

УДК: 548.4

ISSN 1729-4428

О.О. Коров'янко¹, Ю.П. Гнатенко², П.М. Фочук¹, О.Е. Панчук¹, П.М. Буківський² Особливості дефектної структури та властивості монокристалів CdTe<In> різного стехіометричного складу

¹Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
кафедра неорганічної хімії, вул. Коцюбинського 2, м. Чернівці, 58012,
²Інститут фізики НАН України, пр. Науки, 46, м. Київ, 03028

Вивчено вплив стехіометрії на структуру точкових дефектів (ТД) монокристалів CdTe<In> шляхом дослідження спектрів низькотемпературної фотолюмінесценції (ФЛ) зразків, відпалених системно при різних відхиленнях від стехіометрії. Показано, що основні смуги, виявлені у спектрах фотолюмінесценції, пов'язані з наявністю в цих кристалах комплексів точкових дефектів: $(\text{In}_{\text{Cd}}^+ \text{V}_{\text{Cd}}^{2-})^-$ та $(2\text{In}_{\text{Cd}}^+ \text{V}_{\text{Cd}}^{2-})^0$. Нейтральні комплекси переважають в кристалах, відпалених в атмосфері пари кадмію, іонізовані є характерними для зразків, відпалених в атмосфері телуру. Проведено моделювання структури ТД за рівняннями квазіхімічних реакцій дефектоутворення при високих температурах, а також для ситуації в кристалі після умовного гартування до 0 К.

Ключові слова: фотолюмінесценція, телурид кадмію, квазіхімічні реакції, легування.

Стаття постуила до редакції 25.11.2004; прийнята до друку 30.05.2005.

I. Вступ

Необхідність отримання монокристалів CdTe з потрібними фізико-хімічними властивостями вимагає чіткої інформації про спектр точкових дефектів даного матеріалу. Дослідження оптичних властивостей спеціально нелегованих та легованих конкретними домішками напівпровідникових монокристалів дозволяють провести ідентифікацію ТД та дослідити процеси зміни їхніх станів в залежності від умов вирощування, процесів високотемпературного відпалу та впливу зовнішніх чинників. Роботи [1-6], в яких досліджувались спектри фотолюмінесценції кристалів CdTe<In>, не давали можливості однозначно встановити вплив домішки індію на спектри ФЛ внаслідок відсутності достатньої інформації про умови отримання, відпалу та легування цих кристалів, а також кількості легуючої домішки у відповідних зразках.

З метою отримання інформації про природу домішкових дефектів кристалу Джілес [1] досліджено монокристали CdTe<In>, вирощені методом Бріджмена ($[\text{In}] = 10^{17}$ ат/см³) та відпалені під тиском пари кадмію (P_{Cd}) при 1173 К протягом 1,5 год., 24 год., 120 год. В спектрах ФЛ кристалів, отриманих при таких умовах, присутня лінія 1,5834 еВ, яка не пов'язана з проявом екситонних станів, та лінія 1,4540 еВ, що зумовлена участю в рекомбінаційних процесах глибоких центрів – комплексів точкових дефектів типу $(\text{V}_{\text{Cd}}^{2-} \text{In}_{\text{Cd}}^+)^-$.

Зроблено висновок, що довготривалий відпал кристалів атмосфері пари кадмію зумовлює зміщення найбільш інтенсивної смуги вільної екситонної рекомбінації на спектрах ФЛ від значень 1,606-1,608 до 1,622 еВ. Обговорено вплив вмісту власних донорів Cd_i^+ в кристалах кадмій телуриду на властивості матеріалу.

В роботах Бассані [2,3] детально вивчено люмінесцентні характеристики кристалів CdTe<In>, вирощених методом молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ). У спектрах ФЛ зразків CdTe з $[\text{In}] = 10^{17}$ см⁻³ відзначено дві домішкові смуги: одна – з енергією 1,45 еВ, що відповідає за утворення асоціату виду $(\text{In}_{\text{Cd}}\text{V}_{\text{Cd}})$, та друга – з енергією 1,5857 еВ – так звана W-лінія, що характерна для напівізолюючого CdTe. В спектрах сильнолегованих кристалів з максимальною концентрацією домішки $[\text{In}] = 5 \cdot 10^{18}$ см⁻³ домінуючою є смуга з енергією 1,45 еВ, що характерна для асоціату $(\text{In}_{\text{Cd}}\text{V}_{\text{Cd}})$.

Результати іншого характеру отримано для кристалів CdTe<In>, вирощених також методом МПЕ, в роботах Ворзеха [4,5]. Аналізуючи ефект Зеємана для зв'язаних екситонів автори показали, що отримана нова С-лінія при 1,5842 еВ пов'язана з комплексом точкових дефектів типу $\text{In}_{\text{Cd}}\text{V}_{\text{Cd}}\text{In}_{\text{Pcd}}$. Але дана лінія у спектрі ФЛ зникає після декількох місяців зберігання.

У роботі Гурумуті [6] проаналізовано спектри ФЛ CdTe<In> до та після відпалу у вакуумі, атмосфері пари Cd або Te₂. Показано, що після

відпалу в атмосфері пари телуру зростає інтенсивність лінії 1,528 eV, яка характеризує комплекс із участю вакансій Cd. Проте, недостатня точність визначення авторами енергетичного положення смуг, ускладнює можливість співставлення цих результатів з даними інших авторів [1-5].

Отже, загальний аналіз опублікованих результатів щодо спектрів фотолюмінесценції кристалів CdTe<In> вказує на їх неоднозначність: в ряді випадків відсутні точні відомості про термодинамічні умови та тривалість відпалу, вміст домішки в кристалах. Опубліковані результати оптичних досліджень дають чітку характеристику положення окремих ліній спектрів з можливою їх ідентифікацією, але практично відсутні системні порівняння кількісної зміни відносної інтенсивності тих чи інших ліній залежно від стехіометричних умов відпалу чи концентрації легуючої домішки.

Інформація, отримана шляхом дослідження спектрів ФЛ, поруч з іншими експериментальними дослідженнями ДС матеріалу, є важливою для визначення оптимальних умов вирощування кристалів на основі CdTe в якості матеріалів для детекторів, приладів ІЧ оптики, оптоелектронних пристроїв. Адже, виходячи із форми смуг ФЛ, їх енергетичного положення та відносної інтенсивності можна встановити прояв в спектрах того чи іншого дефекту. При проведенні систематичних досліджень оптичних властивостей матеріалу можна кількісно оцінити зміни концентрації дефектів в кристалі залежно від вмісту домішки та стехіометрії. Окрім того, цей метод дає інформацію про нейтральні домішкові центри, які не можна виявити шляхом електричних вимірювань, зокрема, ефекту Холла. Огляд таких комплексних досліджень оптичних та електрофізичних властивостей компенсованих кристалів CdTe<Cl> [7].

Мета даної роботи полягала в дослідженні впливу умов відпалу при різному відхиленні від

стехіометрії на ДС відпалених та загартованих кристалів CdTe<In>.

II. Методика експерименту

Монокристали CdTe<In> вирощували методом Бріджмена. Легування здійснювали під час вирощування монокристалів, розподіл домішки по злитку визначали з урахуванням відомого коефіцієнту розподілу [8]. Вміст індію в кристалах був в межах $(2-7) \cdot 10^{17}$ ат/см³. Відпали для регулювання стехіометрії кристалів проводилися при 800°C на протязі 6 годин в двозонній печі в атмосфері пари Cd, Te₂ чи в вакуумі, після чого ампули охолоджувалися двома способами: повільно або швидко (гартування у воді). Характеристики умов відпалу, найбільш характерні лінії спектрів ФЛ та значення відносної інтенсивності для окремих досліджуваних кристалів наведені в таблиці.

Вимірювання спектрів екситонного відбивання та ФЛ проводилися за допомогою спектрометра СДЛ-1. Для збудження люмінесценції використовували аргоновий лазер ЛГН-404А.

Комп'ютерне моделювання дефектної структури CdTe<In> проведене шляхом розв'язання системи "n" нелінійних рівнянь квазіхімічних реакцій дефектоутворення (КХРД) з "n" невідомими методом половинного ділення [9]. ДС кристалу при різних термодинамічних умовах (T, P_{компл.}) представлена в рамках теорії Крегера [10].

Розрахунок ДС матеріалу після умовного заморожування CdTe до 0 К проведений на основі механізму перерозподілу носіїв заряду, показаному на рис. 1. Алгоритм відігріву загартованої системи до 300 К [11] складений на основі розрахунку положення рівня Фермі із врахуванням всіх потенційних носіїв заряду в кристалі.

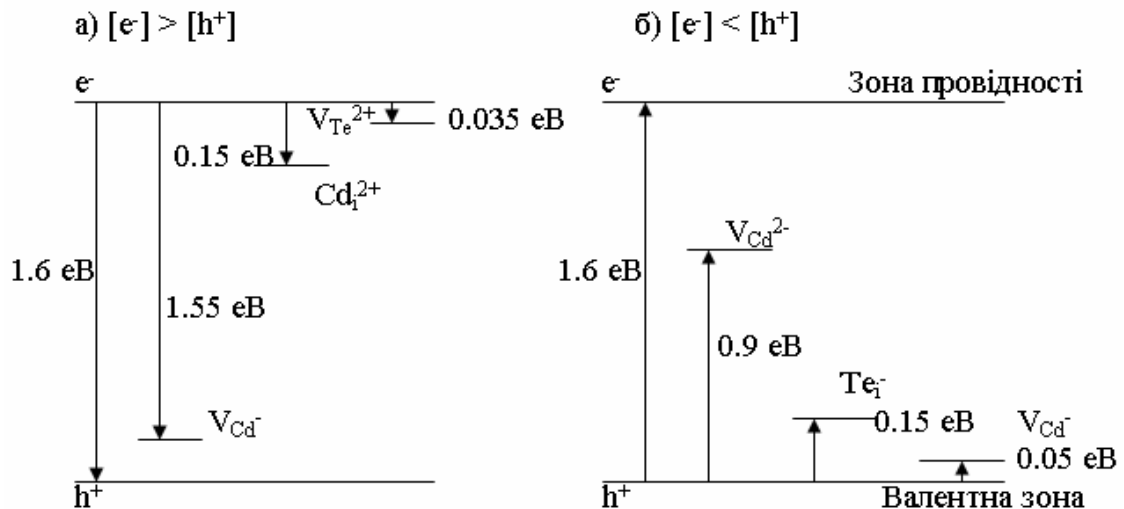


Рис. 1. Схема заморожування ДС CdTe при охолодженні кристалу до 0 К. Розміщення рівнів в забороненій зоні згідно [15].

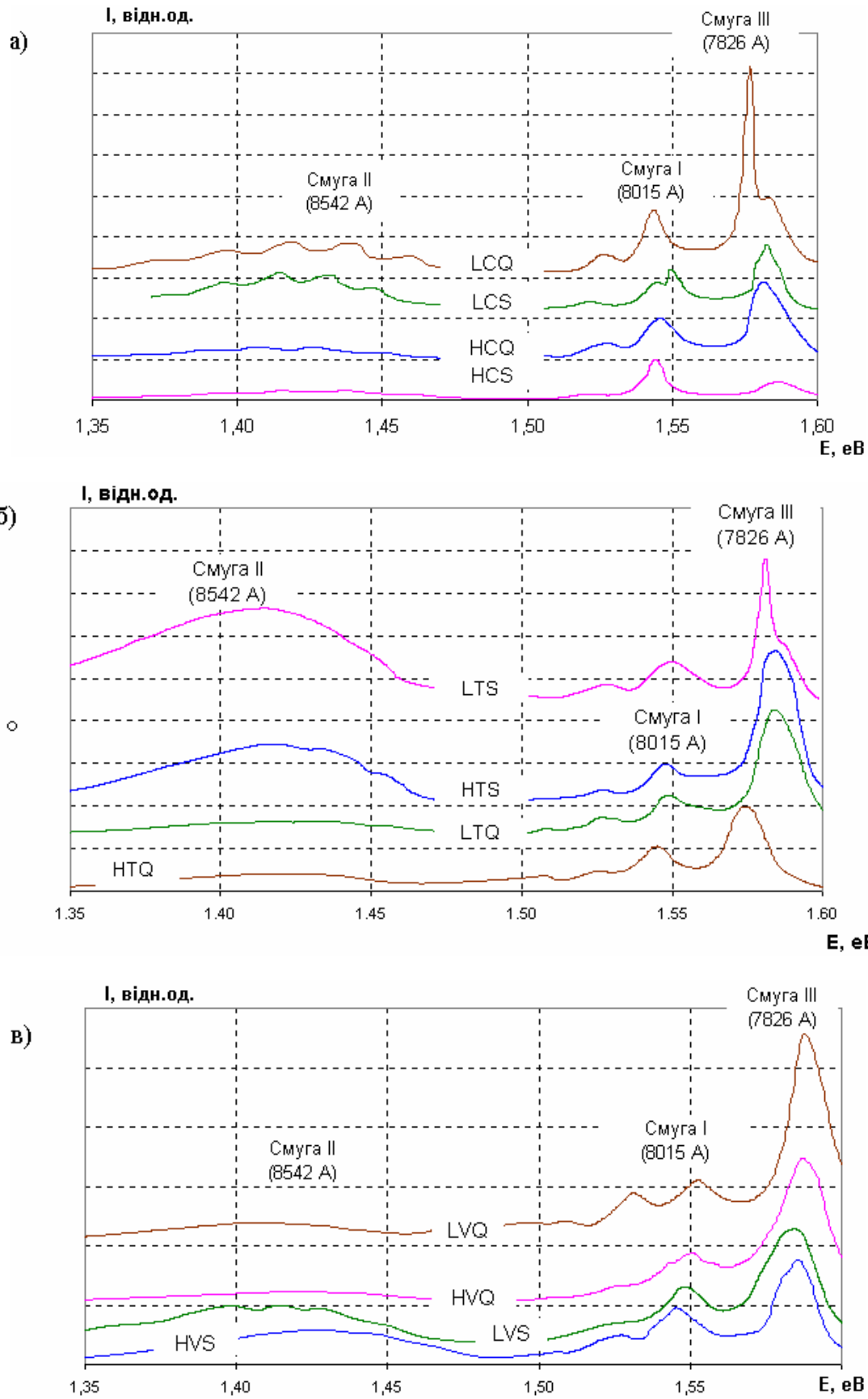


Рис. 2. Спектри ФЛ кристалів CdTe<In>:

а) відпалених в атмосфері Cd; б) відпалених в атмосфері пари Te₂; в) відпалених у вакуумі.

III. Результати досліджень та їх аналіз

Результати вимірювань спектрів ФЛ досліджуваних зразків показують, що в спектрах ФЛ монокристалів CdTe<In> простежуються три групи смуг: в області 7826 Å, 8015 Å та 8542 Å (рис. 2). Відносна інтенсивність ліній залежить від умов відпалу кристалів та від концентрації домішки. З врахуванням відомих літературних даних виявлені смуги у спектрах ФЛ охарактеризовані наступним чином.

Смуга I (8015 Å) зумовлена переходами із зони провідності на акцепторний рівень, обумовлений однократно іонізованою вакансією Cd (V_{Cd}^-). Ця лінія спостерігалась раніше в роботі [6]. Автори вказують на посилення її інтенсивності після відпалу в атмосфері телуру, і це зрозуміло з розгляду тискової залежності ДС матеріалу (рис. 3). Адже внесок однократно іонізованих вакансій V_{Cd} істотний тільки при відпалі в атмосфері парів телуру.

Смуга II (8542 Å), як прийнято вважати, зумовлена переходами з донорного рівня на акцепторний комплекс типу $(V_{Cd}^{2-}In_{Cd}^+)^-$. Ця смуга спостерігалась у роботах [1-3]. Всі автори вказують на існування глибокого центру – асоціату вакансійного типу. В роботі [6] зафіксували посилення смуги II після відпалу під тиском пари кадмію (P_{Cd}), що не узгоджується з теорією Крегера [9-11]. Як видно з рис. 2, смуга II в ряді випадків характеризується серією LO фононних повторень (з енергією повздовжнього LO оптичного фонуна 21,2 MeV). Детальне вивчення таких смуг може дати інформацію про оптичну якість кристалів.

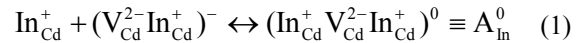
Смуга III (7826 Å) є характерною для всіх досліджуваних зразків і зумовлена наявністю в кристалі нейтральних комплексів типу:

$(In_{Cd}^+ V_{Cd}^{2-} In_{Cd}^+)^0$. Автори робіт [5,6] отримали смугу з енергією 1,5842 eV (7826 Å) і передбачали можливість існування такого асоціату. Цю смугу також спостерігали і в інших дослідженнях спектрів ФЛ [1,2,12] і охарактеризували її як W-лінію напівізолюючого CdTe. Смуга III спостерігається в спектрах фотолюмінесценції всіх досліджуваних кристалів.

Для окремих кристалів з низьким вмістом індію, відпалених в атмосфері телуру й повільно охолоджених, а також для відпалених в атмосфері кадмію та загартованих, виявлено лінію з енергією 1,5773 eV (7860 Å), що характерна для спектрів ФЛ кристалів CdTe високої чистоти [13]. Наявність цієї лінії може бути характеристикою високої оптичної якості відповідних кристалів. Додатковим підтвердженням цього є досить слабка інтенсивність ФЛ в області 8610 Å (1,44 eV), що пов'язано з проявом комплексів типу $(V_{Cd}^{2-}In_{Cd}^+)^-$. Як показано в роботі [14], інтенсивність даної смуги визначається густиною дислокацій в кристалі. Відповідно, для кристалів НТQ густина дислокацій є досить низькою.

Отже, основні смуги, що спостерігаються у спектрах фотолюмінесценції, пов'язані з однократно іонізованими вакансіями кадмію, акцепторним комплексом типу $(V_{Cd}^{2-}In_{Cd}^+)^- \equiv A_{In}^-$ та нейтральним комплексом $(In_{Cd}^+ V_{Cd}^{2-} In_{Cd}^+)^0 \equiv A_{In}^0$.

Утворення нейтрального комплексу в CdTe<In> можна представити наступним чином:



З рівняння 1 видно, що зі збільшенням загального вмісту домішки в кристалі та при його охолодженні концентрація нейтрального комплексу A_{In}^0 буде зростати. В наших дослідженнях така залежність не

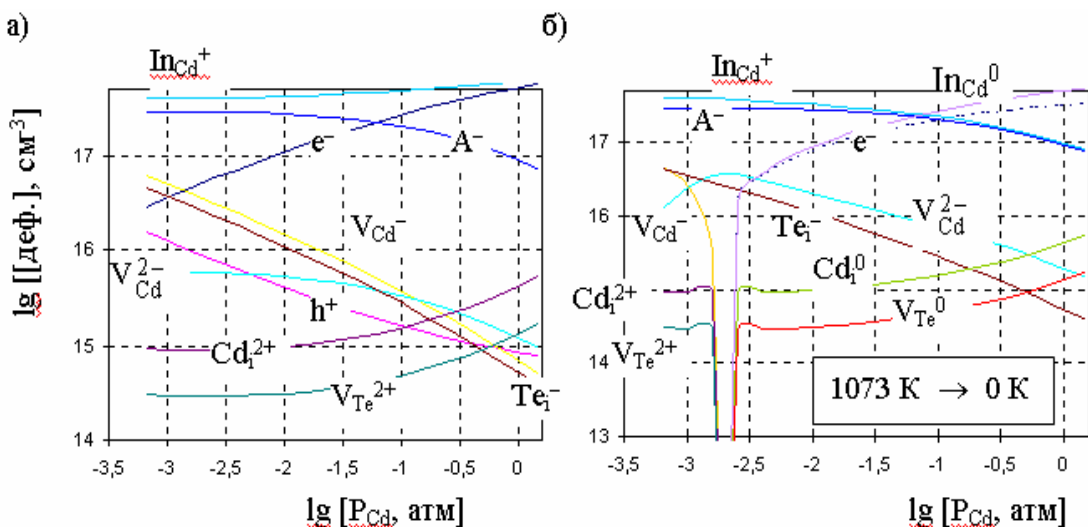


Рис. 3. Спектр ТД в CdTe+7×10¹⁷ см⁻³ In як функція відхилення від стехіометрії: а) ВТРД при 1073 К, б) ситуація після гартування від 1073 К до 0 К. Пунктир – [e⁻] після відіграу до 300 К.

Таблиця 1

Характеристика зразків CdTe<In> та відносні інтенсивності основних ліній спектрів низькотемпературної ФЛ

№	Шифр зразка	Атмосфера відпалу $t=800^{\circ}\text{C}$ $\tau=6$ год,	Тип охолодж.	Вміст In, cm^{-3}	Основні лінії спектрів та їх інтенсивність				
					I (V_{Cd})		II ($\text{In}_{\text{Cd}}^{+} V_{\text{Cd}}^{2-}$)	III ($2\text{In}_{\text{Cd}}^{+} V_{\text{Cd}}^{2-}$) ^о	$\frac{I(A_{\text{In}}^{-})}{I(A_{\text{Cd}}^{0})}$
					$\lambda, \text{\AA}$	8015	8542	7826	
					E, eB	1,5468	1,4514	1,5842	
1	LCS	Cd	пов.	$2 \cdot 10^{17}$	1	0,9	1,6	0,56	
2	HCS	Cd	пов.	$7 \cdot 10^{17}$	1	0,2	0,5	0,4	
3	LCQ	Cd	шв.	$2 \cdot 10^{17}$	1	0,2	1,9	0,1	
4	HCQ	Cd	шв.	$7 \cdot 10^{17}$	1	0,3	1,9	0,16	
5	LTS	Te ₂	пов.	$2 \cdot 10^{17}$	1	2,1	1,2	1,75	
6	HTS	Te ₂	пов.	$7 \cdot 10^{17}$	1	1,5	3,8	0,39	
7	LTQ	Te ₂	шв.	$2 \cdot 10^{17}$	1	0,6	3,0	0,2	
8	HTQ	Te ₂	шв.	$7 \cdot 10^{17}$	1	0,2	2,0	1	
9	LVS	Вакуум	пов.	$2 \cdot 10^{17}$	1	0,7	2,0	0,35	
10	HVS	Вакуум	пов.	$7 \cdot 10^{17}$	1	0,6	1,8	0,33	
11	LVQ	Вакуум	шв.	$2 \cdot 10^{17}$	1	0,2	3,6	0,75	
12	HVQ	Вакуум	шв.	$7 \cdot 10^{17}$	1	0,3	2,5	0,12	

спостерігалася внаслідок того, що концентрація In для досліджуваних зразків була майже однаковою. В [11] представлено результати аналогічних досліджень електрофізичних властивостей кристалів CdTe<Ga> та CdTe<In> при кімнатних температурах, побудовано моделі структури точкових дефектів в кристалі після умовного гартування матеріалу до 0 K та наступного відігріву до 300 K.

На рис. 3 показано залежність спектру ТД в CdTe<In> від P_{Cd} при 1073 K, де частина “а” відображає спектр ТД при умовах високотемпературної рівноваги дефектів (ВТРД), а частина “б” – після миттєвого гартування від високої температури до 0 K (на ньому не показані асоціати A_{In}^0 , оскільки їх концентрацію не вдалося обчислити внаслідок відсутності термодинамічних параметрів процесу їх утворення). Пунктиром на рисунку моделі загартованої системи нанесено концентрації електронів після відігріву цих кристалів від 0 до 300 K. Розраховані значення концентрації носіїв заряду в умовах високотемпературної рівноваги ТД задовільно узгоджуються з результатами досліджень електрофізичних властивостей відповідних зразків [9,11]. Як видно (рис. 3), при високотемпературній рівновазі дефектів та максимальному P_{Cd} [e⁻] практично дорівнює вмісту донора In (лише незначна частина останнього компенсована індієвим асоціатом A_{In}^{-}). Інші ТД практично не впливають на спектр дефектів (їх вміст $< 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Чітко спостерігається подавлення концентрації власних донорів (Cd_i^{2+} , $\text{V}_{\text{Te}}^{2+}$) легуючим донором $\text{In}_{\text{Cd}}^{+}$. При 0 K електрони й дірки повністю рекомбінували, решта електронів зайняли наявні незаповнені акцепторні рівні, а залишок носіїв заряду локалізувався на наймілкіших донорах – центрах $\text{In}_{\text{Cd}}^{+}$, перетворивши їх в нейтральні дефекти. Електронейтральність кристалу забезпечується апроксимованим рівнянням

електронейтральності: $[\text{In}_{\text{Cd}}^{+}] \approx [(\text{V}_{\text{Cd}}^{2-} \text{In}_{\text{Cd}}^{+})^{-}]$, або $[\text{D}^{+}] \approx [\text{A}_{\text{In}}^{-}]$.

Після відпалу в умовах конгруентної сублімації (вакуум), на відміну від чистого кристалу, в матеріалі, легуючому індієм, спектр дефектів змінюється мало. Так, в умовах ВТРД [e⁻], хоча й понижена порівняно з умовами насичення кадмієм, але все ж залишається високою. Проте тут, незважаючи на домінуючу майже повну домішкову самокомпенсацію, концентрація дірок приблизно на порядок нижча за [e⁻], а з власних ТД домінуючими є, крім електронів, ще й центри Te_i^{-} . Гартування такого спектру дефектів до 0 K приводить до ще повнішої домішкової самокомпенсації, а залишок некомпенсованих донорів індію урівноважується дефектами $\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}$ та Te_i^{-} . При цьому концентрація нейтральних донорів індію має сильну тенденцію до зменшення при зниженні тиску пари кадмію P_{Cd} .

Аналіз цієї моделі структури точкових дефектів, що розрахована для відповідних умов відпалу (рис. 3), показує, що при відпалі CdTe<In> в атмосфері максимальних значень P_{Cd} отриманий матеріал містить значну кількість іонізованої домішки, A_{In}^{-} , а внесок вільних $\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}$ при цих умовах неістотний.

Із зменшенням P_{Cd} зростає внесок вакансій кадмію у ДС матеріалу. Одночасно зростає концентрація асоціатів і стає співмірною з $[\text{In}_{\text{Cd}}^{+}]$. Тому, для кристалів, відпалених у вакуумі, очікується підвищення вмісту A_{In}^{-} , що повинно би привести, згідно з (1) до зростання вмісту A_{In}^0 (див. табл. 1 значення відношення інтенсивностей $I(A_{\text{In}}^{-})/I(A_{\text{In}}^0)$ для зразків LCS, LVS). Для області насичення телуrom (мінімальний P_{Cd}) концентрація асоціатів A_{In}^{-} практично не змінюється порівняно з

умовами відпалу у вакуумі.

Щодо залежності інтенсивності окремих смуг ФЛ від стехіометричного складу зразків, то тут простежується, на наш погляд, чітка залежність. Для кількісної порівняльної оцінки інтенсивностей смуг домішкових комплексів у таблиці наводяться відношення інтенсивностей $I(A_{\text{In}}^-)/I(A_{\text{In}}^0)$. Ці значення розраховано із припущення, що інтенсивність смуги, яка характеризує однократно іонізовані вакансії кадмію, дорівнює $I = 1$. Як видно з таблиці, комплекси A_{In}^- переважають в кристалах, відпалених в атмосфері телуру (зразки LTS, HTQ). Кристали, що відпалені в атмосфері кадмію, містять значно більше нейтральних комплексів. В цілому, внесок нейтральних асоціатів є суттєвим для всіх досліджуваних кристалів. Це зрозуміло, оскільки при охолодженні до 0 К в кристалі носії заряду зникають відповідно до положення енергетичних рівнів потенційних акцепторів на рис. 1, значно зменшується вміст заряджених дефектів (рис. 3). В той же час з рис. 3 видно, що кількість вільних донорів In_{Cd}^+ і комплексів $(V_{\text{Cd}}^{2-}\text{In}_{\text{Cd}}^+)^-$ практично однакова.

$(\text{In}_{\text{Cd}}^+ V_{\text{Cd}}^{2-} \text{In}_{\text{Cd}}^+)^0 \equiv A_{\text{In}}^0$. Очевидно, що при підвищенні температури рівновага процесу утворення A_{In}^0 зсувається вліво (асоціати розкладаються), внаслідок чого внесок нейтральних асоціатів (як і інших нейтральних дефектів) при високих температурах менш вагомий, порівняно з комплексами $(V_{\text{Cd}}^{2-}\text{In}_{\text{Cd}}^+)^-$. Аналіз впливу на спектри ФЛ зміни концентрації асоційованих точкових дефектів в матеріалі залежно від умов відпалу задовільно узгоджується з теоретичними моделями ДС матеріалу відповідного стехіометричного складу, розрахованими на підставі попередніх комплексних електрофізичних досліджень.

Коров'яко О.О. – к.х.н., асистент кафедри неорганічної хімії;
Ігнатенко Ю.П. – д.ф-м.н., професор;
Фочук П.М. – к.х.н., доцент кафедри неорганічної хімії;
Панчук О.Е. – д.х.н., професор, зав. кафедри неорганічної хімії;
Буківський П.М. – наук. співробітник.

IV. Висновки

Таким чином, дослідження низькотемпературних спектрів ФЛ відпалених зразків CdTe<In> вказують на постійну присутність в них при низьких температурах нейтральних комплексів типу

- [1] N.C. Giles, S. Hwang, J.F. Schetzina. The effects of a high-temperature anneal on the electrical and optical properties of bulk CdTe:In // *J. Appl. Phys.*, **64** (5), pp. 2656-2655 (1988).
- [2] F. Bassani, S. Tatarenko, K. Saminadayar, J. Bleuse, N. Magnea, J.L. Pauzat. Luminescence characterization of CdTe: In grown by molecular beam epitaxy // *Appl. Phys. Lett.*, **58**(23), pp. 2651-2653 (1991).
- [3] F. Bassani, K. Saminadayar, S. Tatarenko, K. Kheng, R.T. Cox, N. Magnea. Indium doping of CdTe layers and CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe microstructures // *J. Crystal Growth*, **117**, pp. 391-395 (1992).
- [4] L. Worschech, W. Ossau, G. Landwehr. Characterization of a strain-inducing defect in CdTe by magnetoluminescence spectroscopy // *Phys. Rev.*, **52**(19), pp. 13965-13974 (1995).
- [5] L. Worschech, W. Ossau, F. Fischer, A. Waag, G. Landwehr. Cadmium vacancy related defects in MBE grown CdTe // *J. Cryst. Growth*, **161**, pp. 134-138 (1996).
- [6] S. Gurumurthy, K.S.R.K. Rao, A.K. Sreedhar, H.L. Bhat, B. Sundershesu, R.K. Bagai, V. Kumar. Influence of deviation from stoichiometry on the photoluminescence in CdTe doped with indium // *Bull. Mater. Sci.*, **17**(6), pp. 1057-1064 (1994).
- [7] Д.В. Корбутяк, С.Г. Крилюк, Ю.В. Крюченко, Н.Д. Вахняк. Особливості фотолюмінесценції компенсованих монокристалів CdTe:Cl // *Оптоелектроника и полупроводниковая техника*, **37**, сс. 23-40, (2002).
- [8] О.Э. Панчук, П.И. Фейчук, Е.С. Никонюк. *Исследование механизма внедрения In и Tl в решетку CdTe*. В кн.: Тезисы III Всес. Совец. по химии тв. тела. Свердловск. **19**(3), сс. 362-5 (1983).
- [9] P. Fochuk, O. Korovyanko, I. Turkevych, O. Panchuk, P. Siffert. Defect chemistry in CdTe<In> crystals // *J. Cryst. Growth*, **207**, pp. 273-277 (1999).
- [10] Ф. Крегер. *Химия несовершенных кристаллов*. Мир, М. 654 с. 1969.
- [11] P. Fochuk, O. Korovyanko, O. Panchuk. Electrical activity of In and Ga in CdTe // *J. Alloys and Compounds*, **371**, pp. 10-14 (2004).
- [12] H. Zimmerman, R. Boyn, C. Michel, P. Rudolph. Absorption-calibrated determination of impurity concentrations in CdTe from Excitonic Photoluminescence // *Phys. Stat. Sol.*, **118**, pp. 225-234 (1990).

- [13] J.E. Espinosa, J.M. Gracia, H. Navarro, A. Zehe, R. Triboulet. Study of the photoluminescence spectrum in high purity CdTe // *J. Luminescence*, **28**, pp. 163-176 (1983).
- [14] S. Seto, A. Tanaka, F. Takeda, K.K. Matsuura. Defect-induced emission band in CdTe // *J. Crystal Growth*, **138**, pp. 346-351 (1994).
- [15] S.S. Chern, H. R. Vydyanath, F.A. Kroger. The defect structure of CdTe: Hall data // *J. Sol. Stat. Chem.*, **14**(1), pp. 33-43 (1975).

O.O. Korovyanko¹, Yu.P. Gnatenko², P.M. Fochuk¹, O.E. Panchuk¹,
P.M. Bukivsky²

Defect structure peculiarity and properties of CdTe<In> single crystals with various stoichiometric deviation

¹*Chernivtsi National University, Chemical department, 2, Kotziubinskogo Str., Chernivts, 58012, Ukraine*

²*Institute of Physics of NAS of Ukraine, 46, Nauki Av., Kyiv, 03028, Ukraine*

Influence of stoichiometric relations on the defect structure of CdTe<In> crystals was studied by the photoluminescence (PL) investigation of system-defined annealed samples with various deviation from stoichiometry. The connection of main bands in PL spectrum with In point defect complexes $(\text{In}_{\text{Cd}}^+ \text{V}_{\text{Cd}}^{2-})^-$ and $(2\text{In}_{\text{Cd}}^+ \text{V}_{\text{Cd}}^{2-})^0$ is shown. Neutral complexes dominate in the crystals annealed under cadmium vapour pressure P_{Cd} , ionized ones - in the crystals annealed under P_{Te_2} . The CdTe<In> point defect structure modeling using the quasi-chemical defect reaction theory was carried out.