого тіла;
Жуковські П.В. – доктор наук, асоційований професор;
Дмитрів А.М. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] М.А. Kinch. J. Elektron. Mater., **29**, 809 (2000).
 [2] К.Д. Мынбаев, В.И Иванов-Омский. Модифицирование свойств Hg_{1-x}Cd_xTe низкоэнергетическими ионами (обзор) // *Физика и техника полупроводников*, **37**(10), сс. 1153-1179 (2003).
 [3] Н. Widemeier, C.L. Chang. The Pressure-Temperature Phase Diagram of the HgTe System from Dynamic Mass Loss Measurement // *J. Less-Common Met*, **137**(1/2), pp. 375-378 (1988).

- [4] R.F. Brebrick, A.J. Strauss. Vapor-Crystal Equilibrium and Deviation from Stoichiometry in HgTe System // *J. Phys. Chem. Solids*, **26**(10), pp. 989-996 (1965).
- [5] В.М. Глазов, Л.М. Павлова. Границы насыщения твердых растворов компонентов в теллуриде ртути // *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, **30**(5), сс. 635-638 (1994).
- [6] Н.Х. Абрикосов, В.Ф. Банкина, Л.В. Порецкая, Е.В. Скундова, С.Н. Чижевская. *Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе*. М., "Наука", с. 220 (1975).
- [7] Н.Н. Берченко, В.Е. Кревс, В.Г. Средин. *Полупроводниковые твердые растворы и их применение*. М.: Воениздат, с. 208 (1982).
- [8] И.В. Курило, С.П. Павлишин, С.Н. Бекеша, Г.А. Ильчук, Ю.Г. Ахроменко. Формы роста кристаллов CdHgTe, полученных методом химических транспортных реакций // *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, **23**(2), сс. 228-232 (1987).
- [9] П.В. Бирюлин, В.И. Кошелева, В.И. Туринов. Исследование электрофизических свойств Cd_xHg_{1-x}Te // *Физика и техника полупроводников*, **38**(7), сс. 784-791 (2004).
- [10] D. Long, J. Schmit. Semiconductors and semimetals // *London, Acad. Press*, **5**(5), p. 184 (1970).
- [11] J. Blair, R. Newman. Metallurgy of elemental and compound semiconductors // *Interc. Publ.*, **12**(5), p. 393 (1961).
- [12] V. Ray, P.M. Spencer. *Phys. Stat. Sol.*, **22**(2), p. 371 (1967).
- [13] Физика и химия соединений A²B⁶ / Перев. Под ред. С.А. Медведева. Мир, М. (1970).
- [14] С.С. Лисняк. Кристаллоквазихимическая модель исследований в химии твердого тела // *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, **29**(9), сс. 1913-1917 (1992).
- [15] Ф. Крегер. *Химия несовершенных кристаллов*. Мир, М. 554 с. (1972).
- [16] Б.Ф. Ормонт. *Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников*. Высшая школа, М., 528 с. (1982).

L. Mezhylovska, A. Dmytriv, D. Freik, P. Zukowski*

Point Defects of Solid Solution Cd_xHg_{1-x}Te

'Vasyl Stefanyk' Prekarpathian National University,
201, Galytska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua
*Lyublin Technical University, 20-618 Lyublin, Poland
E-mail: mario@elektron.pol.lublin.pl

The crystal-quasi-chemical reaction of solid solution n- and p-HgTe-CdTe formation for substitution mechanisms of mercury vacancy by cadmium and their intercalation on octahedral space of tellurium areas. The defect concentration and concentration of charge carriers from cadmium tellurides contents are calculated.