ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 8, № 2 (2007) С. 380-387

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 8, № 2 (2007) P. 380-387

УДК 621.315.592:535

ISSN 1729-4428

В.В. Прокопів[1], П.М. Фочук[2], І.В. Горічок[1], Є.В. Вержак[2]

Опис процесів дефектоутворення у бездомішкових кристалах кадмій телуриду методом термодинамічних потенціалів

[1]*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна*
e-mail: ivan.petryk@rambler.ru, тел.: (03422) 59-60-75
[2]*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, вул. Коцюбинського 2, Чернівці*

Методом термодинамічних потенціалів розраховано концентрації точкових дефектів та вільних носіїв заряду в кристалах CdTe в залежності від технологічних факторів двотемпературного відпалу (температура відпалу T, парціальний тиск пари кадмію P_{Cd}). Встановлено тип домінуючого виду дефектів у матеріалі n-типу та у матеріалі p-типу провідності. Також показано, що для всієї досліджуваної області T та P_{Cd} концентрації заряджених дефектів є більшими за концентрації нейтральних.

Ключові слова: термодинамічний потенціал, точкові дефекти, телурид кадмію.

Стаття поступила до редакції11.11.2006; прийнята до друку 15.03.2007.

Вступ

Точкові дефекти визначають основні електричні та фотоелектричні властивості напівпровідникових матеріалів. Тому важливою задачею матеріалознавства є визначення концентрації дефектів, та встановлення їх впливу на параметри кристалів.

В роботах [1-7] був проведений казіхімічний аналіз структури точкових дефектів у кристалах кадмій телуриду, що пройшли високотемпературний відпал у парах компонентів. В роботах [8-10] дослідження структури точкових дефектів проводили з використанням теоретично визначених енергій утворення дефектів та зміни частоти коливань атомів в околі дефекту при його утворенні. Хоча такі розрахунки досить складні, а результати отримані різними авторами часто значно відрізняються один від одного, інтерес до таких робіт великий. Теоретичні розрахунки дозволяють краще зрозуміти фактори, що впливають на процеси дефектоутворення, а отже і ефективніше вливати на процеси приготування кристалів з наперед заданими властивостями.

В даній роботі застосувавши метод термодинамічних потенціалів з використанням теоретично розрахованих енергетичних параметрів дефектів розраховано дефектну структуру бездомішкових кристалів кадмій телуриду та пояснено експериментальні залежності концентрації носіїв заряду від технологічних факторів двотемпературного відпалу (температури відпалу T, парціального тиску пари компоненту P_{Cd}).

I. Термодинамічний потенціал кристала

Рівноважні концентрації точкових дефектів у кристалі при двотемпературному відпалі будемо визначати з умови рівноваги в гетерогенній системі при заданих тиску P і температурі T, якою є рівність хімічних потенціалів кожного компоненту у всіх фазах системи:

$$\mu_i^s = \mu_i^g , \qquad (1)$$

або

$$dG_i^s / dN_i^s = dG_i^g / dN_i^g , \qquad (2)$$

де G^s, N^s, G^g, N^g – термодинамічні потенціали Гібса і концентрації частинок у кристалі та газі відповідно, i – Cd, Te.

Енергія Гібса кристала

$$G = U_0 + \sum (H + F_{vib})[D] + nE_C - pE_V - T(S_n + S_p + S_k) , \qquad (3)$$

де H – ентальпія утворення нейтрального дефекту, F_{vib} – вільна коливна енергія дефекту, $[D]$ – концентрації дефекту D, n та p – концентрації електронів та дірок, E_C, E_V – енергія дна зони провідності та верху валентної зони, S_k – конфігураційна ентропія, S_n та S_p – ентропія електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні.

Сумування ведеться по всіх підгратках і всіх дефектах у підгратці. Ентальпії однократно та двократно йонізованих дефектів визначаються за формулами:

$$H_1 = H - \frac{Z}{|Z|}\varepsilon_1;\ H_2 = H - \frac{Z}{|Z|}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\,, \qquad (4)$$

де Z – зарядовий стан дефекту, ε_1, ε_2 – перший та другий рівні йонізації утвореного дефекту.

Ентропію визначали за законом Больцмана:

$$S_k = k\ln(\prod W_j) = \sum k\ln(W_j) = \sum S_j\,, \qquad (5)$$

де W_j – термодинамічна ймовірність j-ї підгратки. Для підгртки з кількома різними видами дефектів:

$$W_j = \frac{J!}{(J - \sum[D])!\prod[D]!}, \qquad (6)$$

де J – концентрація вузлів у яких може утворитися дефект. Формула (6) значно спрощується якщо використати наближену формулу Стірлінга для факторіалу: $x! \approx x^x e^{-x}$.

Для електронів та дірок термодинамічні ймовірності дорівнюють:

$$W_n = \frac{N_C!}{(N_c - n)!n!},\ W_p = \frac{N_V!}{(N_V - p)!p!}, \qquad (7)$$

де

$$n = N_c e^{\frac{\mu}{kT}},\ p = N_V e^{-\frac{\mu + E_g}{kT}}, \qquad (8)$$

N_C, N_V – густина станів у зоні провідності та у валентній зоні відповідно, E_g – ширина забороненої зони, μ – хімічний потенціал електронів, який відраховували від дна зони провідності, і визначали з рівняння електронейтральності:

$$N_C e^{\frac{\mu}{kT}} - N_V e^{-\frac{\mu + E_g}{kT}} = \sum Z \cdot [D^z]\,, \qquad (9)$$

Сумування ведеться тільки по йонізованих дефектах. Тоді:

$$\mu = kT \times \times \ln\left(\frac{\sum Z[D] + \sqrt{(\sum Z[D])^2 + 4N_C N_V \exp(-E_g/kT)}}{2N_C}\right) \qquad (10)$$

Хімічний потенціал дефекту, що дорівнює хімічному потенціалу компоненту взятому з знаком «+» або «-» в залежності від типу дефекту, визначали шляхом диференціювання енергії Гібса по концентрації дефектів.

$$\mu^s_{D_i} = H_i - kT\,ln\left(\frac{J - \sum[D]}{[D_i]}\right) + \left[n\left(\frac{E_C}{kT} - ln\left(\frac{N_C - n}{n}\right)\right) + p\left(\frac{E_V}{kT} + ln\left(\frac{N_V - p}{p}\right)\right)\right] \times \frac{kT \cdot Z_i}{\sqrt{(\sum Z[D])^2 + 4N_C N_V\, exp(-E_g/kT)}} \qquad (11)$$

Хімічний потенціал газу [11]:

$$\mu^g = kT\ln P + \mu_0\,. \qquad (12)$$

Для одноатомного газу Cd:

$$\mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3/(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}))\,. \qquad (13)$$

Для двоатомного газу Te_2:

$$\mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3/(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}) + \ln(h^2/8\pi^2 IkT) + \ln(h\nu/kT)) \qquad (14)$$

m – маса атома або молекули, $I = ml^2$ – момент інерції молекули, l – відстань між ядрами молекули, ν – внутрішня частота коливань молекули.

Таким чином ми отримали систему рівнянь типу $\pm\mu^s_{D_i} = \mu^g_i$ для знаходження рівноважної концентрації дефектів. Задача знаходження розв'язку системи рівнянь еквівалентна задачі мінімізації будь якої зростаючої функції від абсолютних величин нев'язок $\left|\pm\mu^s_{D_i} - \mu^g_i\right|$ [12]. Основним критерієм при виборі цієї функції є швидкість збіжності ітераційного процесу при чисельному відшуканні мінімуму. Тому отриману нами систему рівнянь розвязували шляхом мінімізації квадратичної функції від нев'язок:

$$L_{MIN} = \sum(\pm\mu^s_{D_i} - \mu^g_i)^2\,. \qquad (15)$$

Координатами мінімуму функції L_{MIN} є рівноважні значення концентрацій дефектів при заданих тиску P та температурі T. Для знаходження концентрацій електронів та дірок використовували формули (8), де хімічний потенціал електронів визначали за формулою (10).

Основними атомними дефектами вважали вакансії і міжвузлові атоми кадмію і телуру: V_{Cd}, V_{Te}, Cd_i, Te_i. Кожен з цих дефектів може знаходитись у трьох зарядових станах: нейтральний, однократно або двократно заряджений. Таким чином L_{MIN} є функцією дванадцяти змінних.

Складною задачею є розрахунок коливної енергії F_{vib}. В роботах [10] та [13] розраховані значення відрізняються між собою більш ніж у два рази. Ми визначали коливну енергію використовуючи наступні припущення. Кожен дефект по різному змінює частоту коливань навколишніх атомів. Однак, якщо вважати що при високих температурах всі атоми коливаються з однаковою частотою, то можна припустити, що утворення аніонної чи катіонної вакансії однаково змінить частоту коливань навколишніх атомів. Аналогічно можуть змінювати частоту коливань і міжвузлові атоми.

Коливна вільна енергія осцилятора згідно з [14] при високих температурах становить:

$$F_{vib} = 3kT\ln\left(\frac{T_\theta}{T}\right) - kT\,. \qquad (16)$$

Тобто утворення дефекту, міжвузлового атома чи вакансії, призведе до збільшення або зменшення коливної енергії кристала на величину (16). Крім того, атоми в околі дефекту змінять частоту своїх коливань. Вважатимемо, що утворення вакансії збільшує а утворення міжвузлового атома зменшує частоту коливань атомів

Зміна вільної енергії при зміні частоти коливань становить:

$$\Delta F_{vib} = x \cdot 3kT\ln\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right), \qquad (17)$$

де x – кількість атомів що змінили частоту своїх коливань.

Тоді повна зміна коливної вільної енергії:

$$F_{vib} = 3kT\ln\left(\frac{T_\theta}{T}\right) - kT + x\cdot 3kT\ln\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right). \quad (18)$$

Зміна частоти коливань атомів $\left(\frac{\omega}{\omega_0}\right)$ вибиралась таким чином, щоб отримати найкраще узгодження розрахованих концентрацій вільних носіїв заряду з експериментально визначеними значеннями (табл. 1).

Використовуючи формулу (18) для визначення коливної енергії, розраховано концентрації точкових дефектів в залежності від температури відпалу T та парціального тиску пари кадмію P_{Cd}. Величини що використовувались для розрахунку наведено у табл. 2.

Таблиця 1

Зміна частоти коливань атомів в околі дефектів

	V_{Cd}	Cd_i	V_{Te}	Te_i
x	4	5	4	5
ω/ω_0	3,75	0,25	1,60	0,15

II. Енергії утворення дефектів та енергії їх йонізації

Енергії утворення дефектів розраховані ab initio у роботах [8, 9] (табл. 3). У цих двох роботах кристал моделювався 32-атомною періодичною коміркою, в центр якої поміщали дефект. Основна відмінність у розрахунках між [8] та [9] полягає у виборі базисних функцій. У роботі [8] використовували базис побудований на атомних хвильових функціях з $l\leq 5$, а у роботі [9] розрахунок проводили на базисі плоских хвиль.

Використання різних базизів зумовило те, що отримані енергії утворення дефектів значно відрізняються між собою. Нами для розрахунку використовувались значення з [9]. На нашу думку, визначена у [8] енергія утворення аніонної вакансії (5,56 еВ) є завищеною, а енергія утворення міжвузлового атома кадмію (0,76 еВ) – заниженою. Крім того, високі енергії утворення антиструктурних дефектів отримані у [9], на відміну від [8], можуть пояснити той факт, що концентрації цих дефектів є незначними.

У табл. 4 наведено експериментально визначені та теоретично розраховані положення енергетичних рівнів дефектів.

Для вакансії кадмію перший рівень йонізації за даними різних авторів становить E_v+(≈0,06) [19, 21] або E_v+(≈0,15-0,20) [8, 9]. Експериментально визначений рівень E_v+(≈0,06) є одним з найінтенсивніших і автори пов'язують його з першим зарядовим станом катіонної вакансії. Рівень E_v+(≈0,15) також спостерігається експериментально [19], однак не у всіх зразках і з меншою інтенсивністю. Розрахунки дають для першого зарядового стану значення 0,2 еВ [8] та 0,15 еВ [9]. У роботі [2] рівень E_v+(≈0,15) приписується першому зарядовому стану міжвузлового атома телуру. Крім того, енергію йонізації близьку до 0,15 еВ можуть мати деякі комплекси та домішкові атоми [9]. Другий зарядовий стан вакансії кадмію лежить в межах 0,6–0,8 еВ [1, 8]. Але у роботі [27] визначено, що цей рівень знаходиться на ≈0,47 еВ вище від верху валентної зони. Оскільки точність визначення положення енергетичних рівнів квантовомеханічними методами є не достатньо високою, ми надавали перевагу тим значенням енергії йонізації які спостерігаються експериментально. Для вакансії катіона нами використані значення 0,06 еВ та 0,8 еВ відповідно для першого та другого зарядових станів. Даних про положення рівня йонізації міжвузлового атома телуру є дуже мало. Ми використали значення 0,15 еВ, що також використовувалося Черном [2], для

Таблиця 2

Параметри, що використовувались при розрахунку

Параметр	Значення	Література
Внутрішня частота коливань молекули Te_2	$0{,}625102\cdot 10^{13}$ с$^{-1}$	[16]
Відстань між ядрами у молекулі Te_2	$2{,}59\cdot 10^{-10}$ м	[16]
Константа $K = P_{Te_2}P_{Cd}^2$	$K = (-29475/T + 18{,}923)\cdot(101325)^3$, Па^3	[17]
Ефективна маса електронів	0,11 m_0	[17]
Ефективна маса дірок	0,35 m_0	[1]
Ширина забороненої зони	E_g=1,65-0.000535 T, еВ	[8]
Температура Дебая	T_θ=200 К	[18]

Таблиця 3

Енергії утворення дефектів

V_{Cd}	Cd_i	V_{Te}	Te_i	Te_{Cd}	Cd_{Te}	Література
3,44	0,76	5,56	0,85	1,72		[8]
2,67	2,04	3,24	3,41	3,70	3,92	[9]

першого рівня та 0,57 еВ для другого рівня йонізації.

У значеннях енергій йонізації міжвузлового атома кадмію, запропонованих різними авторами, великих розбіжностей нема. Рівні E_c-(≈0,02) та E_c-(≈0,2), що спостерігаються у матеріалі [20, 23], приписуються авторами відповідно першому та другому зарядовому стану міжвузлового атома кадмію. Розрахунок [8] дає приблизно такі ж результати (табл. 2.), і це є підтвердженням того, що ці значення можна вважати першим та другим рівнем йонізації Cd_i. Для вакансії телуру є кілька варіантів розташування енергетичних рівнів у забороненій зоні [2, 8, 9, 28, 29], і без додаткових досліджень важко однозначно визначити їх положення. Як вважав Черн [2], вакансія телуру створює мілкі донорні рівні. Але розрахунок [8, 9, 29] показує, що рівні йонізації V_{Te} є глибокими, а у роботі [27] автори вважають, що другий рівень йонізації знаходиться у валентній зоні. З такого великого спектра запропонованих значень нами були вибрані параметри розраховані в роботі [29].

III. Результати та обговорення

Використовуючи виведені формули проведено розрахунок концентрацій точкових дефектів та вільних носіїв заряду у CdTe. Результати представлені на рисунках 1-4.

Як видно з рисунків 1 та 2, теоретично визначена концентрація електронів *n* задовільно описує експериментальні дані.

Домінуючим донорним дефектом у матеріалі n-типу, згідно з результатами наших розрахунків, є двократно заряджений міжвузловий атом кадмію Cd_i^{2+} при температурах $T > 870$ K та V_{Te}^{2+} при T < 870 K. (рис. 3, 4 крива 6, 9). В матеріалі p-типу спостерігається подібна картина. До температур T ≈ 1200 K домінує однократно іонізована вакансія кадмію V_{Cd}^{-}, а при вищих температурах – Te_i^{-}.

Для всіх значень температури відпалу T та парціального тиску пари кадмію P_{Cd} домінуючі дефекти є зарядженими. Концентрації нейтральних дефектів є на один-два порядки нижчими ніж концентрації заряджених дефектів (рис. 3, 4). Таким чином не підтвердились результати розрахунків проведені у роботі [3], автори якої визначили, що у кристалах CdTe нейтральні дефекти є домінуючими.

Таблиця 4

Енергетичні рівні дефектів у кристалах CdTe

V_{Cd}^{-}	V_{Cd}^{2-}	Cd_i^{+}	Cd_i^{2+}	V_{Te}^{+}	V_{Te}^{2+}	Te_i	Te_i^{2-}	Література
E_v+0,15	E_v+0,90	E_c-0,02*						[1]
E_v+0,05		E_c-(0,14–0,21)		E_c-0,035		E_v+0,15*		[2]
E_v+0,2	E_v+0,8*	E_c-0	E_c-0,2	E_c-0,4	E_c-0,5			[8]
E_v+0,13	E_v+0,21		E_c-0,45		E_c-0,71		E_v+0,57*	[9]
E_v+0,05*								[19]
		E_c-0,016			E_c-0,43 E_c-0,60			[20]
E_v+0,069								[21]
E_v+0,062								[22]
			E_c-0,17*		E_c-0,34			[23]
E_v+0,055								[24]
E_v+0,05								[25]
						E_v+0.95		[26]
VB	E_v+0,47			E_v+0,2	*VB*			[27]
	≈E_v+0,40			E_v+0,20				[28]
				E_v+1,22*	E_v+0,76*			[29]

* – значення, що використовувались для розрахунку.

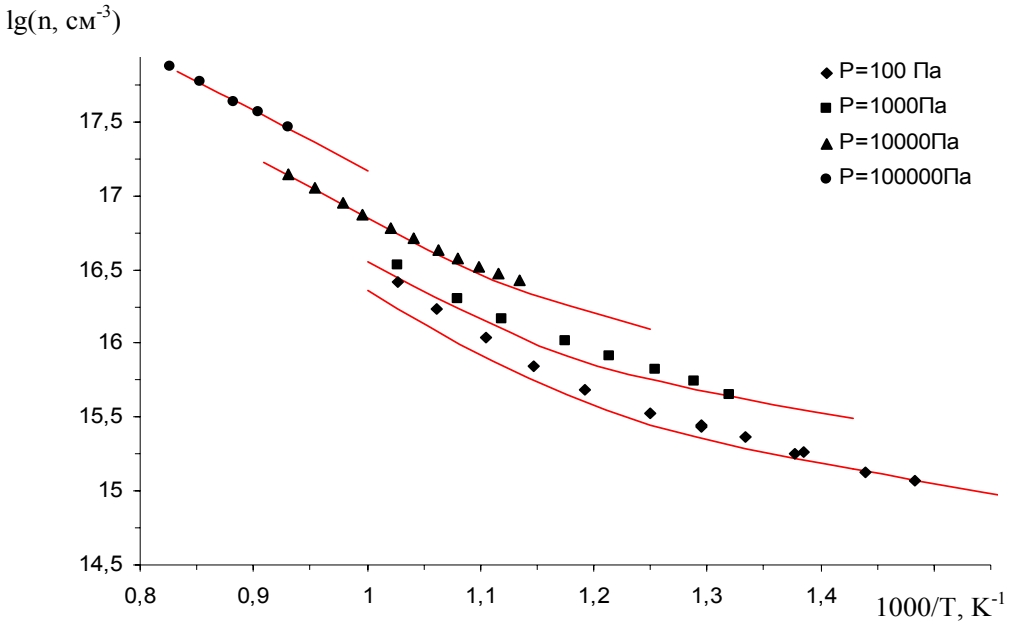

Рис.1. Залежність концентрації електронів від температури. Лінії – розрахунок, точки – експеримент.

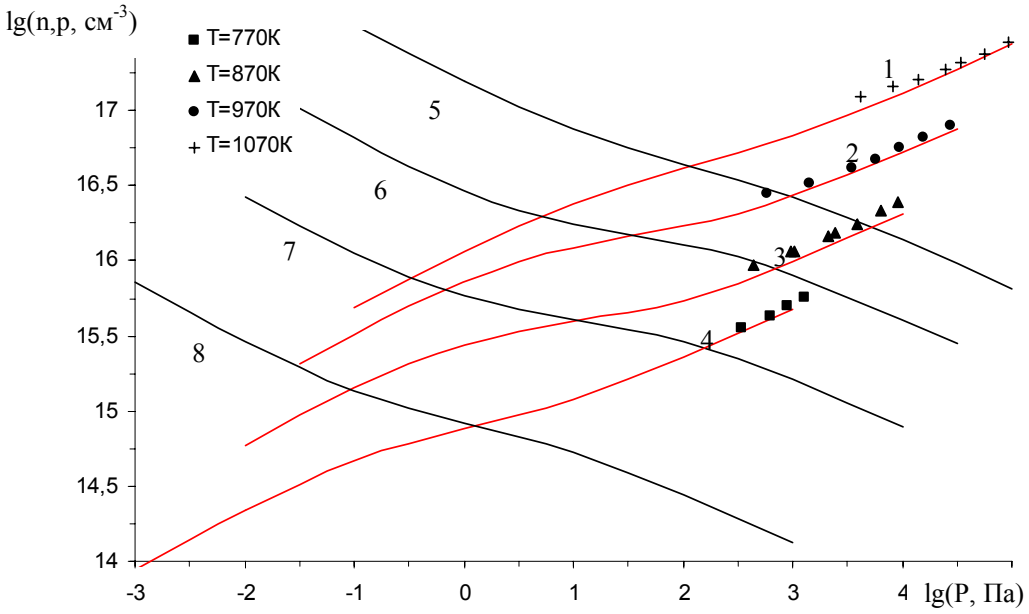

Рис. 2. Залежність концентрації електронів та дірок від парціального тиску пари кадмію. Лінії – розрахунок, точки експеримент (□ – T = 870 K, O – T = 970 K, Δ – T = 1070 K, ◊ – T = 1170 K). 1, 2, 3, 4 – n (T=1070, 970, 870, 770 K). 5, 6, 7, 8 – p (T=1070, 970, 870, 770 K).

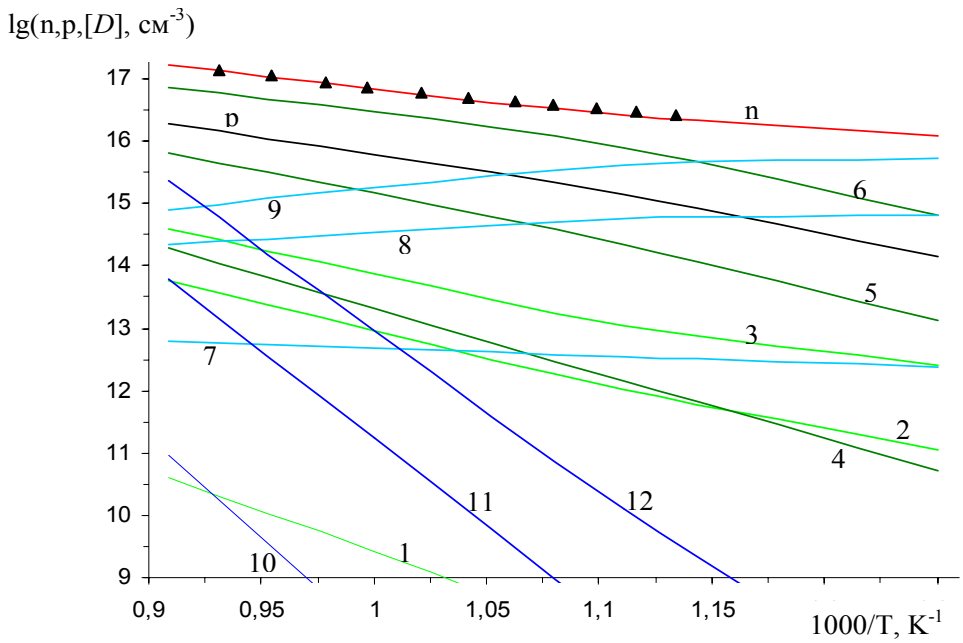

Рис. 3. Залежність концентрації точкових дефектів, електронів та дірок від температури відпалу при $P_{Cd}=10^4$ Pa.
1 – V_{Cd}^{0}, 2 – V_{Cd}^{-}, 3 – V_{Cd}^{2-}, 4 – Cd_i^0, 5 – Cd_i^+, 6 – Cd_i^{2+}, 7 – V_{Te}^{0}, 8 – V_{Te}^{+}, 9 – V_{Te}^{2+},
10 – Te_i^0, 11 – Te_i^-, 12 – Te_i^{2-}.

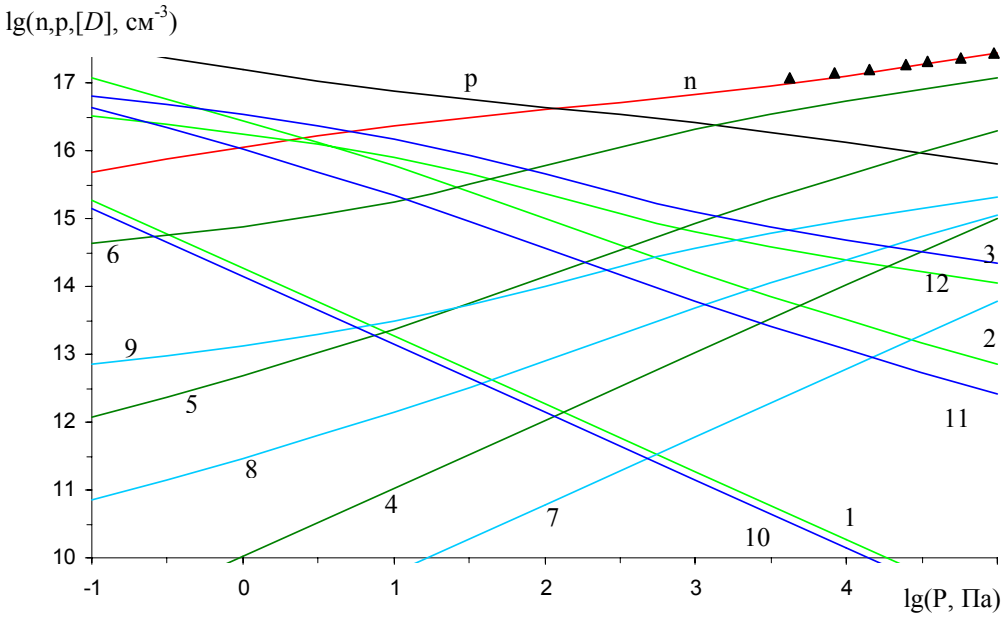

Рис. 4. Залежність концентрації точкових дефектів, електронів та дірок від тиску пари кадмію (T=1070 K). 1 – V_{Cd}^{0}, 2 – V_{Cd}^{-}, 3 – V_{Cd}^{2-}, 4 – Cd_i^0, 5 – Cd_i^+, 6 – Cd_i^{2+}, 7 – V_{Te}^{0}, 8 – V_{Te}^{+}, 9 – V_{Te}^{2+},
10 – Te_i^0, 11 – Te_i^-, 12 – Te_i^{2-}.

Висновки

Методом термодинамічних потенціалів розраховано концентрації точкових дефектів та вільних носіїв заряду в кристалах CdTe в залежності від технологічних параметрів двотемпературного відпалу (температура відпалу *T*, парціальний тиск пари кадмію P_{Cd}).

Встановлено, що домінуючим донорним дефектом в матеріалі n-типу є двократно заряджений міжвузловий атом кадмію Cd_i^{2+} при T > 870 K, та V_{Te}^{2+} при T < 870 K. В матеріалі p-типу до температур T ≈ 1200 K домінує однократно іонізована вакансія кадмію V_{Cd}^{-}, а при вищих температурах – Te_i^{-}.

Також показано, що для всієї досліджуваної області *T* та P_{Cd} концентрації заряджених дефектів є більшими за концентрації нейтральних.

Прокопів В.В. – канд. фіз.-мат. наук, доцент;
Фочук П.М. – доктор хім. наук.
Горічок І.В. – аспірант;
Вержак Є.В. – аспірант;

[1] D. de Nobel. Phase Equilibria and Semiconductors Properties of Cadmium Telluride. // *Phil. Res. Repts.*, **14**, pp.361-492 (1959).
[2] S.S. Chern, H.R.Vydyanath, F.A. Kroger. The defect structure of CdTe: Hall Data. // *Journal of solid state chemistry*, **14**, pp. 33-43 (1975).
[3] В.М. Глазов, Л.М. Павлова. Область гомогенности на основе теллурида кадмия в системе кадмий – теллур.// *Неорганические материалы,* **30**(5), ст. 629-634 (1994).
[4] P. Fochuk, O. Korovyanko, O. Panchuk. High-temperature point defect equilibrium in CdTe modeling. // *Journal of Crystal Growth*, **197**, pp. 603-606 (1999).
[5] П.М. Фочук, О.О. Коров'янко, О.Е. Панчук. Розрахунок констант впровадження легуючих елементів в CdTe. // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(3), сс. 475 – 480 (2001).
[6] П.М. Фочук, О.Е. Панчук, Л.П. Щербак. Природа домінуючих точкових дефектів у кристалах CdTe: Область насичення Cd. // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(1), сс. 136-141 (2004).
[7] Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець. Атомні дефекти та їх компенсація у чистому і легованому телуриді кадмію. //*Фізика і хімія твердого тіла*, **4**(3), сс. 547-555 (2004).
[8] M.A. Berding. Native defects in CdTe. // *Phys. Rev.*, **60**(12), pp.8943-8950 (1999).
[9] Su-Huai Wei and S. B. Zhang. Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: The case of CdTe. // *Phys. Rev. B.*, 66, 155211-1–155211-10 (2002).
[10] R. Grill, J. Franc, P. Höschl, I. Turkevych, E. Belas, and P. Moravec. Semi-insulating Te-saturated CdTe. // *IEEE transactions on nuclear science,* **52**(5), pp.1925-1931 (2005).
[11] Ю.Б. Румер, М.Ш.Рывкин. Термодинамика, статистическая физики и кинетика, Наука, М. (1972).
[12] Г.Корн, Т.Корн. *Справочник по математике,* Наука, М. 831 с. (1977).
[13] Li Yujie, Ma Guoli, Jie Wanqi. Point defects in CdTe. // *Journal of Crystal Growth*, **256** pp. 266–275 (2003).
[14] Левич В.Г. *Курс теоретической физики*. Т1, Наука, М. (1969).
[15] M.A.Berding, M van Schilfgaarde, and A. Sher. First-principles calculation of native defect in $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$. // *Phys. Rev. B.*, **50**(3), pp. 1519-1534 (1994).
[16] Ф. Крегер. Химия несовершенных кристаллов, Мир, М. (1972).
[17] С.А. Медведева. *Физика и химия соединений $A^{II}B^{VI}$*, Мир, М. (1970).
[18] А.Н. Георгобиани, М.К. Шейкман. *Физика соединений $A^{II}B^{VI}$*, Наука, М. (1986).
[19] В.С. Иванов, В.Б. Стопачинський, В.А. Чаплин. Дифференциальная спектроскопия локальных центров в CdTe. // *ФТП,*.**5**(1), сс.101-105 (1971).
[20] А.В. Савицкий, В.И. Ткачук, П.Н. Ткачук. Электрические свойства экстрагированного теллурида кадмия. // *ФТП*, **26**(5), сс. 952-955 (1992).
[21] Н.В. Агринская, О.А. Матвеев, А.В. Никитин, В.А. Сладкова. Особенности краевой фотолюминесценции кристаллов CdTe-Cl. // *ФТП* **21**(4), сс.676-679 (1987).
[22] А.В. Савицкий, О.А. Парфенюк, М.И. Илащук, А.Й. Савчук, С.Н. Чупыра. Равновесные характеристики и низкотемпературная фотолюминесценция монокристаллов CdTe-Pb. // *ФТП* **38**(5), сс.516-521 (2004).
[23] Е.А. Боброва, Ю.В. Клевков, С.А. Медведев, А.Ф. Плотников. Исследование глубоких электронных состояний в текстурированных поликристаллах p-CdTe стехиометрического состава методом DLTS. // *ФТП* **36**(12), сс. 1426-1431 (2002).
[24] В.Д. Попович, Г.М. Григорович, Р.М. Пелещак, П.М. Ткачук. Фізичні властивості напівізолюючих монокристалів CdTe-Cl, вирощених з газової фази. // *Журнал фізичних досліджень*, **6**(1), сс.86-90 (2002).
[25] О.А. Парфенюк, М.И. Илащук, К.С. Уляницкий, П.М. Фочук, О.М. Стрильчук, С.Г. Крилюк, Д.В. Корбутяк. Электрофизические свойства и низкотемпературная фотолюминесценция монокристалов CdTe, легированных Si. // *ФТП*, **40**(2), сс.148-152 (2006).

[26] A. Kobayashi, O.F. Sankey, J.D. Dow. Chemical trends for defect energy levels in HgCdTe. // *Phys. Rev. B.*, **25(**10), pp. 6367-6379 (1982).
[27] B.K. Meyer, W. Stadler. Native defect identification in II-VI materials. // *Journal of Crystal Growth*, **161,** pp. 119-127 (1996).
[28] W. Stadler, D.M. Hofmann, H.C. Alt, T. Muschik, B.K. Meyer. Optical investigation of defects in CdZnTe. // *Phys. Rev. B.*, **51**(16), pp. 10619-10630 (1995).
[29] S. Lany, V. Ostheimer, H. Wolf, Th. Wichert. Vacancies in CdTe: experiment and theory. // *Physica B.*, **308-310** pp. 958-962 (2001).

V.V. Prokopiv[1], P.M. Fochuk[2], I.V. Gorichok[1], E.V. Vergak[2]

Description of Processes of Defects Creation in Undoped Crystals Cadmium Teluride by the Method of Thermodynamics Potentials

[1]Precarpathion National University named after V. Stefanyk, Shevchenko Str.,57, Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, e-mail: prk@pu.if.ua
[2]Institute of Inorganic Chemistry, Chernivtsi University, Kotziubinskoho Str., 2, Chernivtsi, 274012, Ukraine

The method of thermodynamics potentials expects concentrations of point defects and free transmitters of charge in the CdTe crystals depending on the technological factors of two-temperature to annealing (temperature of the T annealing, partial pressure of pair of the PCd cadmium). It is set that in material of n-type the internodal atom of cadmium is a dominant defect and in material of p-type is vacancy of cadmium. It is also shown that for all explored region of T and P_{Cd} concentration of the charged defects are anymore than concentrations of neutral.