

УДК 637.311.322 + 639.1.074

© А. О. Шепидченко, С. Мирбт, О. Хакансон, М. Клинтенберг, С. М. Иркаев

ДЕФОРМАЦИИ КАК МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ УРОВНЯМИ ДЕФЕКТА В ТЕЛЛУРИДЕ КАДМИЯ. 1. ДЕФЕКТ ЗАМЕЩЕНИЯ С НУЛЕВЫМ ЗАРЯДОМ

Проведены расчеты энергетического уровня дефекта замещения для случая нейтрального зарядового состояния теллура в полупроводниковом кристалле теллурида кадмия. Определена его геометрия, а также исследовано влияние трех типов деформаций на положение энергетических уровней в запрещенной зоне полупроводника. Показано, что наиболее эффективной деформацией является одновременная деформация в двух направлениях, которая приводит к уширению запрещенной зоны и расхождению уровней дефекта в направлениях валентной зоны и зоны проводимости.

Кл. сл.: CdTe, дефект замещения, зонная структура, энергетический уровень, полупроводники, деформация

ВВЕДЕНИЕ

Теллурид кадмия является одним из самых распространенных полупроводниковых материалов для регистрации радиоактивного излучения. Благодаря высокому атомному номеру элементов, входящих в состав соединения, и широкой запрещенной зоне этого полупроводника детекторы на его основе обладают высокой эффективностью регистрации и энергетическим разрешением и могут, в отличие от кремниевых и германиевых детекторов, работать при комнатной температуре [1–3].

Дальнейшему улучшению спектрометрических характеристик детекторов препятствуют образующиеся при синтезе кристаллов дефекты и примеси. Одним из наиболее проблемных дефектов является собственный дефект замещения Te_{Cd} , который возникает при замещении атома кадмия атомом теллура в кристаллической решетке полупроводника и может находиться в различных зарядовых состояниях.

Исследования, проведенные ранее в работах [4–8], позиционируют этот дефект в основном как глубокий донор, но однозначно определить его энергию не удается.

В настоящей работе представлены результаты, проведенных нами расчетов энергетического уровня дефекта для случая нейтрального зарядового состояния Te_{Cd}^0 . Определена его геометрия, а также установлены закономерности влияния трех типов деформаций на положение энергетического уровня Te_{Cd} в запрещенной зоне полупроводника.

МЕТОД РАСЧЕТА

Наиболее удобным и распространенным способом моделирования дефекта в кристаллической решетке является кластерное моделирование, или моделирование дефекта в сверхъячейке [9]. В данной работе с этой целью используется программный пакет VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [10], базирующийся на принципах теории плотностей функционалов. Расчеты проводились в приближении локальных плотностей LDA (Local Density Approximation) [11, 12] с параметризацией Сеперли—Алдера (CA) [13].

Нами была сконструирована 128-атомная гранецентрированная сверхъячейка теллурида кадмия. Для валентных электронов кадмия применялась конфигурация $4d^{10}5s^2$, а для теллура — $5s^25p^4$. Волновые функции валентных электронов представлены в базисе плоских волн с энергией отсечки в 500 эВ. Для разрешения зоны Бриллюэна были взяты распределения k -точек $2 \times 2 \times 2$ и $6 \times 6 \times 6$ и при проведении расчетов учитывалось гауссовское уширение в 0.05 эВ.

Анионный дефект замещения моделировался заменой одного из атомов кадмия атомом теллура в 128-атомной сверхъячейке теллурида кадмия.

Деформации модели были представлены варьированием значения постоянной решетки a теллурида кадмия в одном, двух и трех кристаллографических направлениях (рис. 1).

Основными принципами создания качественной виртуальной модели, с одной стороны, является степень сходства моделируемых параметров

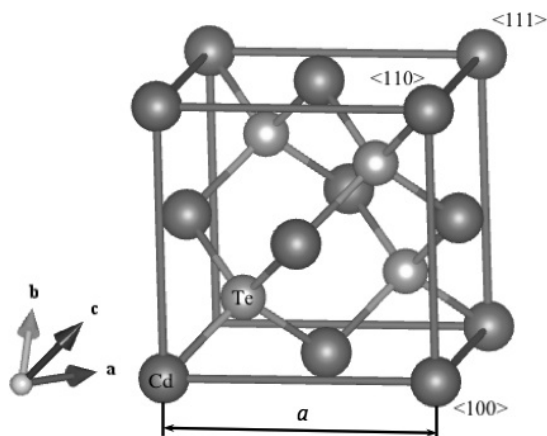


Рис. 1. Кристаллическая решетка теллурида кадмия (CdTe).

a, b, c — векторы примитивной решетки, направленные вдоль $\langle 110 \rangle$; **a** — параметр решетки

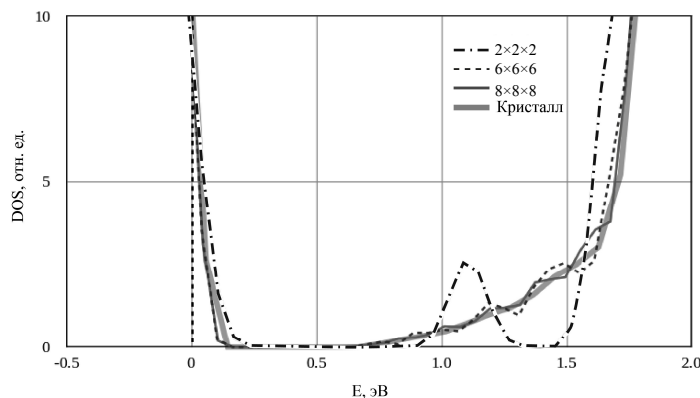


Рис. 2. Электронные плотности состояний 128-атомной сверхъядейки теллурида кадмия, рассчитанные при $2 \times 2 \times 2$ (штрих-пунктирная линия), $6 \times 6 \times 6$ (пунктирная линия) и $8 \times 8 \times 8$ (тонкая серая сплошная) распределениях k -точек в сравнении с идеальным кристаллом теллурида кадмия (черная толстая сплошная линия)

со свойствами реального образца, с другой — минимизация затрат компьютерных ресурсов. Для вычисления оптимальных параметров модели, представленной в данной работе, проводился ряд предварительных вычислений.

Минимально возможная концентрация дефектов, получаемая при синтезе кристаллов теллурида кадмия в настоящее время, очень мала и составляет величину порядка 10^{12} см^{-3} [16]. Чтобы точно воспроизвести такую концентрацию дефекта необходимо использовать сверхъядейку размером приблизительно в $32 \cdot 10^9$ атомов, что требует огромных вычислительных затрат и в рамках программного пакета VASP представляется на сегодняшний день невозможным.

Однако для решения поставленной задачи достаточно использовать такое количество атомов в сверхъядейке, которое позволит в необходимой мере изолировать атомы дефекта друг от друга. Так, например, при использовании 54-атомной сверхъядейки атомы замещения "чувствуют" друг друга, что выражается в значительной дисперсии их энергетического спектра. Это весьма затрудняет анализ, поскольку такой результат сильно расходится с реальным положением вещей. При использовании 128-атомной сверхъядейки дисперсия наблюдается в гораздо меньшей степени.

Другой не менее важный параметр — набор и распределение k -точек в зоне Бриллюэна. Перед выполнением основных расчетов были протестированы три различных варианта — $2 \times 2 \times 2$, $6 \times 6 \times 6$ и $8 \times 8 \times 8$ k -точек, результаты которых представлены на рис. 2. В качестве эталона была взята электронная плотность состояний теллурида кадмия, рас-

считанная с использованием 2-атомной ячейки. Как видно из рисунка, для эффективного разрешения недостаточно набора $2 \times 2 \times 2$ k -точек, т. к. вблизи потолка зоны проводимости в этом случае образуется неоправданный всплеск электронной плотности состояний. Распределения $6 \times 6 \times 6$ и $8 \times 8 \times 8$ приводят к близким значениям, но набор из $8 \times 8 \times 8$ k -точек требует гораздо больше временных и компьютерных затрат.

Таким образом, можно сделать вывод, что наиболее удобной моделью в нашем случае является 128-атомная сверхъядейка теллурида кадмия с набором k -точек $6 \times 6 \times 6$. В некоторых случаях, где плотность состояний и зонная структура не являются приоритетной информацией, для ускорения сходимости расчетов нами использовалось распределение k -точек $2 \times 2 \times 2$.

Энергии дефектообразования рассчитывались для условий Cd- и Te-насыщенных газовых фаз. Выражение, используемое для расчета энергии дефектообразования ΔH_f , имеет вид

$$\Delta H_f = \Delta E - \sum_i n_i \mu_i, \quad (1)$$

где ΔE — разность в энергиях идеальной сверхъядейки и сверхъядейки с дефектом; μ_i — относительный химический потенциал атомов каждого типа; n_i — разница в количестве атомов каждого типа между идеальной и содержащей дефект сверхъядейкой. В данном случае $n_{\text{Cd}} = -1$ (на один кадмий меньше, чем в идеальной сверхъядейке) и соответственно $n_{\text{Te}} = 1$. В итоге для расчета энергии дефектообразования Te_{Cd}^0 формула (1) преобразуется в (2):

$$\Delta H_f = \Delta E - \mu_{\text{Te}} + \mu_{\text{Cd}}. \quad (2)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Недеформированный дефект замещения

Как было отмечено выше, дефект образуется при замещении атома кадмия атомом теллура в узле кристаллической решетки. Но у данного дефекта есть свои особенности, основным из которых является свойство понижения симметрии в результате ян-теллеровского искажения. Если взять идеальную решетку теллурида кадмия, которая обладает симметрией T_d и заменить один из атомов кадмия теллуром, и позволить данной структуре оптимизировать геометрическую конфигурацию в соответствии с минимальной энергией, то можно отметить, что атом замещения (Te_{Cd}) не останется ровно на том же месте, где находился

"родной" кадмий. Он немного сдвинется в одном из кристаллографических направлений $\langle 111 \rangle$, понижая локальную симметрию до C_{3v} (рис. 3). На рис. 3 показан переход от симметрии T_d к C_{3v} при смещении центрального атома (Te_{Cd}) в одну из плоскостей тетраэдра, образованного ближайшими "соседями" (Te_1 , Te_2 , Te_3 и Te_4). Изменение параметров приведено в табл. 1.

Подобную конфигурацию можно объяснить, исходя из электронной структуры атомов кадмия и теллура. Так как соединение CdTe принадлежит группе полупроводников типа АПВІ, можно определить, что кадмий обладает валентностью II, а теллур четырехвалентен. Тип кубической гранцентрированной решетки предполагает, что каждый атом теллура окружен четырьмя атомами кадмия и наоборот. Таким образом, если равномерно распределить валентные электроны, то на каждую атомную связь приходится по два электрона. Это обуславливает высокую симметрию T_d идеальной решетки CdTe и sp^3 -гибридизацию внешних электронных оболочек. Далее, если заменить один из атомов кадмия теллуром, получится, что в данном узле будет 12 валентных электронов вместо восьми. Такой электронный дисбаланс приводит к образованию трех полноценных связей, но разрушает четвертую, образуя так называемое состояние "отталкивания" [5].

На рис. 4 изображены энергетические диаграммы, относящиеся к T_d - и C_{3v} -симметриям. Для случая симметрии третьего порядка представлена заполненность уровней 12 электронами, как это происходит в случае с дефектом замещения. Здесь распределение электронов происходит совершенно по-иному, чем в идеальном теллуриде кадмия. В первую очередь связи образуются между атомом замещения Te_{Cd} и его тремя ближайшими соседями (Te_2 , Te_3 и Te_4) (рис. 3), переходя из sp^3 - в sp^2 -гибридизацию. В образовании этих связей участвуют электроны, находящиеся на $1A_1^b$, $1A_1^a$ и E^b

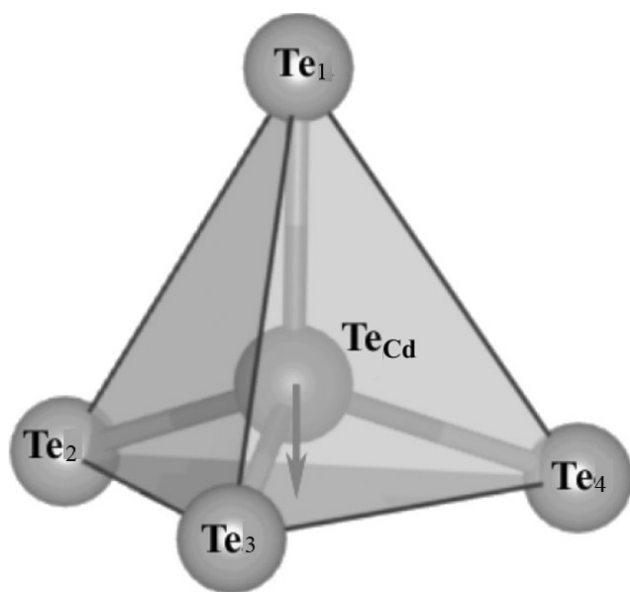


Рис. 3. Положение дефекта замещения

Табл. 1. Сравнение основных параметров 128-атомных сверхъячеек CdTe и CdTe с Te_{Cd}^0

Сверхъячейка	Параметр	Настоящая работа	Литературные данные	Эксперимент
CdTe	Параметр решетки a , Å	6.420	6.447 [11], 6.420 [9]	6.48 [12]
	Ширина зоны, эВ	0.64	0.6 [11]	1.56 [12]
CdTe с Te_{Cd}^0	$d(\text{Te}_{\text{Cd}} - \text{Te}_1)$, Å	3.581	3.59 [11]	—
	$d(\text{Te}_{\text{Cd}} - \text{Te}_2)$, Å	2.905	2.93 [11], 2.91 [9]	—
	$\angle \text{Te}_1\text{Te}_{\text{Cd}}\text{Te}_2$	90.4°	—	—
	$\angle \text{Te}_2\text{Te}_{\text{Cd}}\text{Te}_3$	120.0°	—	—

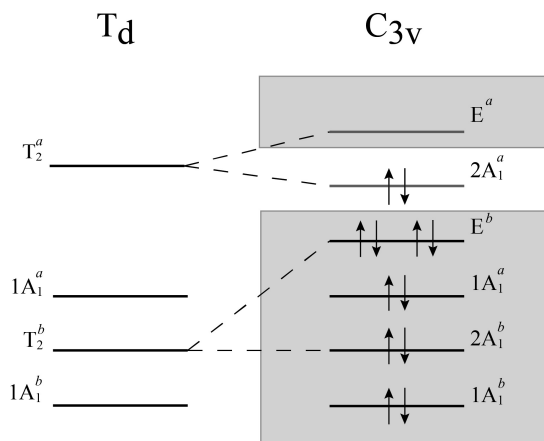


Рис. 4. Энергетические диаграммы дефекта замещения Te_{Cd}

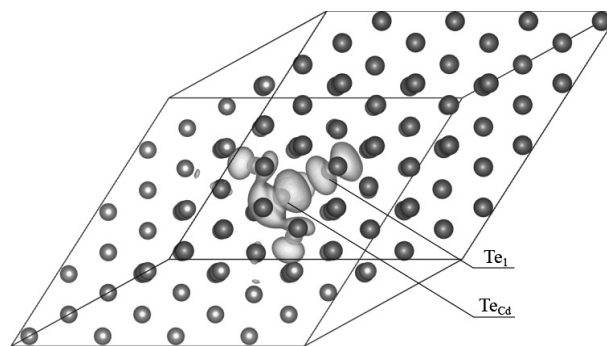


Рис. 5. Изоповерхность плотности заряда, относящейся к уровню $2A_1$ в недеформированной решетке CdTe

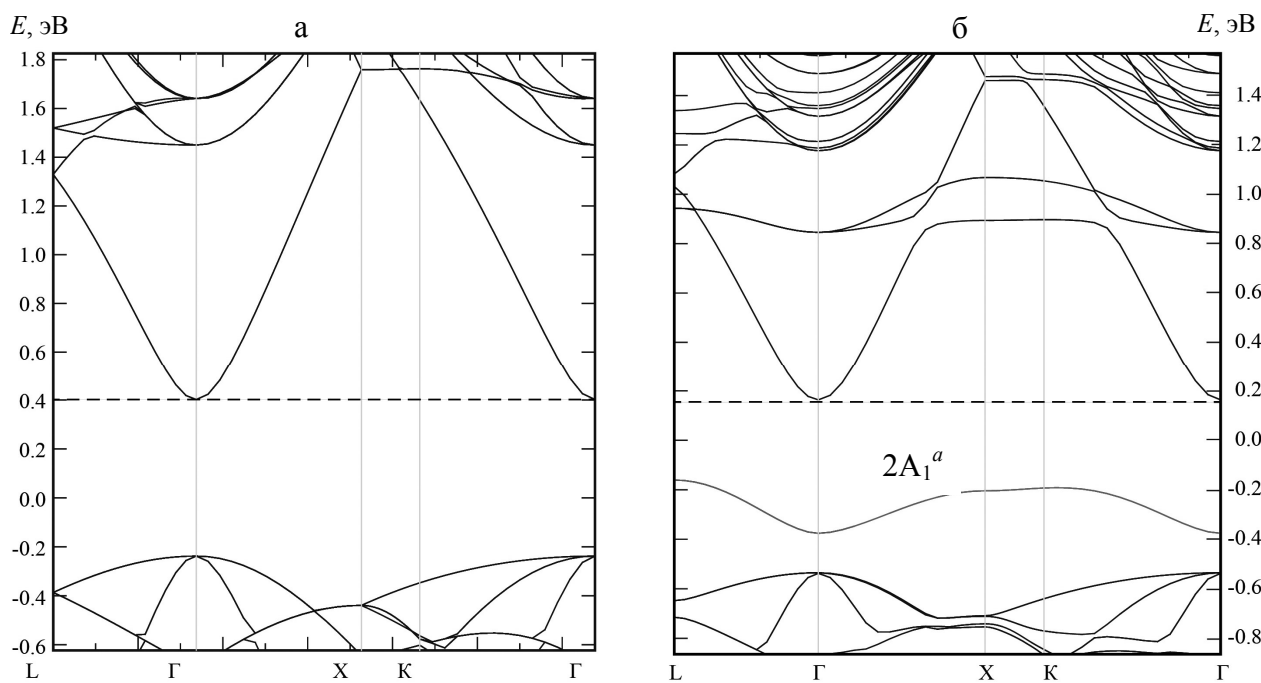


Рис. 6. Зонные структуры идеальной кристаллической решетки теллурида кадмия (а) и теллурида кадмия с дефектом замещения (б).

$2A_1^a$ — энергетический уровень в запрещенной зоне, принадлежащий дефекту замещения

энергетических уровнях (рис. 4). Четвертый атом, Te_1 , не участвует в формировании связей с атомом замещения, поскольку связывающие T_2^b уровни, ранее отвечавшие за эту связь, теперь расщеплены на два уровня $2A_1^b$ и E^b . Уровень E^b с p_x - и p_y -подобными орбиталями относится к атомам Te_{Cd} , Te_2 , Te_3 и Te_4 , а уровень $2A_1^b$ трансформируется из p_z -подобной орбитали в s -подобную и участвует

только в образовании связей Te_1 с ближайшими тремя атомами кадмия. На долю $\text{Te}_1 - \text{Te}_{\text{Cd}}$ приходится оставшиеся отталкивающие состояния $2A_1^a$ и E^a , из которых E^a не заполнен, а $2A_1^a$, в котором участвуют главным образом p_z -орбитали Te_1 и Te_{Cd} атомов, увеличивает их расхождение. На рис. 5 показана зарядовая изоповерхность $2A_1^a$ уровня в сверхъячейке из 128 атомов.

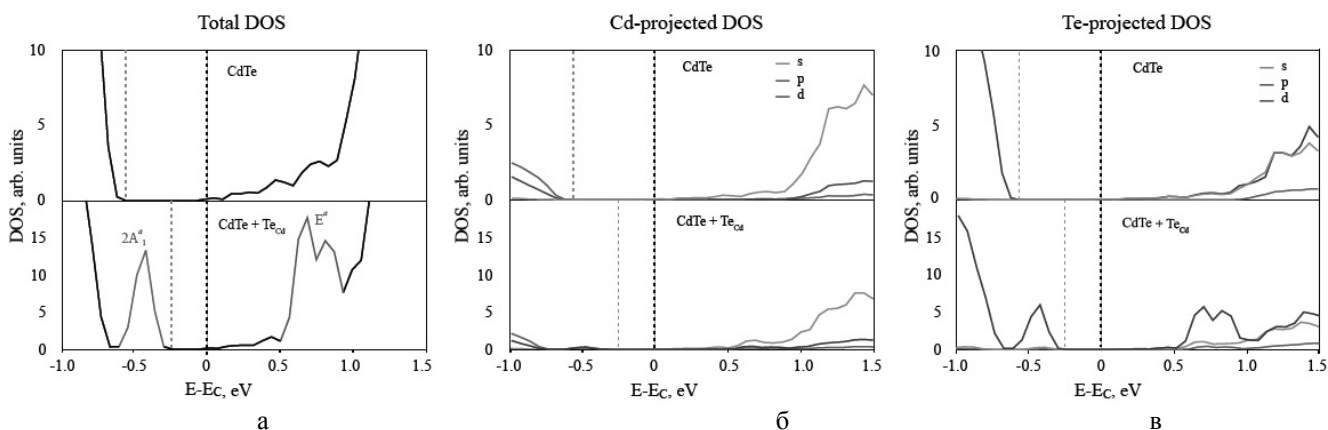


Рис. 7. Электронная плотность состояний идеального TeCd с дефектом замещения (а) верхний и нижний рисунки соответственно, а также отдельные электронные плотности состояний кадмия (б) и теллура (в)

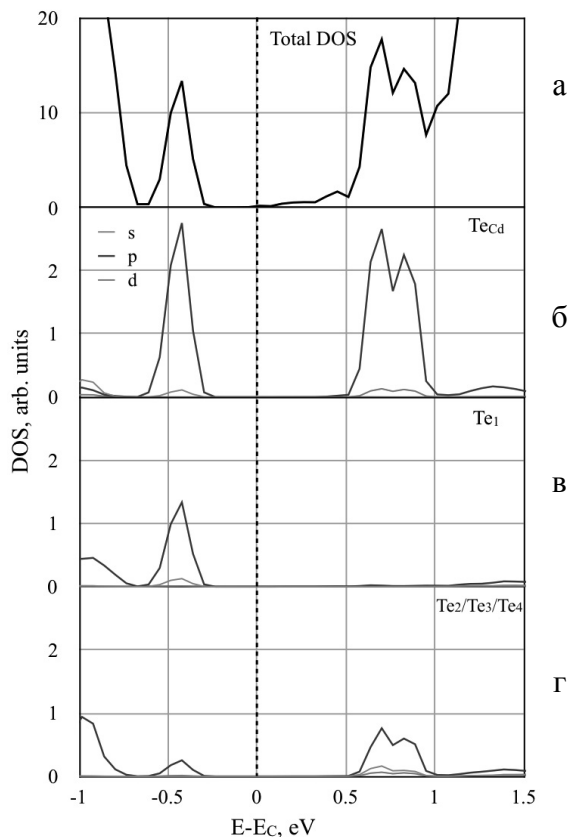


Рис. 8. Электронная плотность состояний TeCd с дефектом замещения (а), отдельные электронные плотности состояний атома замещения (б), его дальнего соседа Te_1 (в), а также ближайших трех эквивалентных атомов Te_{2-4} (г)

Кроме того, из рис. 4 видно, что при заполнении энергетических уровней с T_d -симметрией 12 электронами*) верхний заполненный уровень будет находиться выше, чем при S_{3v} -симметрии, поэтому S_{3v} -симметрия является более предпочтительной для данной конфигурации.

Как было показано выше, дефект замещения Te_{Cd} образует шесть энергетических уровней, один из которых ($2A_1''$) попадает в запрещенную зону полупроводника. Это видно из схематической энергетической диаграммы (рис. 4), зонной структуры, представленной на рис. 6, б, а также из графиков плотности состояний (рис. 7, 8) и (Приложение). Конкретные значения положения этого уровня дефекта приведены в табл. 2. В таблице показаны экспериментальные, теоретические и полученные в данной работе значения положения уровня $2A_1''$ в запрещенной зоне относительно потолка валентной зоны (E_v) или дна зоны проводимости (E_c). Значения, полученные в настоящей работе, приведены относительно потолка валентной зоны, т. к. метод приближения локальной плотности не позволяет точно рассчитать положение дна зоны проводимости.

Для анализа вклада ближайших атомов кадмия в общую энергетическую картину дефекта были проведены расчеты плотностей состояний отдельно для атомов кадмия и теллура. На рис. 7, а, показаны суммарные плотности электронных состояний для идеальной решетки теллурида кадмия (вверху) и для решетки с дефектом (внизу). На рис. 7, б, представлены соответственно плотности состояний для атомов кадмия, входящих в состав суперъядерки, и для атомов теллура для идеальной решетки и решетки с дефектом. Как несложно заметить,

*) На T_2 уровень приходится 6 электронов.

Табл. 2. Энергии уровня дефекта в CdTe

Энергия уровня дефекта, эВ	Литература	Примечание
$E_v + 0.16 \dots 0.35$	Настоящая работа	128-атомная ячейка
$E_v + 0.4$	[9]	64-атомная ячейка
$E_c - 0.6 (E_v + 0.96)$	[2]	Фотопроводимость при температурах 300 и 65 К
$E_c - 0.86 (E_v + 0.7)$	[2]	Фотопроводимость при температурах 300 и 65 К
$E_c - 0.75 \dots 0.83 (E_v + 0.81 \dots 0.73)$	[3]	—
$E_c - 0.8 \dots 1.05 (E_v + 0.76 \dots 0.51)$	[3]	—
$E_c - 0.69 \dots 0.71 (E_v + 0.87 \dots 0.85)$	[13]	—
$E_c - 0.79 (E_v + 0.77)$	[13]	—

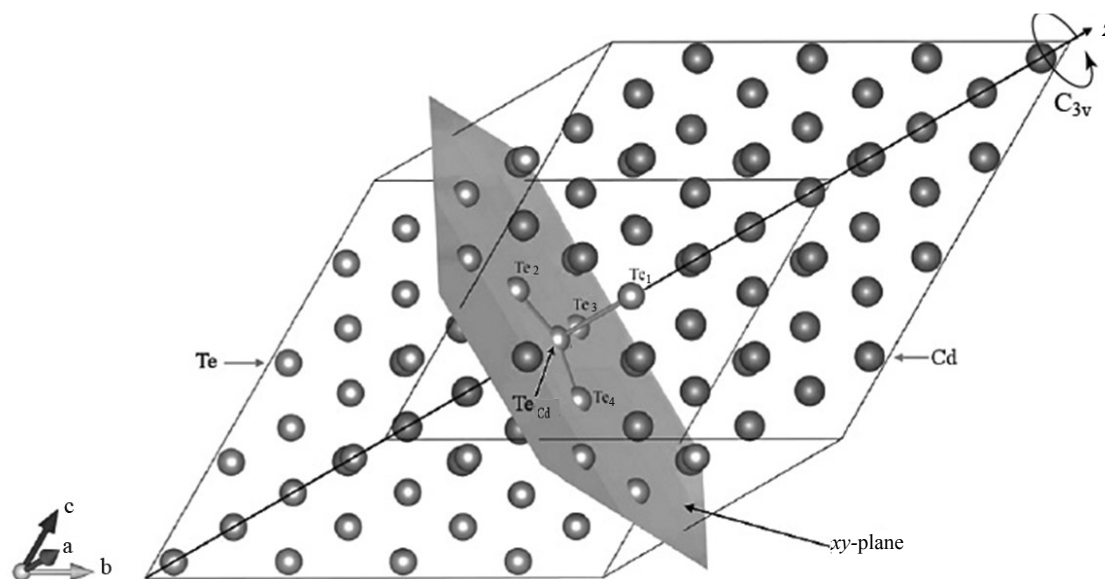


Рис. 9. Расположение 128-атомной ячейки CdTe в соответствии с адаптированной под деформации системой координат

атомы кадмия практически не вносят вклад в образование дефекта (лишь небольшая плотность состояний наблюдается в районе пика $2A_1^a$), в то время как теллур практически полностью формирует оба пика, принадлежащие дефекту (рис. 7, в). Также следует обратить внимание, что в формировании уровней участвуют преимущественно p -электроны.

Теперь, поскольку из расчетов следует, что кадмий практически не участвует в образовании интересующих нас уровней дефекта, можно оценить вклад каждого из пяти упомянутых ранее атомов теллура. На рис. 8 приведены составляющие плотности состояний для каждого из пяти атомов теллура. Из рисунка видно, что атом замещения Te_{Cd} вносит вклад в оба пика (рис. 8, б)

и преимущественно p -электронами, хотя небольшое количество s - и d -электронов присутствует в районе $2A_1^a$ и E^a соответственно. Te_1 в подтверждение тому, что было сказано выше, вносит вклад только в формирование $2A_1^a$ уровня. Три эквивалентных атома Te_2 , Te_3 и Te_4 главным образом участвуют в формировании уровня в зоне проводимости, но также вносят немалый вклад и в уровень запрещенной зоны. Необходимо также отметить, что основную роль в формировании связей играют p -состояния.

Дефект замещения в условиях деформаций

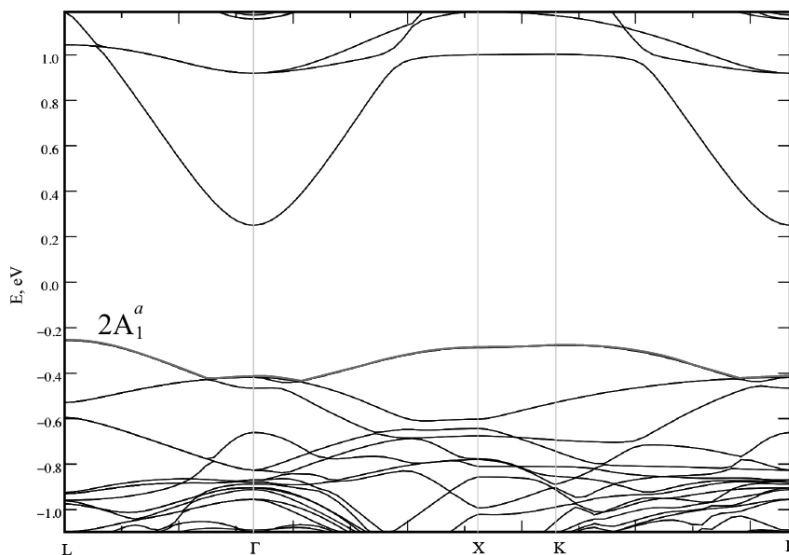
Для анализа деформаций кристаллической решетки были проведены некоторые предварительные

Табл. 3. Уровни дефектов и ширина зоны

Расстояние, эВ	Деформация, %	Тип деформации		
		1D	2D	3D
$2A_1^a - E^a$ (в точке Γ)	0	1.13		
	1	1.03	1.22	1.13
	2	0.99	1.23	1.08
	3	0.94	1.38	1.06
$E_c - E_f$ (в точке Γ)	0	0.24		
	1	0.19	0.35	0.37
	2	0.15	0.45	0.45
	3	0.12	0.49	0.59

Табл. 4. Внешние давления, необходимые для деформаций решетки CdTe

Деформация, %	Внешнее давление, кбар		
	1D	2D	3D
1	1.65	5.59	14.64
2	3.46	11.14	31.08
3	5.29	16.43	48.81

**Рис. 10.** Зонная структура 128-атомной сверхъядейки CdTe с Te_{Cd} при 2 %-м двумерном сжатии. В области Γ наблюдается делокализация дефекта

изменения в системе координат. Так, вся система координат была повернута таким образом, чтобы ось z была направлена вдоль линии расположения атомов Te_{Cd} и Te_1 и совпадала с осью симметрии третьего порядка, а оси x и y оказались в плоскости Te_2 , Te_3 и Te_4 (рис. 9).

1D-деформация

Под одномерной (1D) деформацией подразумевается изменение параметров решетки вдоль оси z (рис. 9), в то время как допускается релаксация

атомов в x и y направлениях. Расчеты показывают, что при одномерной деформации уровни дефекта приближаются друг к другу, а уровень Ферми незначительно сдвигается по направлению к зоне проводимости: при 3 %-м сжатии — на 0.12 эВ (Приложение, а; табл. 3). Необходимые для этого давления приведены в табл. 4.

2D-деформация

При двумерной (2D) деформации допускалась свободная релаксация атомов только вдоль на-

правления z (рис. 9). Параметры решетки в плоскости xy были последовательно уменьшены на 1, 2 и 3 % и зафиксированы. Результаты данной деформации представлены на рисунке (Приложение, б) и в табл. 3. В данном случае уровни дефектов, наоборот (в сравнении с 1D-деформацией), расходятся в разные стороны, увеличивая запрещенную зону на 0.25 эВ при 3 %-м сжатии. Также наблюдается эффект делокализации уровня $2A_1^a$ уже при 2 %-м сжатии решетки. На рис. 10 показана зонная структура полупроводника с дефектом при двумерном сжатии решетки на 2%. Из рисунка видно, что уровень дефекта $2A_1^a$ сливается с потолком валентной зоны в районе Г-точки.

Необходимые давления при двумерном сжатии также приведены в табл. 4.

3D-деформация

При трехмерной (3D) деформации (гидростатическом сжатии) параметр решетки во всех декартовых направлениях последовательно уменьшался и фиксировался. Так же как при 1D- и 2D-деформациях, сжатие проводилось на 1, 2 и 3 %. Основной тенденцией, отмеченной в данном случае, был сдвиг всех уровней, включая уровень Ферми, в сторону более низких энергий (см. Приложение, с). Также отмечено увеличение запрещенной зоны на 0.35 эВ (табл. 3). Еще одной примечательной особенностью данного типа деформации является сокращение длины "хвоста", с которого начинается зона проводимости за счет сдвига E^a уровня.

Давления для трехмерной деформации указаны в табл. 4.

Расчет энергий дефектообразования

В первую очередь энергии дефектообразования рассчитывались для дефекта замещения Te_{Cd} в недеформированной решетке. Более подробную информацию о способах расчета энергии дефектообразования для систем в различных условиях можно найти в работах [4, 9, 10].

На рис. 11 показаны рассчитанные нами энергии дефектообразования Te_{Cd} для случаев Te - и Cd -насыщенных газовых фаз.

Для теллур-насыщенных условий в качестве химического потенциала теллура μ_{Te} , используется энергия его кристаллического состояния. Это значение совпадает с максимальным значением химического потенциала теллура в газовой фазе, выше значения которого вместо соединения $CdTe$ начинает формироваться кристаллический теллур.

Для расчета данной энергии была использована тригональная ячейка с тремя атомами теллура. Параметры решетки были вычислены как $a = 4.287 \text{ \AA}$ (экспериментальное значение $4.457 \text{ \AA}$) и $c = 5.922 \text{ \AA}$ (экспериментальное значение $5.929 \text{ \AA}$). Химический потенциал был вычислен как

$$\mu_{Te} \equiv \mu_{Te}^{\text{solid}} = -3.805 \text{ эВ/атом.} \quad (3)$$

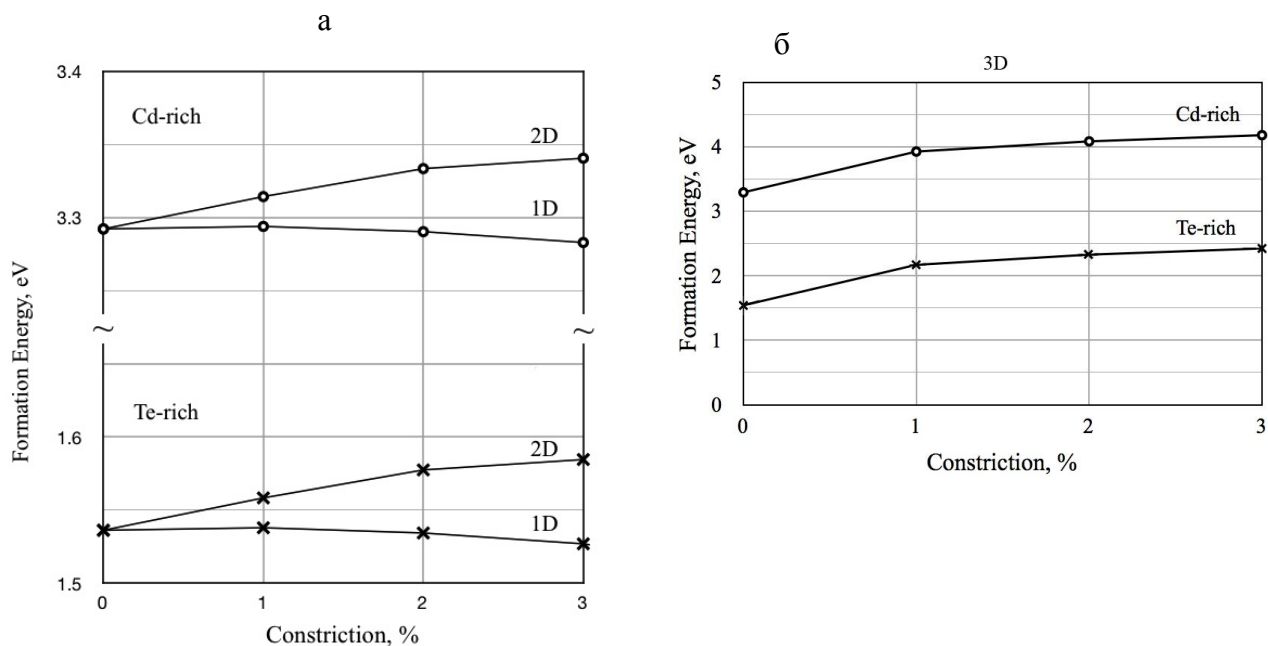


Рис. 11. Энергии дефектообразования Te_{Cd} при одномерном и двумерном сжатии (а), а также при гидростатической деформации (3D) (б)

Зная μ_{Te} , несложно вычислить химический потенциал кадмия:

$$\mu_{\text{Cd}} = \mu_{\text{CdTe}}^{\text{solid}} - \mu_{\text{Te}}^{\text{solid}}, \quad (4)$$

где $\mu_{\text{CdTe}}^{\text{solid}}$ — полная энергия теллурида кадмия, рассчитанное значение которой составляет -6.035 эВ/(эл. яч.). Используя (2), мы получили энергию формирования дефекта замещения в условиях Те-насыщения $\Delta H_f = 1.491$ эВ.

Были проведены аналогичные расчеты для Cd-насыщенных условий.

Решетка Браве кадмия — гексагональная с одним атомом кадмия на элементарную ячейку. Постоянные решетки были вычислены как $a = 3.056$ Å (экспериментальное значение 2.979 Å) и $c = 6.221$ Å (экспериментальное значение 5.618 Å). Химический потенциал кристаллического кадмия

$$\mu_{\text{Cd}} \equiv \mu_{\text{Cd}}^{\text{solid}} = -1.352 \text{ эВ/атом.} \quad (5)$$

Таким образом, в кадмий-насыщенных условиях энергия, необходимая для формирования дефекта, составляет величину $\Delta H_f = 3.247$ эВ.

Значения, полученные в данной работе, находятся в хорошем согласии с результатами, полученными ранее в работе [11]. Для расчета энергий дефектообразования при деформациях были использованы полные энергии сверхъячеек с дефектом и без него, а также энергия кристаллического CdTe в деформированном соответствующим образом состоянии. Результаты расчетов также приведены на рис. 11.

При одномерной и двумерной деформациях изменения в дефектообразовании незначительны (рис. 11, а). При одномерном сжатии на 3 % энергия дефектообразования Te_{Cd} увеличивается всего на 0.01 эВ, при двумерном сжатии — уменьшается на 0.04 эВ. При трехмерных деформациях картина немного другая. При 3 %-м гидростатическом сжатии (рис. 11, б) энергия дефектообразования Te_{Cd} возрастает примерно на 1 эВ по сравнению с недеформированной решеткой.

Было проведено сравнение с результатами, полученными ранее в работе [11]. Так, при 2 %-м гидростатическом сжатии кристаллической решетки теллурида кадмия энергия дефектообразования Te_{Cd} , полученная в работе [11], возрастает примерно на 0.3 эВ, в то время как в наших расчетах возрастание составляет величину 0.8 эВ. Это может быть обусловлено различиями в построении модели или принятых параметрах сходимости. Так, например, размер сверхъячейки в нашей работе составляет 128 атомов, а в работе [11] —

64 атомов. Параметр сходимости для сил Фейнман—Хельмана в нашей работе 0.01 эВ/Å, а в работе [11] — 0.02 эВ/Å.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

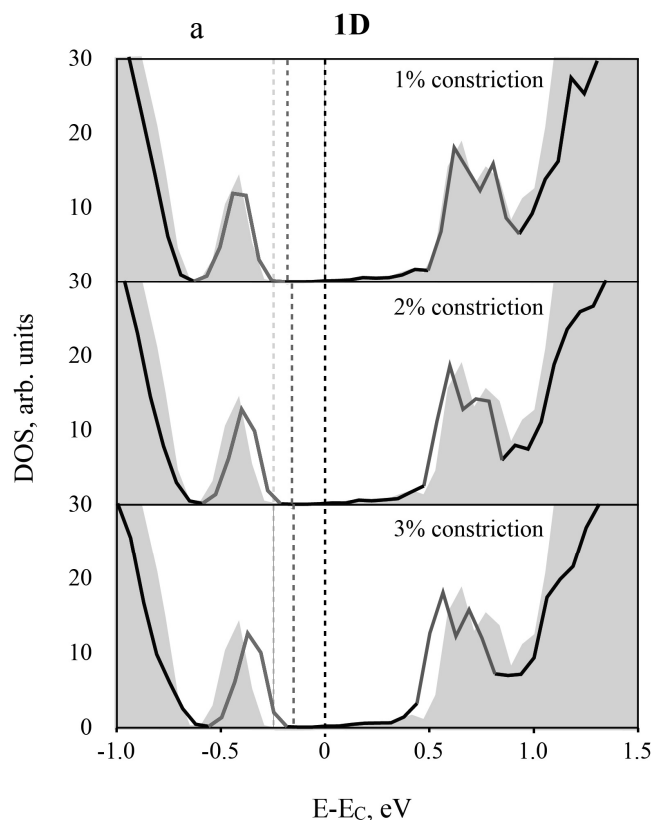
В работе представлены результаты расчетов энергетического уровня дефекта, проведенных для случая нейтрального зарядового состояния Te_{Cd}^0 .

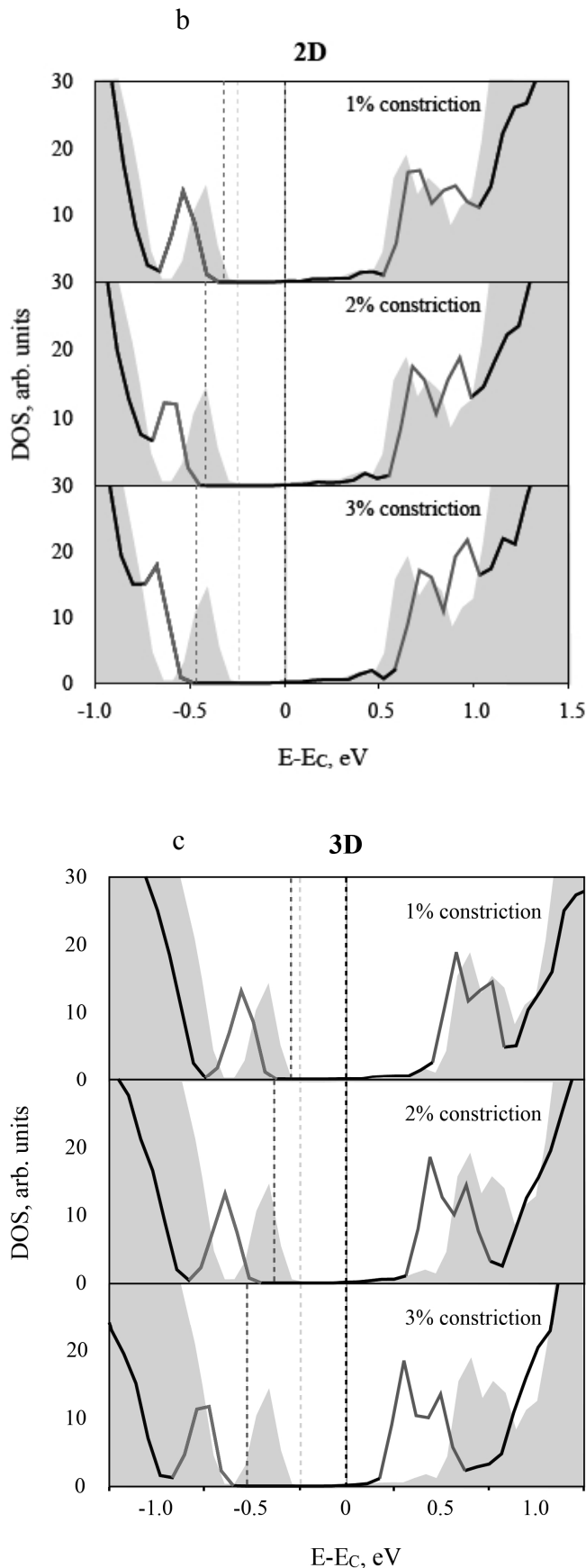
Определена его геометрия, а также установлены закономерности влияния трех типов деформаций на положение энергетических уровней в запрещенной зоне полупроводника.

Показано, что наиболее эффективной деформацией является одновременная деформация в двух направлениях, которая приводит к уширению запрещенной зоны и расхождению уровней нейтрального дефекта Te_{Cd} , что, несомненно, явится благоприятным фактором для спектроскопических характеристик детекторов на основе теллурида кадмия.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Плотности состояний при одномерной (1D, а), двумерной (2D, б) и трехмерной (3D, в) деформациях (сжатия на 1, 2 и 3 %) кристаллической решетки теллурида кадмия с дефектом замещения





СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Proceedings of the 9th International Workshop on Room Temperature Semiconductor X- and γ -ray Detectors, Associated Electronics and Applications. Grenoble, France, September 18–22, 1995. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. Netherlands, North-Holland: Elsevier, 1996. V. 380, N 1–2 / (Eds) M. Cuzin, R.B. James, P.F. Manfredi, P. Siffert. 509 p.
2. Demir D., Önder P., Öznülier T. Performance of CdTe detector in the 13–1333 keV energy range // Radiation Physics and Chemistry. 2010. V. 79. P. 1132.
3. Sordo S.D., Abbene L., Caroli E. et al. Progress in the development of CdTe and CdZnTe semiconductor radiation detectors for astrophysical and medical applications // Sensors. 2009. V. 9. P. 3491.
4. Багаев В.С., Клевков Ю.В., Колосов С.А., Кривобок В.С., Шепель А.А. Оптические и электрофизические свойства дефектов в высокочистом CdTe // Физика твердого тела. 2010. Т. 52, № 1. С. 37–42.
5. Kröger F.A. The defect structure of CdTe // Rev. Phys. App. 1977. V. 12. P. 205.
6. Fiederle M., Babentsov V., Franc J. et al. Growth of high resistivity CdTe and (Cd, Zn)Te crystals // Cryst. Res. Technol. 2003. V. 38. P. 588.
7. Berding M.A., Schilfgaarde M., Paxton A.T., Sher A. Defects in ZnTe, CdTe and HgTe – total energy calculations // J. Vac. Sci. Technol. A. 1990. V. 8. P. 1103.
8. Grill R., Fochuk P., Franc J. et al. High-temperature defect study of tellurium-enriched CdTe // Phys. Stat. Sol. (B). V. 243. P. 787.
9. Van De Walle C.G. First-principles calculations for defects and impurities: applications to III-nitrides // Journal of Applied Physics. 2004. V. 95. P. 3851.
10. Kresse J.F.G. Efficient iterative schemes for *Ab initio* total-energy calculations using a Plane-Wave Basis Set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169–11186.
11. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // Phys. Rev. B. 1964. V. 136. P. B864.
12. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 5048.
13. Ceperley D., Alder B. Ground-state of the electron-gas by a stochastic method // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 566.
14. Xiao H., Tahir-Kheli J., Goddard W.A. Accurate band gaps for semiconductors from density functional theory // Phys. Chem. Lett. 2011. V. 2. P. 212.
15. Carvalho A., Tagantsev A.K., Öberg S. et al. Cation-site intrinsic defects in Zn-doped CdTe // Phys. Rev. B. 2010. V. 81. 075215 (14 pages).
16. Du M.H., Takenaka H., Singh D.J. Native defects and oxygen and hydrogen-related defect complexes in CdTe: density functional calculations // Journal of Applied Physics. 2008. V. 104. 093521 (9 pages).
17. Lutz G. Semiconductor radiation detectors. Device Physics. Munich, Germany: Springer, 1999. 353 p.
18. Soundararajan R., Lynn K.G., Awadallah S. et al. Study of defect levels in CdTe using thermoelectric effect spectroscopy // Electronic Materials. 2006. V. 35. P. 1333.

19. Nicklas J.W., Wilkins J.W. Accurate electronic properties for (Hg, Cd) Te systems using hybrid density functional theory // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. 121308 (3 pages).
20. Li J., Gayles J., Kioussis N., Zhang Z., Grein C., Aquariden F. *Ab initio* studies of the unreconstructed polar CdTe (111) surface // J. of Electronic Materials. 2012. V. 41. P. 2745.
21. Zhang S.B. The microscopic origin of the doping limits in semiconductors and wide-gap materials and recent developments in overcoming these limits: a review // J. Phys. Cond. Matter. 2002. V. 14. P. R881.
22. Castleton S.W.M., Höglund A., Mirbt S. Managing the supercell approximation for charged defects in semiconductors: finite size scaling, charge correction factors, the band-gap problem, and the *Ab-initio* dielectric constant // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. 035215 (11 pages).

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург (Шепидченко А.О., Иркаев С.М.)

Department of Physics and Astronomy, Materials Theory Division, Uppsala University, Uppsala, Sweden (Шепидченко А.О., Мирбт С., Клинтенберг М.)

Department of Physics and Astronomy, Nuclear Physics Division, Uppsala University, Uppsala, Sweden (Хакансон О.)

Контакты: Иркаев Собир Муллоевич,
sobir_irkaev@mail.ru,

Материал поступил в редакцию 29.03.2013

DEFORMATIONS AS A TOOL FOR DEFECT LEVELS CONTROL. I. Zero-charged Te-antisite in CdTe

A. O. Shepidchenko^{1,2}, S. Mirbt², A. Håkansson³, M. Klintonberg², S. M. Irkaev¹

¹*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint-Petersburg*

²*Department of Physics and Astronomy, Materials Theory Division, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

³*Department of Physics and Astronomy, Nuclear Physics Division, Uppsala University, Uppsala, Sweden*

The properties of zero-charged Te-antisite (Te_{Cd}^0), have been examined using *Ab-initio* calculations. Defect energy levels and its occupancies were determined and symmetry reduction due to Jahn-Teller distortion seen. The Jahn—Teller distorted configuration places the $2A_1^a$ defect level closer to the valence band. This defect level position coincides with "unknown deep donor" position measured in some experiments. Partial densities of states and band structures have been calculated and analyzed. Also, the influence of three types of deformations (1D, 2D and 3D) on the defect energy levels and formation energies was investigated. It was found that the 2D deformation is the most effective for opening up the band gap of the semiconductor as well as for energetically separating the $2A_1^a$ and E^a defect levels.

Keywords: CdTe, Te-antisite, band structures, energy levels, deformations