

Метастабильный X-центр в монокристаллах теллурида кадмия

© П.Н. Ткачук, В.И. Ткачук, П.Н. Букивский*, М.В. Курик*

Черновицкий национальный университет,
58012 Черновцы, Украина
E-mail: ptkachuk@chnu.cv.ua

* Институт физики Национальной академии наук Украины,
03028 Киев, Украина
E-mail: bukivsky@iop.kiev.ua

(Поступила в Редакцию 8 июля 2003 г.)

Приведена модель метастабильного DX-центра, сформированного в результате дисторсии кристаллической решетки CdTe ян-теллеровского типа — смещения атома остаточной донорной примеси D_{Cd} в область ближайшего междоузлия (D — элемент III группы Периодической системы). На основе координатно-конфигурационной диаграммы ассоциированного дефекта $V_{Cd}-D_i$, учитывающей тетраэдрические и гексагональные позиции междоузельного атома, объяснены: сдвиг Стокса, электронный тип проводимости, положение уровня Ферми, особенности фотолюминесценции и др. Результаты исследования энергетического спектра DX-центра коррелируют с известными данными теоретических расчетов.

1. Введение

Наличие технологически неконтролируемых примесей, собственных дефектов решетки и различного типа комплексов приводит к образованию в CdTe (как и в других полупроводниковых соединениях $A^{II}B^{VI}$) центров с глубокими уровнями. Вакансия катиона является основным комплексообразующим дефектом и может находиться в различных зарядовых состояниях — V_{Cd}^0 , V_{Cd}^- и V_{Cd}^{--} [1,2]. В частности, двухзарядные вакансии кадмия вместе с примесными элементами III или VII группы Периодической системы образуют ассоциации (так называемые „двойные акцепторы“ и A-центры), которые локализируются глубоко в запрещенной зоне соединения и играют важную роль в рекомбинационных процессах.

Литературные данные по исследованию энергетического спектра глубоких центров в CdTe довольно противоречивы [1,2]. Особенно это касается природы акцепторного уровня $E_c - 0.06$ eV, который относится к группе неидентифицированных до настоящего времени локальных состояний. Известно, что он может соответствовать и собственному дефекту, и ассоциации собственный дефект–примесь. При этом не всегда наблюдается корреляция данных различных авторов по определению величины энергии связи дефекта (см., например, [3]).

В последнее время при теоретическом исследовании перехода мелкий–глубокий уровень в полупроводниковых соединениях $A^{II}B^{VI}$ и $A^{III}B^V$ [4–7] используется микроскопическая модель X-центра, сформированного в результате дисторсии кристаллической решетки ян-теллеровского типа — смещения центробразующего атома вдоль направления [111] в область ближайшего междоузлия. Следствием дисторсии является обрыв связи с атомом соседней подрешетки и понижение симметрии центра от тетраэдрической (T_d) до тригональной (C_{3v}). В случае донорной примеси релаксация кристаллической решетки сопровождается захватом

дополнительного электрона на нейтральное состояние донора d^0 : $2d^0 \rightarrow d^+ + DX^-$.

Если X-центры в соединениях $A^{III}B^V$ теоретически и экспериментально изучены достаточно полно, то в соединениях $A^{II}B^{VI}$ — в основном теоретически. Тем не менее для элементов III группы механизмы формирования глубоких центров в CdTe и в некоторых соединениях $A^{III}B^V$ (GaAs, GaAlAs) аналогичны [6,7]. Известно [6], что в CdTe DX-центры, образованные примесями Al, In и Ga, локализируются соответственно на 0.55, 0.61 и 0.54 eV ниже минимума зоны проводимости с энергиями связи 0.42, 0.04 и 0.08 eV. Однако, теоретические расчеты нуждаются в экспериментальном подтверждении.

Целью работы является идентификация модели и соответственно электронных состояний DX-центра в монокристаллах CdTe. При этом исследовались образцы кристаллов с примесно-дефектным составом, наиболее широко используемом в практике создания спектротрических детекторов ядерного излучения на основе полуизолирующего CdTe. Для получения такого материала необходима компенсация действия вводимых донорных примесей, что достигается путем отклонения стехиометрии соединения в сторону избытка Te.

2. Характеристика образцов и методика эксперимента

Монокристаллы теллурида кадмия выращивались из расплава методом Бриджмена. Методика легирования донорной примесью Cl_{Te} и механизмы компенсации описаны в [8].

Образцы CdTe + Te получали следующим образом. Особенности $P-T-X$ -диаграммы фазового равновесия теллурида кадмия приводят при выращивании кристаллов из расплава к незначительному ($\sim 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) отклонению стехиометрии в сторону избытка Te [1,2].

Для более эффективного насыщения соединения теллуридом применялись статический и динамический методы выращивания кристаллов из газовой фазы [9]. В этом случае использовали предварительно синтезированный при температуре расплава CdTe или CdTe(In).

По сравнению с p -CdTe, полученным из расплава, монокристаллы n -CdTe + Te, выращенные из газовой фазы, характеризуются некоторым ухудшением совершенства кристаллической структуры: появляются включения Te в количестве 10^2 – 10^4 см $^{-2}$, а средняя плотность дислокаций увеличивается на порядок и составляет $\sim 10^5$ см $^{-3}$.

Как показано в [10], суммарный фон технологически неконтролируемых (остаточных) примесей донорного типа (Ga, In, Al, Tl, Cl) в монокристаллах CdTe, выращенных методом Бриджмена, может достигать значения 10^{17} см $^{-3}$. Причем максимально возможные концентрации наиболее интересующих нас элементов III группы практически равны: $N_{\text{Ga}} = 2.0 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$ и $N_{\text{In}} = 3.0 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$.

Исследовались образцы исходного p -CdTe ($p \sim 10^{14}$ см $^{-3}$, $\mu = 80$ – 90 см 2 /V·с), а также образцы, насыщенные теллуридом: n -CdTe ($n \sim 10^{14}$ см $^{-3}$, $\mu = 600$ – 700 см 2 /V·с); n -CdTe(In) ($n \sim 10^7$ см $^{-3}$, $\mu = 400$ – 800 см 2 /V·с); n -CdTe(Cl) ($n \sim 10^6$ см $^{-3}$, $\mu = 300$ – 500 см 2 /V·с).

Спектры низкотемпературной фотолюминесценции (ФЛ) и экситонного отражения (ЭО) снимали на естественных сколах монокристаллов при возбуждении образцов излучением аргонового лазера мощностью $\sim 10^{22}$ см $^{-2}$ ·с $^{-1}$. Использовалась стандартная схема фотоэлектрической регистрации и синхронного детектирования. В качестве диспергирующего устройства использовался спектрометр СДЛ-1 (линейная дисперсия 6 Å/mm). Низкотемпературные исследования проводились при помощи терморегулирующей системы „УТРЕКС“, стабилизирующей температуру образцов с точностью 0.05 К.

При исследовании экситонной ФЛ в области 1.606–1.580 eV (рис. 1, *a*) энергии активации изолированных дефектов E_b определяли по энергии связи E_b^{ex} экситон-примесных комплексов (ЭПК), используя эмпирические соотношения Хайнса ($m_h^*/m_e^* = 4$) [1,2]

$$E_b^{\text{ex}} = \alpha E_b, \quad (1)$$

где $\alpha = 0.24, 0.2$ и 0.1 для ионизированного донора, нейтрального донора и нейтрального акцептора соответственно.

Структура краевого излучения образцов в области 1.57–1.50 eV (рис. 1, *a*) для образцов с уровнем легирования $< 10^{18}$ см $^{-3}$ состоит из полос (D – A) и I_E . Повышение концентрации легирующей примеси приводит к существенному ослаблению интенсивности краевой ФЛ. Согласно [11], механизм рекомбинации в полосе I_E (1.54 eV) соответствует схеме зона–примесь, что позволяет определить значение „термической“ энергии

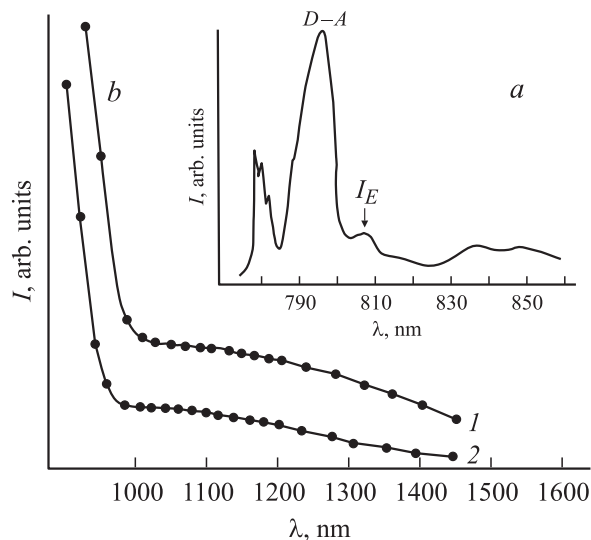


Рис. 1. *a* — спектр фотолюминесценции монокристалла n -CdTe(Cl) ($N_{\text{Cl}} = 5.0 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$) при $T = 4.5$ К; *b* — спектральное распределение фототока образцов n -CdTe(Cl) при $T = 300$ К. *1* — $N_{\text{Cl}} = 5.0 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$, *2* — $N_{\text{Cl}} = 1.0 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$.

активации акцепторного уровня ($E_t = 0.06$ eV) из выражения

$$E_t = E_g - hv(I_E), \quad (2)$$

где $E_g = 1.606$ eV при 4.5 К.

То же значение E_t получено для низкоомных (некомпенсированных) образцов по температурным зависимостям проводимости.

Оценка „оптической“ энергии активации E_0 проводилась по длинноволновой границе спектрального распределения фототока в примесной области (рис. 1, *b*) или по спектральной зависимости инфракрасного гашения фототока [11]. Для всех исследуемых образцов $E_0 = 0.75$ – 0.80 eV.

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 2 (кривая *1*) приведен спектр экситонной ФЛ монокристаллов p -CdTe при 4.5 К. Наблюдаются линии излучения A , D и C , обусловленные аннигиляцией ЭПК, а также уширенные линии I_β и X (соответственно в более длинноволновой области и на частоте свободного экситона). В [12] линия C (1.5915 eV) интерпретируется как излучение некоторого числа свободных экситонов, связанных на одном атоме примеси. По литературным данным [2,13], линия A (1.5900 eV) обусловлена аннигиляцией экситонов, связанных на нейтральных акцепторах (A^0, X), которые определяют дырочный тип проводимости. Конкурирующее влияние электронной проводимости проявляется в наличии менее интенсивной линии D (1.5935 eV), обусловленной излучением

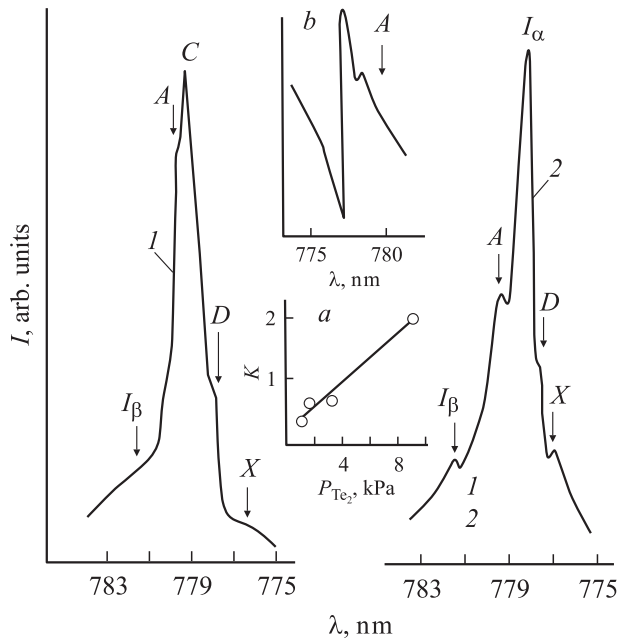


Рис. 2. Спектры экситонной ФЛ монокристаллов при $T = 4.5 \text{ K}$: 1 — $p\text{-CdTe}$; 2 — $n\text{-CdTe}$. Значения упругости паров Te в ампуле (P_{Te_2} , kPa): 1 — 0.1; 2 — 3.0. На вставках: a — зависимость величины K (отношения интенсивности линии I_β к интенсивности линии D) от значения упругости паров Te ; b — типичный спектр ЭО.

экситонов, связанных на нейтральных донорах (D^0 , X). В роли нейтральных состояний могут выступать изолированные остаточные примеси или собственные дефекты кристаллической решетки, а также комплексы с их участием [2,13].

Насыщение кристаллов теллуром (кривая 2 на рис. 2) приводит к увеличению интенсивности и сужению линий I_β (1.5860 eV) и X (1.5965 eV), а также к появлению доминирующей линии I_α (1.5924 eV), которая в [2,14] интерпретируется как излучение экситонов, связанных на ионизированном доноре (D^+ , X). Отметим, что такой вид спектра экситонной ФЛ соответствует электронной проводимости образцов, несмотря на закономерное [1,2] генерирование акцепторов (V_{Cd}) при увеличении содержания анионной компоненты CdTe .

Относительно линии I_β известно следующее. Согласно [16], она является типичной для монокристаллов, сильно легированных примесью хлора, однако, по нашим данным [8] и данным в [16], эта линия характерна для кристаллов $\text{CdTe} + \text{Te}$. В [17] она интерпретируется как фонное повторение линии A^0 , X с энергией ТА-фононов 4.3 meV. Наибольший интерес вызывают данные работы [14], где природа линии I_β объясняется рекомбинацией электрона, захваченного центром с тригональной симметрией, и дырки валентной зоны.

В соответствии с таким механизмом излучательной рекомбинации величина энергии связи электрона в ловушке ($E_b = 0.02 \text{ eV}$) определяется из выражения, ана-

логичного (2) [14],

$$E_b = E_g - hv(I_\beta). \quad (3)$$

Отметим, что тригональная симметрия соответствует микроскопической модели X-центра, т. е. природу линии I_β можно рассматривать и с этой точки зрения.

Определение условий, способствующих образованию X-центров, является сложной задачей, требующей проведения комплексных исследований. Тем не менее данные микро- и рентгеноструктурного анализа монокристаллов $\text{CdTe} + \text{Te}$ показывают, что преципитаты теллура являются основным источником возникновения дальнедействующих упругих сил, связанных с упругими „напряжениями несоответствия“ частиц другой фазы с матрицей. По нашему мнению, напряжения в решетке и приводят к смещению остаточной примеси из узла в междоузлии. Подтверждением этого следует считать повышение интенсивности линии I_β по мере увеличения парциального давления Te в технологическом процессе (вставка a на рис. 2).

На вставке b показана структура спектра ЭО, обусловленная состояниями свободного ($n = 1$) и связанного (линия A) экситонов. Природа A -линий при 1.5900 eV в спектрах ФЛ и ЭО связывается нами с наличием в поверхностном слое образцов вакансий кадмия.

Представляет интерес температурная зависимость (рис. 3) спектров экситонной ФЛ для компенсированных кристаллов $\text{CdTe}(\text{Cl})$ ($N_{\text{Cl}} = 10^{17} - 10^{20} \text{ cm}^{-3}$). При $T = 4.5 \text{ K}$ наблюдаются те же линии C , D и I_β , что и для низкоомных образцов $n\text{-CdTe}$. В области температур 15–20 K происходит полное гашение экситонных линий,

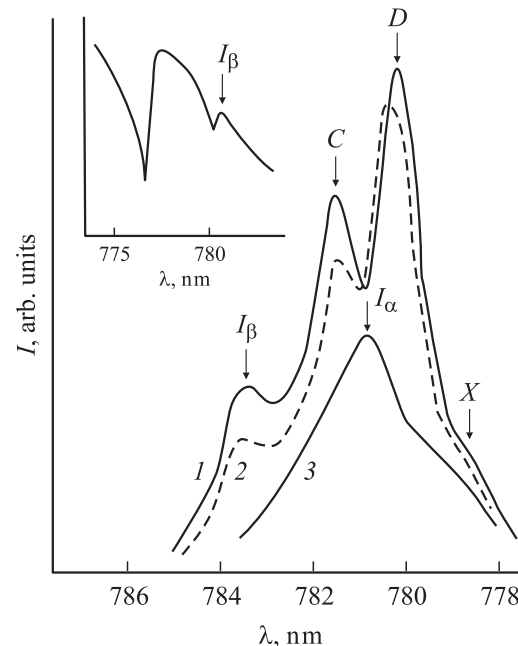


Рис. 3. Спектры экситонной ФЛ кристалла $n\text{-CdTe}(\text{Cl})$ ($N_{\text{Cl}} = 5.0 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), снятые при различных температурах. T , K : 1 — 4.5, 2 — 10, 3 — 20. На вставке: спектр ЭО.

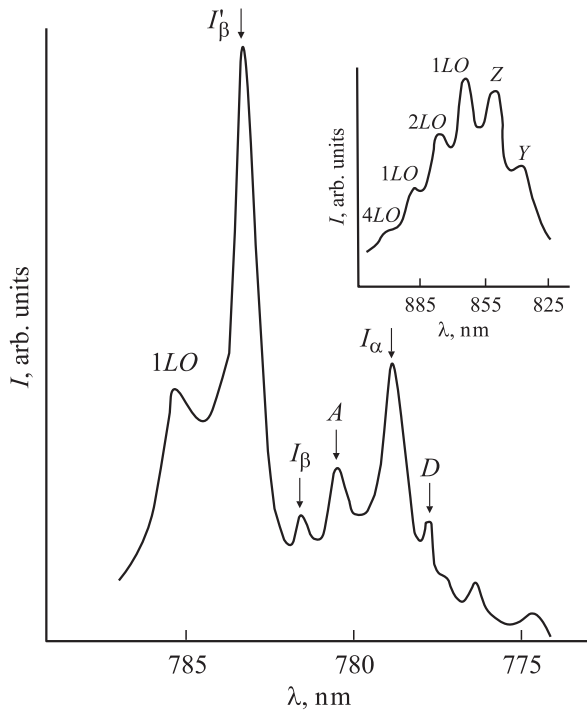


Рис. 4. Спектр экситонной ФЛ полуизолирующего образца монокристалла CdTe(In), выращенного из газовой фазы ($P_{\text{Te}_2} \sim 3.0 \text{ kPa}$) с использованием легированной индием шихты синтезированного теллурида кадмия. На вставке: типичный спектр излучения А-центров в образцах CdTe.

однако при $T \sim 20 \text{ K}$ (независимо от концентраций хлора) появляется отсутствующая при 4.5 K линия I_α .

Показанный на вставке спектр ЭО характеризуется отсутствием линии А и наличием, как и в спектрах ФЛ данных образцов, линии I_β при 1.5860 eV. Исчезновение А обусловлено снижением концентрации изолированных вакансий кадмия в результате образования нейтральных комплексов вида $V_{\text{Cd}}-2\text{Cl}_{\text{Te}}$ [8]; появление I_β — влиянием других, электрически более активных образований с участием V_{Cd} .

На рис. 4 представлен спектр экситонной ФЛ монокристалла CdTe(In) ($N_{\text{In}} \sim 5.0 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), где доминирует линия I'_β (1.5938 eV), которая в [13,17] объясняется аннигиляцией экситонов, связанных на In-центре. При этом сопутствующая остаточная примесь проявляется в наличии слабоинтенсивной линии I_β .

Как показано в [16], излучение А-центров (вставка на рис. 4) обусловлено переходами внутри электрически активного комплекса V_{Cd} -донорная примесь. Структура излучения состоит из нескольких LO-фононных повторений нуль-фононной полосы Z (1.450 eV). Относительная интенсивность отдельных LO-полос хорошо описывается распределением Пуассона. Природа Y-полосы (1.477 eV) остается невыясненной, некоторые авторы связывают ее с наличием приципитатов теллура [18].

Дисторсия решетки при формировании DX-центра, подобно дефекту Френкеля, характеризуется образованием

ассоциированной пары: вакансии (или „части“ вакансии) и междоузельного донора. Рассмотренные особенности спектров ФЛ и ЭО монокристаллов говорят в пользу модели ассоциированного дефекта с участием вакансии катиона (V_{Cd}) и остаточной донорной примеси (D_{Cd}), идентификация которой проведена в 3.2.

3.1. Координатно-конфигурационная диаграмма. Доминирование в спектрах экситонной ФЛ исследуемых кристаллов линий D (D^0, X) и I_α (D^+, X), характерных для изолированных водородоподобных состояний донора в CdTe, свидетельствует о нестабильности X-центра при высоком уровне оптического возбуждения системы. В связи с этим целесообразно обратиться к модели типичного метастабильного DX^- -центра, рассмотренного в [4–6] (рис. 5, a). При этом необходимы следующие уточнения. Значение „термической“ энергии активации E'_t согласно диаграммы равно энергии связи DX^- -центра $E_b(\text{DX}^-)$. С другой стороны, экспериментально измеренное значение энергии активации E_t определяется высотой вибронного барьера между ионизированным ($d^0 + e$) и неионизированным (DX^-) состояниями глубокого центра

$$E_t = E_b(\text{DX}^-) + \Delta E_c, \quad (4)$$

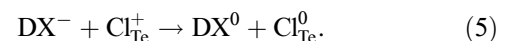
где ΔE_c — высота энергетического барьера, препятствующего обратному тепловому выбросу носителя в c -зону. В большинстве случаев величина ΔE_c мала по сравнению с величиной $E_b(\text{DX}^-)$ и $E_t \sim E'_t$.

Значение „оптической“ энергии активации E_0 определяет глубину ловушек захвата относительно c -зоны. Существенное различие величин E_t и E_0 объясняется на основе принципа Франка–Кондона о неизменности конфигурационной координаты Q при оптическом переходе.

Рассмотренный вариант диаграммы соответствует специально нелегированному CdTe с составом, близким к стехиометрическому. Как показано далее, для исследуемых кристаллов в модельном представлении X-центра необходимо учесть влияние примесно-дефектной структуры образцов и различие позиций центрообразующего атома, находящегося в междоузлии.

Достаточно высокий уровень легирования полупроводникового соединения может привести к изменению зарядового состояния DX^- -центра. Например, в [7] описана трансформация $\text{Si}:\text{DX}^-$ -центра в нейтральное состояние d^0 при легировании кристаллов GaAs примесью бора. Причем прямое взаимодействие примеси с X-центром не является обязательным, однако, под воздействием атомов лигатуры DX^- -центр становится нестабильным.

В случае монокристаллов $n\text{-CdTe}(\text{Cl})$ возможны аналогичные трансформации DX-центра в поле заряженных дефектов Cl_{Te}^+ высокой концентрации



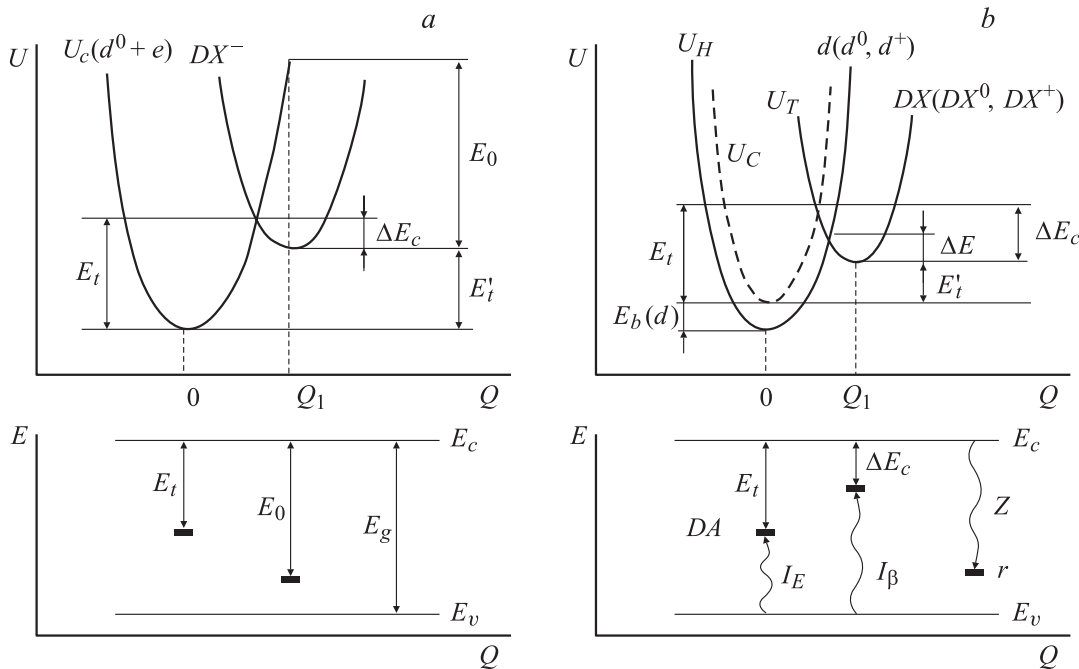
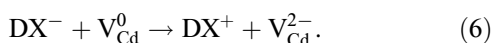


Рис. 5. Координатно-конфигурационные диаграммы метастабильных X-центров: *a* — типичный DX^- -центр [4-6], *b* — ассоциация $V_{Cd}-D_i$ (D_i — междуузельный атом центробразующей донорной примеси). Здесь $U_{T(H)}$ — энергия системы кристалл-X-центр в случае тетраэдрической (гексагональной) позиции центробразующего атома в междуузлии; U_c — энергия кристалл-свободный электрон; E — энергия свободного носителя заряда; Q — конфигурационная координата.

Следует отметить, что правомочность реакции (5) служит дополнительным фактором, объясняющим известный эффект „самоочистки“ кристаллов теллурида кадмия [19], а именно перевод электрически активных примесей в нейтральное состояние в результате введения примеси хлора.

Для монокристаллов n -CdTe и n -CdTe(In) с избытком анионной компоненты наиболее вероятным является влияние нейтральных вакансий кадмия



Реакции (5) и (6) показывают нестабильность в указанных образцах состояний DX^- относительно DX^0 и DX^+ , которые в свою очередь при отсутствии барьера [7] легко трансформируются в состояния d^0 и d^+ соответственно.

Координатно-конфигурационная диаграмма ассоциированного дефекта $V_{Cd}-D_i$ (рис. 5, *b*) учитывает не только трансформации, обусловленные реакциями (5) и (6), но и возможность нахождения междуузельного атома в двух позициях: тетраэдрической (Т) и гексагональной (Н). Такая возможность подтверждается обнаруженным в [14] эффектом расщепления линии ФЛ I_β при наложении одноосного сжатия вдоль направления [111]. Подобная модель использована для ассоциированных дефектов $V_{Zn}-Ga$ и $V_{Se}-As$ в монокристаллах ZnSe [20], а также для пары $Cl_{Te}-Cl_i$ в монокристаллах CdTe [21].

Кривые U_H расположены вблизи кривых U_C и при $Q = 0$ отличаются на величину связи носителя заряда

для нейтрального (d^0) или ионизированного (d^+) донора. В этом варианте диаграммы значение E_0 (измеряемое методом ФП) также определяет глубину ловушки захвата относительно c -зоны; значение E_t с учетом перехода $DX^- \rightarrow DX^+(DX^0)$ выражается как

$$E_t = E_b(DX) + \Delta E_c, \quad (7)$$

где $\Delta E_c = E_b(d) + \Delta E$. Очевидно, что ΔE_c в (7) соответствует энергии связи элемента D_i ассоциированной пары $V_{Cd}-D_i$. Таким образом, по сравнению с изолированным донором d^0 , для которого $E_b(d^0) = 0.014$ eV [11,22], энергия связи для D_i увеличивается на величину барьера ΔE и равна согласно выражению (3) 0.02 eV. Следовательно, $\Delta E = 0.006$ eV, и при достаточно низких температурах самопроизвольных трансформаций типа $DX^0 \rightarrow d^0$ или $DX^+ \rightarrow d^+$ не происходит.

На основе координатно-конфигурационной диаграммы ассоциированного дефекта особенности экситонной ФЛ кристаллов CdTe объясняются следующим образом.

Предположим, что X-центр находится в основном состоянии DX^0 при температуре жидкого гелия (Т-конфигурация) и возбуждается мощным лазерным излучением. Оптическое возбуждение приводит к неравновесному состоянию кристаллической решетки, и центр скачкообразно переходит в Н-конфигурацию — состояние d^0 (в спектрах ФЛ наблюдается существенное повышение интенсивностей линии D). Повышение температуры обуславливает размораживание нейтрального донора, и в спектрах ФЛ появляется линия I_α (D^+, X),

Таблица 1. Глубокие центры излучательной рекомбинации CdTe, в состав которых входят вакансии катиона и остаточная донорная примесь

Тип центра	Обозначение	Полоса ФЛ (4.5 К)	Модельное представление
$V_{Cd}-D_i$	DX	I_β	T-конфигурация дефекта френкелевского типа
$V_{Cd}^{2-}-d_i^+$	DA	I_E	H-конфигурация DX-центра
$V_{Cd}^{2-}-d_{Cd}^+$	r	Z	A-центр

Таблица 2. Энергетический спектр метастабильного DX-центра в монокристаллах CdTe(Cl)

Состояние	Энергия связи E_b , eV	Линия ФЛ $h\nu$, eV
d^+	0.015	$I_\alpha(1.5924)$
d^0	0.015 0.014 [11]*	$D(1.5935)$
D_i	0.02	$I_\beta(1.5860)$
DX^0	0.04	
DX^-	0.08 0.08 [6]**	

* Более точное значение, полученное из уравнения Дебая–Конвелла.
** Теоретическое значение для Ga:DX-центра.

доминирующая при 20 К. Очевидно, что для исходного состояния DX^+ линия I_α должна доминировать и при $T = 4.5$ К.

Согласно [7], вероятность того, что фотовозбужденные носители заряда обладают минимальной энергией, необходимой для формирования DX-центров, определяется выражением

$$f(E_b) = [1 + \exp(E_b - E_F)/kT]^{-1}. \quad (8)$$

При этом стабильное существование DX-центра в T-конфигурации связано со стабилизацией уровня Ферми E_F выше $E_c = 0$ [7] на величину энергии связи центра ($E_b = E_F$).

Одним из проявлений эффекта стабилизации уровня E_F в c -зоне является расположение высокоэнергетического хвоста красной ФЛ в области энергий выше $E_c = 0$ [20], что считается особенностью вырожденных полупроводников. Нами таких эффектов не наблюдалось; следовательно, как и предполагалось выше, существование состояний DX^0 (DX^+) не является стабильным относительно состояний d^0 (d^+), обладающих отрицательной энергией связи.

В этом случае применима обычная статистика для компенсированного невырожденного полупроводника [23]. Уровень Ферми для кристаллов CdTe(Cl) при $T = 0$ совпадает с E_c и с ростом температуры

понижается в соответствии с выражением

$$E_F = E_c + kT \ln \frac{N_D - N_A}{N_c}, \quad (9)$$

где $N_D - N_A = n$, N_c — эффективная плотность состояний в c -зоне CdTe.

Понижение уровня Ферми составляет при 20 К величину, равную ~ 0.05 eV, что соответствует полной ионизации состояний X-центра в H-конфигурации. В связи с этим возникает вопрос относительно устойчивости ассоциации дефектов, так как рекомбинационный барьер, отделяющий междоузлие от вакансии, резко уменьшается при ионизации одного из элементов ассоциации [24]. В рамках простейшей модели, описанной в [24], вероятность рекомбинации пары определяется зависимостью, аналогичной выражению (6), и близко к нулю в рассматриваемом диапазоне температур.

В табл. 1 указаны модельные представления для трех типов глубоких центров, ответственных за излучение полос ФЛ I_β , I_E и Z (схема излучательных переходов представлена в нижней части рис. 5, b). Для исследуемых кристаллов отметим два фактора 1) на основе предложенной в данной работе модели локальное состояние двойного акцептора DA можно рассматривать как результат перехода между T- и H-конфигурациями оптически возбужденного DX-центра; 2) как показано в [20] на примере кристаллов ZnSe, наличие сопутствующих A-центров может быть причиной отсутствия в образцах характерного эффекта — остаточной фотопроводимости при достаточно низких температурах [6].

3.2. Идентификация электронных состояний DX-центра. Согласно [7]

$$E_b(DX^-) = 2E_b(DX^0). \quad (10)$$

Выражения (1), (3), (7) и (10) применялись для расчета данных, представленных в табл. 2. Использование полученных выше параметров приводит к совпадению величины энергии связи $E_b(DX^-)$ с теоретически рассчитанным значением для Ga:DX-центра [6]. Следовательно, наиболее вероятным центрообразующим донором, ответственным за излучение линии I_β , следует считать остаточную примесь галлия. В пользу такого утверждения говорит анализ спектров ФЛ монокристаллов CdTe(In). Кроме того, в отличие от других элементов III группы GaCd, согласно [6], формирует метастабильный DX-центр (менее стабильный по сравнению с водородоподобным состоянием), что соответствует модельным представлениям в настоящей работе.

Оценку энергии связи состояния DX^+ можно провести на примере монокристаллов CdTe и CdTe(In) тем же методом. В частности, величина $E_b(DX^+)$ для n -CdTe сравнима с $E_b(DX^0)$ для n -CdTe(Cl). Однако, в настоящее время в этом аспекте нельзя сделать каких-либо обобщающих выводов, поскольку отсутствуют теоретические данные для сравнения.

4. Заключение

Приведем другие экспериментальные данные, подтверждающие предложенную модель Х-центра. В [3] с уровнем двойного акцептора $E_c - 0.06$ eV, который рассматривается нами как уровень DX-центра в Н-конфигурации, ассоциируется ловушка захвата $E_c - 0.04$ eV, идентифицированная по спектрам DLTS. Поскольку в [3] исследовались образцы CdTe, отожженные в парах Cd при высоких значениях p_{Cd} , необходимо учитывать влияние междоузельных атомов кадмия Cd_i . Образование вблизи Г-минимума CdTe примесной зоны мелких ($E_c - 0.013$ eV [2]) уровней Cd_i должно приводить к резкому уменьшению энергии связи изолированного донора d^0 , ассоциированного с остаточной примесью. В этом случае согласно (7) $E_i \approx E_b(DX)$.

Итак, в работе:

1) идентифицирована модель DX-центра в монокристаллах CdTe, согласно которой при смещении атома остаточной донорной примеси D_{Cd} в область междоузлия образуется дефект френкелевского типа $V_{Cd}-D_i$ (D — элемент III группы Периодической системы);

2) на основе координатно-конфигурационной диаграммы ассоциации $V_{Cd}-D_i$, учитывающей тетраэдрические и гексагональные междоузельные позиции центробразующего атома, объяснены: сдвиг Стокса, электронный тип проводимости и положение уровня Ферми при оптическом возбуждении кристаллов, особенности фотолюминесценции и др.;

3) полученные данные по экспериментальному исследованию энергетического спектра DX-центра в CdTe коррелируют с известными результатами теоретических расчетов.

Список литературы

- [1] Физика и химия соединений $A^{II}B^{VI}$ / Пер. с англ. под ред. С.А. Медведева. Мир, М. (1970). 624 с.
- [2] K.R. Zanio. Semiconductors and semimetals. Vol. 113. Academic press, N.Y.-San Francisco (1978). 235 p.
- [3] T. Takebe, J. Saraie, H. Matsunami. J. Appl. Phys. **53**, 1, 457 (1982).
- [4] D.J. Chadi. Phys. Rev. Lett. **72**, 4, 534 (1994).
- [5] D.J. Chadi. Appl. Phys. Lett. **59**, 27, 3589 (1991).
- [6] C.H. Park, D.J. Chadi. Phys. Rev. B **52**, 11 884 (1995).
- [7] D.J. Chadi, K.J. Chang. Phys. Rev. B **39**, 10 063 (1989).
- [8] П.Н. Ткачук, В.И. Ткачук, В.М. Цмоць, В.С. Штым. Неорган. материалы **36**, 1443 (2000).
- [9] А.В. Савицкий, П.Н. Ткачук, В.И. Чоботар, П.П. Бейсюк, П.Н. Букивский, И.И. Блиско. Изв. АН СССР. Неорган. материалы **26**, 2661 (1990).
- [10] R. Rudolph. Prog. Crystal Growth and Charact **29**, 275 (1994).
- [11] Н.В. Агринская, Е.Н. Аркадьева, О.А. Матвеев. ФТП **5**, 5, 863 (1971).
- [12] Н.В. Агринская, Н.Н. Зиновьев, О.А. Матвеев, И.Д. Ярощцкий. ФТП **14**, 1, 55 (1980).
- [13] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. Оптические свойства полупроводников. Справочник. Наук. думка, Киев (1987). 608 с.
- [14] T. Taguchi, J. Shirafuji, Y. Inuishi. Phys. Stat. Sol. (b) **68**, 727 (1975).
- [15] S. Seto, A. Tanaka, Y. Masa, M. Kawashima. J. Cryst. Growth **117**, 271 (1992).
- [16] Н.В. Агринская, Е.Н. Аркадьева, О.А. Матвеев. ФТП **5**, 5, 869 (1971).
- [17] L. Worshech, W. Ossau, F. Fisher, A. Waag, G. Landwehr. J. Cryst. Growth **161**, 134 (1996).
- [18] В.Н. Бабенцов. ФТП **30**, 8, 1426 (1996).
- [19] О.А. Матвеев, Е.Н. Аркадьева, Л.А. Гончаров. Докл. АН СССР **221**, 2, 325 (1975).
- [20] П.Н. Ткачук. ФТТ **44**, 12, 2113 (2002).
- [21] R. Legros, Y. Marfaing, R. Triboulet. J. Phys. Chem. Solid. **39**, 179 (1978).
- [22] Н.В. Агринская, М.В. Алексеев, Е.Н. Аркадьева, О.А. Матвеев, С.В. Прокофьев. ФТП **9**, 2, 320 (1975).
- [23] В.Д. Попович, Г.М. Григорович, Р.М. Пелешак, П.Н. Ткачук. ФТП **36**, 6, 674 (2002).
- [24] Ж. Бургун, М. Ланно. Точечные дефекты в полупроводниках. Экспериментальные аспекты. Пер. с англ. Мир, М. (1985). 304 с.