

О.П. Малик

Явища переносу в CdTe:Cl і CdTe:Cu – розрахунок з перших принципів

Кафедра напівпровідникової електроніки, Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна;
omalyk@ukr.net

У представленій статті розглянуто метод визначення енергетичного спектра, хвильової функції носія заряду та кристалічного потенціалу в CdTe при довільно заданій температурі. За допомогою цього підходу в рамках методу суперкомірки розраховано температурні залежності енергій іонізації різних типів дефектів, спричинених введенням домішок хлору та міді в телурид кадмію. Також запропонований метод дозволяє визначити температурну залежність оптичного та акустичного потенціалів деформації, а також залежність від температури параметрів розсіяння носія заряду на іонізованих домішках, поляричних оптичних, п'єзооптичних та п'єзоакустичних фононах. У рамках близькодійючих моделей розсіяння розглянуто температурні залежності рухливості носія заряду та фактора Холла.

Ключові слова: явища переносу, кристалічні дефекти, CdTe, розрахунок з перших принципів.

Подано до редакції 07.09.2022; прийнято до друку 14.02.2023.

Вступ

Телурид кадмію має унікальні фізичні властивості, необхідні для фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, а саме необхідну ширину забороненої зони та необхідне значення коефіцієнта поглинання. Структура власних і домішкових дефектів переважно визначає електричні та оптичні властивості цього матеріалу. Тому вивчення дефектної структури CdTe є актуальною прикладною задачею. У літературі є велика кількість робіт, у яких *ab initio* підхід використовується для розрахунку структури дефектів телуриду кадмію [1-7]. Проте в цих роботах не визначено шлях встановлення зв'язку між структурою точкових дефектів і кінетичними властивостями CdTe, які безпосередньо визначають електричні властивості матеріалу. У поточній роботі ця проблема буде вирішуватися в два етапи.

На першому етапі на основі теорії функціоналу густини (DFT) проводиться розрахунок з перших принципів енергетичних характеристик напівпровідника: енергетичного спектра, електронної

(або діркової) хвильової функції та потенціальної енергії в кристалічній решітці. Зазвичай передбачається, що наведені вище характеристики описують стан кристала при $T = 0$ К. У цій статті буде запропоновано метод розрахунку цих характеристик напівпровідника сфалериту при наперед заданій температурі. На основі цього методу будуть розраховані параметри розсіювання носіїв заряду (електронів і важких дірок) на різних точкових дефектах кристала при заданій температурі. На другому етапі методом суперкомірки визначають енергії іонізації різного роду дефектів, спричинених введенням домішок хлору та міді в телурид кадмію. Знаючи ці енергії іонізації та параметри розсіювання носіїв заряду, можна розрахувати рівень Фермі та, у свою чергу, кінетичні коефіцієнти CdTe. Слід зазначити, що в літературі є ряд робіт, присвячених явищам переносу в напівпровідниках, зокрема в CdTe [8], які базуються на *ab initio* розрахунках [9-13]. Проте в цих роботах зв'язок між структурою дефекту та кінетичними властивостями не вказано.

I. Розрахунок температурних залежностей хвильової функції та кристалічного потенціалу

При розгляді явищ переносу в телуриді кадмію використовувалися близькодючі моделі розсіювання носіїв заряду [8, 14-16]. Ці близькодючі моделі розсіювання містять кілька констант розсіювання як параметри, які, у свою чергу, потребують розрахунку хвильової функції зони провідності та валентної зони та самоузгодженого кристалічного потенціалу. Для

$$E_g(x, T) = -0.302 + 1.93x - 0.81x^2 + 0.832x^3 + 5.35 \times 10^{-4}T(1 - 2x) \quad (1)$$

Використовуючи цей підхід, були отримані наступні значення фактора α (цей параметр визначає суміш традиційних обмінних кореляційних потенціалів GGA для Cd і Te, псевдопотенціалів [20, 21] і обмінного потенціалу Хартрі-Фока [22]) для ідеальної елементарної комірки (структура сфалериту) телуриду кадмію: $\alpha = 0,397$ відповідає $T = 0$ K, $\alpha = 0,288$ відповідає $T = 300$ K. При цьому отримано хвильові функції електронів у зоні провідності і валентній зоні та кристалічний потенціал при температурах 0 K та 300 K.

Відповідно були визначені такі константи розсіювання для електронів і важких дірок, а саме:

1) Константи розсіювання для взаємодії носія заряду з полярним оптичним (РО) фононом, взаємодії носія заряду з п'єзоакустичним (РАС) фононом і взаємодії носія заряду з п'єзооптичним (РОР) фононом

$$A_{PO} = A_{PAC} = A_{POR} = \int \psi^*(R^2 - r^2)\psi dr \quad (2)$$

2) d_0 – константа оптичного потенціалу деформації, яку обирають рівною максимальному значенню серед трьох констант потенціалу потенціалу деформації, які відповідають одній поздовжній і двом поперечним гілкам оптичних коливань решітки.:

$$d_{0v} = a_0 \int \psi^* \varepsilon_v \cdot V \psi dr, \quad v = 1,2,3; \quad (3)$$

де область інтегрування така ж, як і у випадку РО розсіювання; ε_v – унітарний контраваріантний вектор поляризації оптичних коливань; вектор V виражається через похідні самоузгодженої потенціальної енергії електрона за координатами атомів елементарної

обчислення цих вищезазначених констант використовувався метод розрахунку енергетичного спектра електронів і кристалічного потенціалу, представлений у [17,18]. Це дозволило виділити фізичні розв'язки рівняння Шредінгера із множини математичних розв'язків рівняння Шредінгера за наступним критерієм вибору фізичних розв'язків рівняння Шредінгера, а саме: при заданій температурі теоретична ширина забороненої зони повинна збігатися з її експериментальним значенням, яке було визначено з експериментального виразу для твердого розчину $Hg_{1-x}Cd_xTe$ [19]:

комірки [15].

3) E_{AC} – константа акустичного потенціалу деформації, яку вибрали рівною максимальному значенню серед трьох констант акустичного потенціалу деформації, що відповідають одній поздовжній і двом поперечним гілкам акустичних коливань решітки:

$$\begin{aligned} E_{AC\parallel} &= -(-I_1/4 + I_2/2 + I_3/2); \\ E_{AC1\perp} &= -(-I_1/4 + I_2/4 + I_3/2); \\ E_{AC2\perp} &= -(-I_1/2 + I_2/2 + I_3/4); \end{aligned} \quad (4)$$

де $I_1 = \int \psi^* V_1' \psi dr'$; $I_2 = \int \psi^* V_2' \psi dr'$; $I_3 = \int \psi^* V_3' \psi dr'$; V_1' ; V_2' ; V_3' – проекції вектора V в косокутній системі координат, утвореній примітивними векторами структури цинкової обманки;

4) Константа розсіювання на іонізованих домішках:

$$A_{II} = \int_{\Omega} \psi^* \frac{1}{r} \psi^* dr \quad (5)$$

Слід зазначити, що в (2)-(5) інтегрування здійснюється за методом, запропонованим у [17]. Формули (2) - (5) показують, що згадані вище константи розсіювання виражаються через інтеграли по хвильовій функції Ψ і

кристалічному потенціалу U . Розрахунок цих інтегралів проводився на основі тривимірної В-сплайн-інтерполяції та методу скінченних зміщень [23]. Залежність Ψ і U від температури зумовлює температурну залежність констант розсіювання. Припускаючи найпростішу, лінійну, температурну залежність, можна розрахувати температурні залежності констант розсіювання важких дірок і електронів:

$$A_{POhh} = (12.2 + 1.84 \times 10^{-3}T) \times 10^{-20}m^2, \quad A_{POe} = (12.24 + 2.088 \times 10^{-4}T) \times 10^{-20}m^2, \quad (6a)$$

$$d_{0hh} = -43.1 - 0.018T eV, \quad d_{0e} = -20.93 - 4.053 \times 10^{-3}T eV \quad (6b)$$

$$E_{AChh} = -3.07 - 2.28 \times 10^{-3}T eV, \quad E_{ACe} = -2.423 - 4.628 \times 10^{-4}T eV \quad (6c)$$

$$A_{IIhh} = (0.442 - 8.90 \times 10^{-6}T) \times 10^{10}m^{-1}, \quad A_{IIe} = (0.4794 - 7.405 \times 10^{-6}T) \times 10^{10}m^{-1} \quad (6d)$$

Використовуючи ці співвідношення, можна розрахувати температурні залежності ймовірностей переходів електронів і, у свою чергу, кінетичних коефіцієнтів телуриду кадмію.

Зауважимо, що для розрахунку рухливості важких дірок використано температурну залежність ефективної маси важкої дірки, яка була визначена в [17]. Ця температурна залежність має вигляд:

$$m_{hh} = (0.214 + 9.902 \times 10^{-5}T)m_0 \quad (7)$$

Можна відзначити якісну подібність виразу (7) до аналогічного виразу для $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($x \sim 0,2$), отриманого підгонкою до експериментальних даних [24].

II. Визначення температурних залежностей енергій іонізації різних видів домішкових дефектів

У запропонованому дослідженні вивчалися акцепторні дефекти, спричинені введенням домішки

міді, а саме: Cu_{Cd} , $V_{Te} - Cu_{Cd}$, $Cu_{Cd} - Te_{Cd}$, $Cu_{Cd} - V_{Cd}$. Дослідження енергетичного спектру дефектної структури телуриду кадмію проводили в рамках методу суперкомірки на основі коду ABINIT: Cu_{Cd} – суперкомірка Cd_7Te_8Cu ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит); $V_{Te} - Cu_{Cd}$ – суперкомірка Cd_7Te_7Cu ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит); $Cu_{Cd} - Te_{Cd}$ – суперкомірка $Cd_{14}Te_{17}Cu$ ($2 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит); $Cu_{Cd} - V_{Cd}$ – суперкомірка $Cd_{14}Te_{16}Cu$ ($2 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит). Далі були розглянуті донорні дефекти, викликані введенням домішки хлору, а саме: Cl_{Te} , $Cl_{Te} - Cd_{Te}$. Енергетичний спектр цих дефектних структур розраховано методом суперкомірки ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит) на основі коду ABINIT: Cl_{Te} – суперкомірка Cd_8ClTe_7 ; $Cl_{Te} - Cd_{Te}$ – суперкомірка Cd_9ClTe_6 . Аналогічні розрахунки були проведені для ідеальної суперкомірки Cd_8Te_8 ($1 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит) і $Cd_{16}Te_{16}$ ($2 \times 1 \times 2$ кубічна структура сфалерит). При цьому для ідеальних суперкомірок були отримані наступні значення параметра α : Cd_8Te_8 – $\alpha = 0.09$ відповідає $T = 0$ К, $\alpha = 0.0182$ відповідає $T = 300$ К; $Cd_{16}Te_{16}$ – $\alpha = 0.076$ відповідає

Таблиця 1.

Енергетичний спектр ідеальної та дефектної суперкомірки.

1×1×2 кубічна структура сфалерит					
T=0, E _g =1.65 eV, α=0.09			T=300 K, E _g =1.48 eV, α=0.0182		
Рівень енергії ідеального Cd ₈ Te ₈ , eV	Енергетичні рівні дефекту, eV	Енергія іонізації, eV	Рівень енергії ідеального Cd ₈ Te ₈ , eV	Енергетичні рівні дефекту, eV	Енергія іонізації, eV
E _c - 1×(4.194) (0) E _v - 2×(2.541) (2)*	Cu _{Cd} 1×(3.946) (0) 1×(2.344) (1) 1×(2.344) (2)	При T=0 p- тип. При T ≥ 0 ΔE _A = 1.405	E _c - 1×(4.108) (0) E _v - 2×(2.620) (2)	Cu _{Cd} 1×(3.858) (0) 1×(2.463) (1) 1×(2.463) (2)	ΔE _A = 1.238
E _c - 1×(4.194) (0) E _v - 2×(2.541) (2)	V _{Te} - Cu _{Cd} 1×(4.017) (0) 1×(2.226) (1) 1×(1.910) (2)	При T=0 p- тип. При T ≥ 0 ΔE _A = 1.476	E _c - 1×(4.108) (0) E _v - 2×(2.620) (2)	V _{Te} - Cu _{Cd} 1×(3.990) (0) 1×(2.214) (1) 1×(2.054) (2)	ΔE _A = 1.370
E _c - 1×(4.194) (0) E _v - 2×(2.541) (2)	Cl _{Te} 1×(5.073) (0) 1×(3.637) (1) 2×(2.394) (2)	ΔE _D = 0.557	E _c - 1×(4.108) (0) E _v - 2×(2.620) (2)	Cl _{Te} 1×(5.070) (0) 1×(3.569) (1) 2×(2.459) (2)	ΔE _D = 0.539
E _c - 1×(4.194) (0) E _v - 2×(2.541) (2)	Cl _{Te} -Cd _{Te} 1×(4.219) (0) 1×(4.177) (1) 1×(4.177) (2)	ΔE _D =0.017	E _c - 1×(4.108) (0) E _v - 2×(2.620) (2)	Cl _{Te} -Cd _{Te} 1×(4.211) (0) 1×(4.148) (1) 1×(4.148) (2)	ΔE _D = -0.040
2×1×2 кубічна структура сфалерит					
T=0, E _g =1.65 eV, α=0.076			T=300 K, E _g =1.48 eV, α=0.00571		
Рівень енергії ідеального Cd ₁₆ Te ₁₆ , eV	Енергетичні рівні дефекту, eV	Енергія іонізації, eV	Рівень енергії ідеального Cd ₁₆ Te ₁₆ , eV	Енергетичні рівні дефекту, eV	Енергія іонізації, eV
E _c - 1×(4.130) (0) E _v - 2×(2.478) (2)	Cu _{Cd} - V _{Cd} 1×(2.967) (0) 1×(2.360) (1) 1×(1.752) (2)	При T=0 p- type. При T ≥ 0 ΔE _A = 0.489	E _c - 1×(4.046) (0) E _v - 2×(2.558) (2)	Cu _{Cd} - V _{Cd} 1×(2.881) (0) 1×(2.323) (1) 1×(1.722) (2)	ΔE _A = 0.323
E _c - 1×(4.130) (0) E _v - 2×(2.478) (2)	Cu _{Cd} - Te _{Cd} 1×(3.085) (0) 1×(3.077) (0) 1×(1.845) (2)	ΔE _A = 0.599	E _c - 1×(4.046) (0) E _v - 2×(2.558) (2)	Cu _{Cd} - Te _{Cd} 1×(3.012) (0) 1×(3.005) (0) 1×(1.855) (2)	ΔE _A = 0.447

* Запис 2×(2,541) (2) означає, що існує 2-кратний вироджений рівень енергії з числом заповнення, рівним 2.

$T = 0$ К, $\alpha = 0.00571$ відповідає $T = 300$ К. Розрахункові енергетичні спектри суперкомірок представлені в Таблиці 1.

Наступний етап розрахунків полягає у встановленні температурної залежності енергії іонізації різних типів дефектів. Для цього використовувався метод, представлений у [17]. Після цього, припускаючи лінійну залежність, отримуємо температурні залежності енергії іонізації дефекту:

$$Cu_{Cd}: \Delta E_A = 1.405 - 5.567 \times 10^{-4} T, \quad (8a)$$

$$V_{Te} - Cu_{Cd}: \Delta E_A = 1.476 - 3.533 \times 10^{-4} T, \quad (8b)$$

$$Cu_{Cd} - Te_{Cd}: \Delta E_A = 0.599 - 5.067 \times 10^{-4} T, \quad (8c)$$

$$Cu_{Cd} - V_{Cd}: \Delta E_A = 0.489 - 5.533 \times 10^{-4} T, \quad (8d)$$

$$Cl_{Te}: \Delta E_D = 0.557 - 6 \times 10^{-5} T, \quad (8e)$$

$$Cl_{Te} - Cd_{Te}: \Delta E_D = 0.017 - 1.9 \times 10^{-4} T, \quad (8f)$$

Слід зазначити, що лише для одного типу досліджуваних дефектів дискретний рівень дефекту зливається із зоною провідності, а саме: $Cl_{Te} - Cd_{Te}$ при $T = 89$ К. Для інших типів дефектів з підвищенням температури відбувається лише зменшення енергії іонізації без злиття із зоною провідності.

III. Обговорення

У розрахунках кінетичних властивостей враховувалися лише дефекти з найменшою енергією іонізації, оскільки вони роблять домінуючий внесок у явища переносу. Як видно з рівнянь (8a)-(8f), для легованого міддю CdTe такий дефект є $Cu_{Cd} - V_{Cd}$, тоді як для легованого хлором CdTe це дефектний комплекс $Cl_{Te} - Cd_{Te}$.

Проведено порівняння теоретичних температурних залежностей рухливості важких дірок з експериментальними даними, наведеними в [25]. Параметри телуриду кадмію, використані для розрахунку, представлені в [17]. Тому для телуриду кадмію, легованого міддю, рівень Фермі визначається рівнянням електронейтральності:

$$p - n = N_A / \{1 + 2 \exp[(E_A - F)/(k_B T)]\}, \quad (9)$$

де N_A – концентрація домішки міді і рівень дефекту при заданій температурі вибирають відповідно до (8d).

Розрахунок температурних залежностей

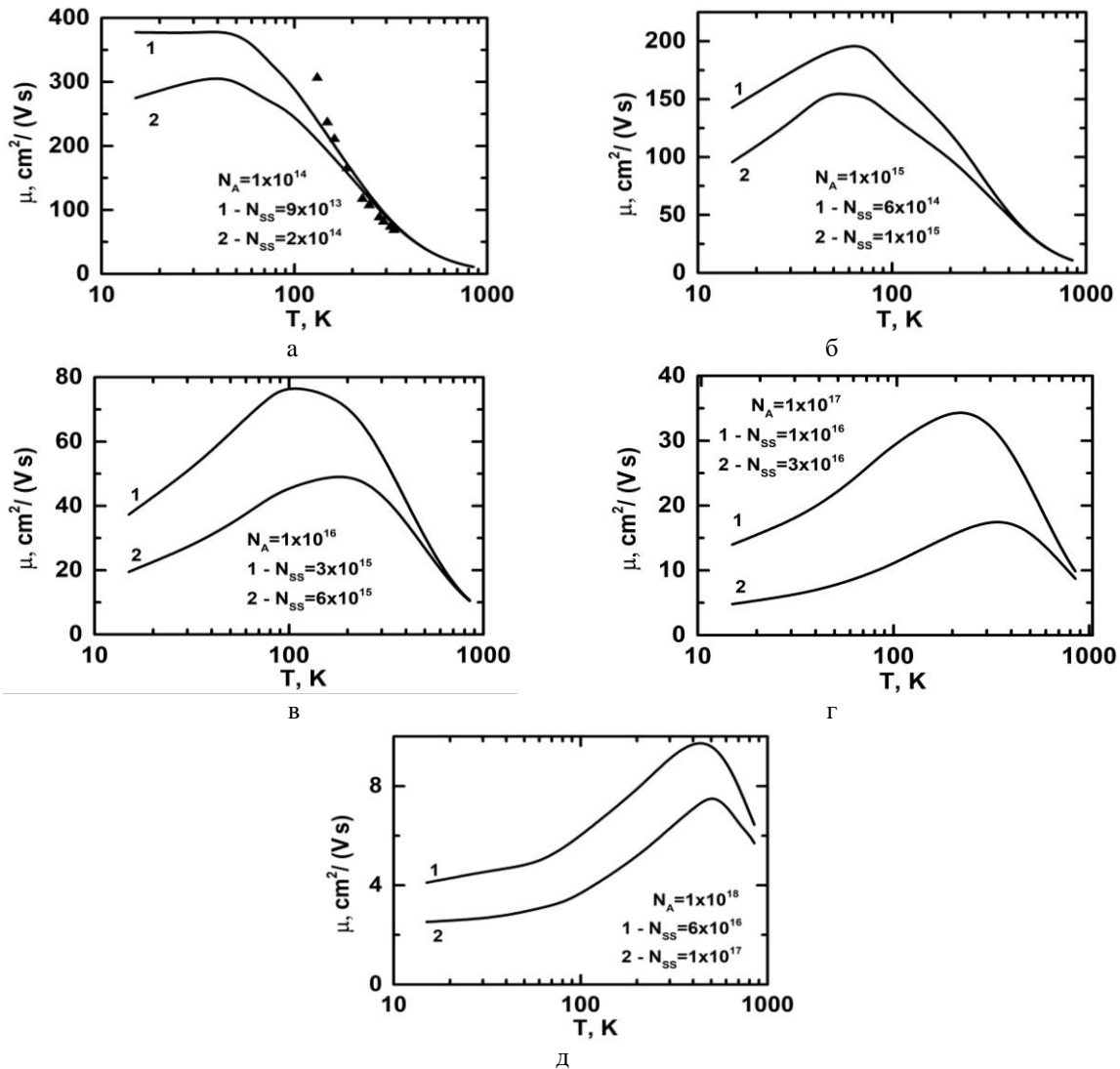


Рис. 1. – Температурні залежності рухливості важких дірок у кристалах телуриду кадмію з різною концентрацією дефектів. а – $N_A = 1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$; б – $N_A = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$; в – $N_A = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$; г – $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; д – $N_A = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

рухливості важкої дірки проводився на основі близькодійючих моделей розсіяння [14,15,17] в рамках точного розв'язку кінетичного рівняння Больцмана [26].

Розраховано температурні залежності рухливості важких дірок у кристалах телуриду кадмію з концентрацією домішки міді $1 \times 10^{14} \div 1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Результати розрахунку представлені на Рис.1. Для кожного значення концентрації міді N_A були обрані такі значення концентрації центрів статичної деформації N_{SS} , які дозволяли б охопити всі можливі значення рухливості важких дірок при низьких температурах. Порівняння теоретичних кривих з експериментальними даними проводилось лише для концентрації акцепторних дефектів $1 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$ (див. Рис. 1а). Видно, що теоретична крива досить добре узгоджується з експериментальними даними. На жаль, експериментальних даних для інших значень концентрації домішки міді в літературі немає.

Для важких дірок порівнювалися теоретичні криві, отримані за допомогою двох конкуруючих

підходів: близькодійючі моделі розсіяння і далекодійючі моделі розсіяння. Результати розрахунків представлені на Рис. 2. Штрихові лінії 1 і 2 – результати розрахунку залежності $\mu(T)$, отримані в наближенні часу релаксації за далекодійючими моделями розсіяння: крива 2 описує високотемпературну область ($\hbar\omega \ll k_B T$, ω – частота оптичних коливань, крива 1 описує область низьких температур ($\hbar\omega \gg k_B T$). Стосовно кривих 1 і 2 слід зробити наступне зауваження. Для телуриду кадмію температура Дебая $\theta_D = 239 \text{ К}$. Отже, відповідно до наведених нерівностей область низьких температур буде визначатися умовою $T < 24 \text{ К}$, а область високих температур – умовою $T > 2400 \text{ К}$. Як видно з рис. 2(а), експериментальні точки потрапляють в область, де $T \sim \theta_D$, тобто де застосування наближення часу релаксації (пружне розсіювання) є некоректним. З іншого боку, близькодійючі моделі розсіяння важких дірок дозволяють описати непружне розсіювання, тому їх

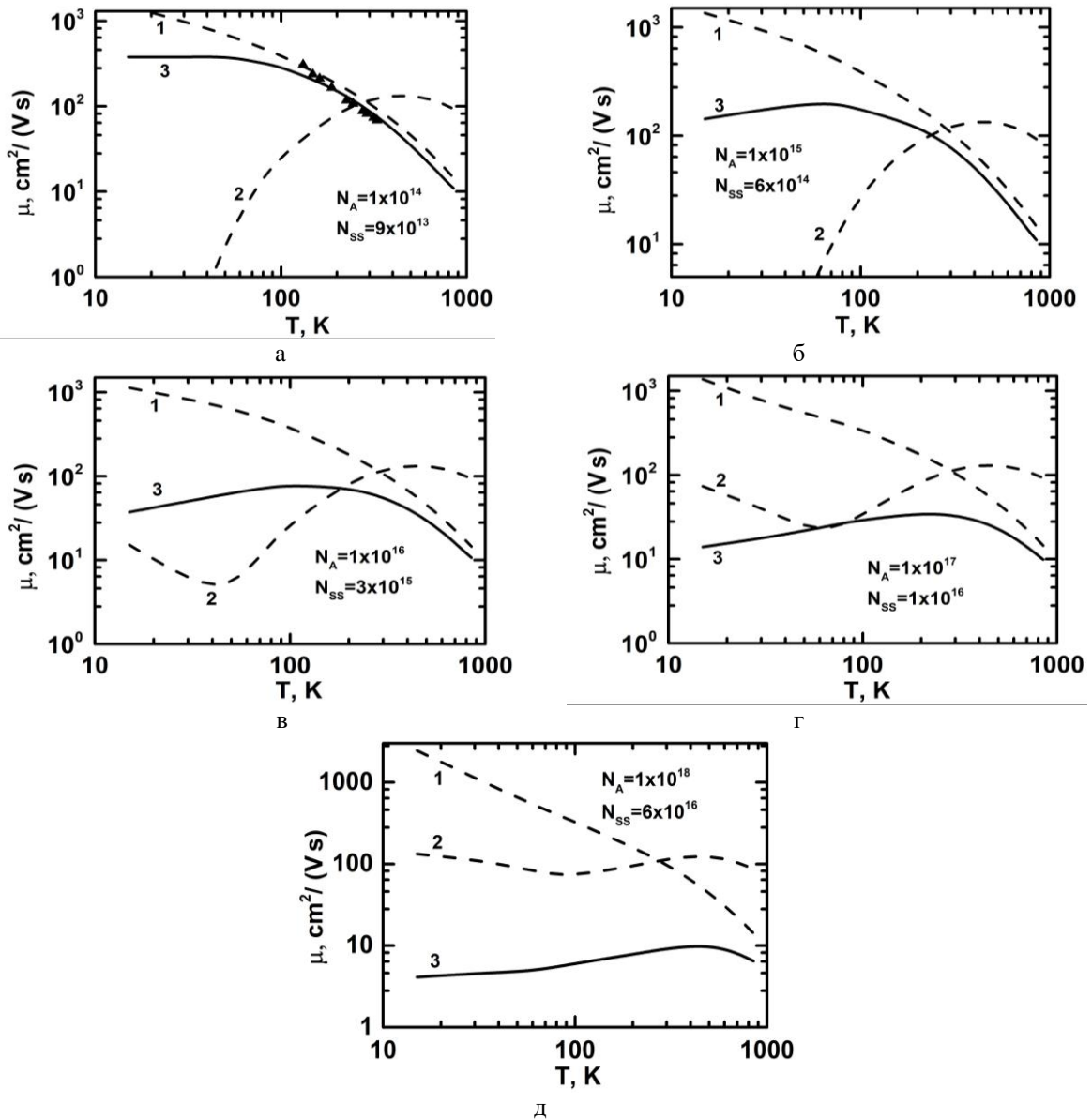


Рис. 2. – Залежності, що відповідають різним теоретичним підходам. 1, 2 – далекодійючі моделі розсіяння (наближення часу релаксації); 3– близько- діючі моделі розсіяння.

застосування в цьому діапазоні температур є правильним. Крім того, крива 3 суттєво відрізняється якісно та кількісно від кривих 1 і 2. Враховуючи збіг кривої 3 з експериментом, можна стверджувати, що близькодійучі моделі розсіяння дають більш адекватний опис фізичної реальності, ніж далекодійучі моделі.

Розраховані на основі запропонованого методу залежності фактора Холла важкої дірки від температури представлені на Рис. 3. Видно, що ці

залежності мають мінімуми, які розташовані наступним чином – чим більша концентрація домішок міді, тим вище температура мінімуму.

Теоретичні розрахунки порівнювали з експериментальними даними для легованого хлором CdTe [27]. Як видно з (8e)-(8f), дефект з мінімальною енергією іонізації є дефектним комплексом Cl_{Te} – Cd_{Te}. Враховуючи злиття рівня цього дефекту із зоною провідності, рівняння електронейтральності для рівня Фермі можна записати у вигляді:

$$n - p = N_D / \left[1 + 2 \exp\left(\frac{F - E_D}{k_B T}\right) \right] - \text{до злиття рівня дефекту}; \quad (9a)$$

$$n - p = N_D - \text{після злиття рівня дефекту}, \quad (9b)$$

де N_D – концентрація хлору, а рівень дефекту E_D при заданій температурі вибирається відповідно до (8f).

Як і у випадку важких дірок, температурні залежності рухливості електронів були розраховані на основі близькодійучих моделей розсіяння [14,15,17] в рамках точного розв'язку кінетичного рівняння Больцмана [26].

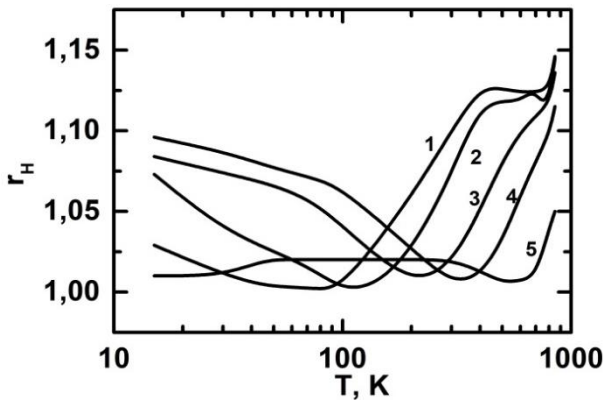


Рис.3. Залежність фактора Холла важких дірок від температури в кристалах телуриду кадмію з різною концентрацією міді. 1 – $N_A=1 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$; 2 – $N_A=1 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$; 3 – $N_A=1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$; 4 – $N_A=1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$; 5 – $N_A=1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$.

Для зразків, легованих хлором, розраховано теоретичні температурні залежності рухливості

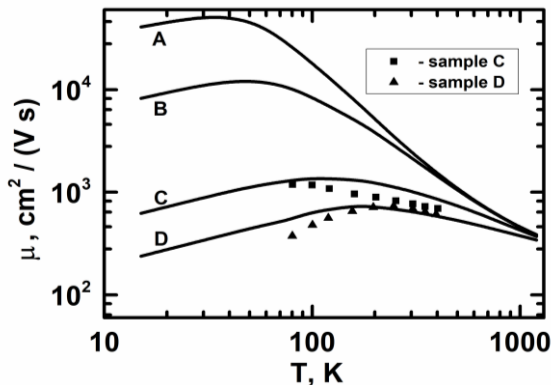


Рис. 4. – Температурні залежності рухливості електронів у легованому хлором CdTe. Експериментальні дані – [27].

електронів для таких концентрацій дефектів (див. Рис. 4): зразок А – $N_D=5 \times 10^{14} \text{cm}^{-3}$, $N_{SS}=1.2 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$; зразок В – $N_D=5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$, $N_{SS}=6 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$; зразок С – $N_D=5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, $N_{SS}=8 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$; зразок D – $N_D=5 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$, $N_{SS}=1.8 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$. Як видно, теоретичні криві С і D досить добре узгоджуються з експериментальними даними при високій температурі та високій концентрації дефектів. На жаль, в літературі відсутні експериментальні дані для такого типу зразків при малих концентраціях дефектів.

Вищевказаний метод розрахунку дозволяє отримати температурну залежність фактора Холла електрона для зразків, легованих хлором (див. Рис. 5). Ці залежності мають мінімуми, що відповідають температурі, за якої відбувається перехід від механізму SS-розсіювання до механізму PO-розсіювання. З рис. 5 видно, що чим вище концентрація дефектів, тим вище температура переходу.

Якщо порівняти теоретичні криві, отримані вищевказаним методом, з теоретичними кривими, отриманими в наближенні часу релаксації (див. рис. ба-д), можна побачити, що наближення часу релаксації дає теоретичні криві, які набагато менш узгоджуються з експериментом (крива 1 відповідає низьким температурам, а крива 2 – високим температурам у наближенні часу релаксації),

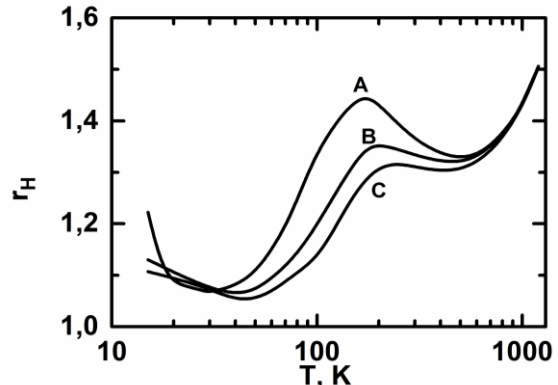


Рис. 5. – Температурна залежність фактора Холла електрона в n-CdTe.

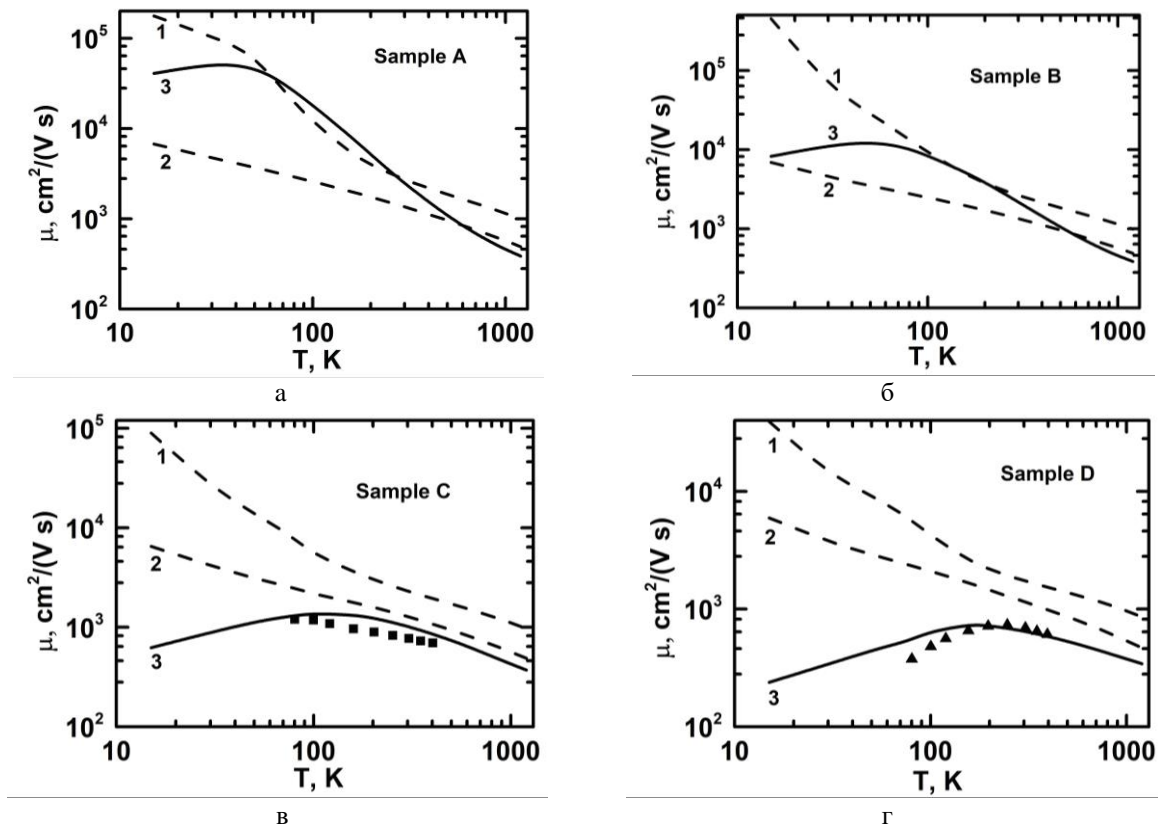


Рис. 6. – Порівняння теоретичних кривих, отриманих в рамках далекодіючих (криві 1 і 2) та близькодіючих моделей (крива 3) розсіяння зразків, легованих хлором.

особливо в області високих концентрацій дефектів. Це свідчить про те, що запропонований у статті метод більш адекватно описує дефектну структуру кристалів та їх кінетичні властивості.

Висновок

Автором розглянуто нову схему розрахунку енергетичного спектру, хвильової функції та потенціальної енергії електрона в кристалі при заданій

температурі. На основі цього визначено температурні залежності енергій іонізації домішкових (Cu і Cl) дефектів різного типу, а також температурні залежності кінетичних коефіцієнтів. Слід зазначити, що запропонована методика розрахунку може бути застосована до всіх домішкових напівпровідників зі структурою сфалериту.

Малик О.П. – доктор фізико-математичних наук, професор.

- [1] I. Sankin, D. Krasikov, *Kinetic simulations of Cu doping in chlorinated CdSeTe PV absorbers*, Phys. Status Solidi A, 215, 1800887 (2019); <https://doi.org/10.1002/pssa.201800887>.
- [2] Su-Huai Wei, S. B. Zhang, *Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: the case of CdTe*, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 66, 155211 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.155211>.
- [3] Jie Ma, Su-Huai Wei, T. A. Gessert, Ken K. Chin, *Carrier density and compensation in semiconductors with multiple dopants and multiple transition energy levels: Case of Cu impurities in CdTe*, Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys., 83, 245207 (2011); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.245207>.
- [4] Ji-Hui Yang, Wan-Jian Yin, Ji.-Sang. Park, Jie Ma, Su-Huai Wei, *Review on first-principles study of defect properties of CdTe as a solar cell absorber*. Semicond. Sci. Technol., 31, 083002 (2016); <https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/8/083002>.
- [5] D. Krasikov, A. Knizhnik, B. Potapkin, S. Selezneva, T. Sommerer, *First-principles-based analysis of the influence of Cu on CdTe electronic properties*, Thin Solid Films 535, 322 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2012.10.027>.
- [6] W. Orellana, E. Menendez-Proupin, M. A. Flores, *Energetics and electronic properties of interstitial chlorine in CdTe*, Phys. Status Solidi B, 256, 1800219 (2019); <https://doi.org/10.1002/pssb.201800219>.
- [7] I. Sankin, D. Krasikov, *Defect interactions and the role of complexes in the CdTe solar cell absorber*, J. Mater. Chem. A 5, 3503 (2017); <https://doi.org/10.1039/C6TA09155E>.

- [8] O.P. Malyk, *The local inelastic electron–polar optical phonon interaction in mercury telluride*, Comput. Mater. Sci., 33/1-3, 153 (2005); <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2004.12.052>.
- [9] K. Kaasbjerg, K.S. Thygesen, K.W. Jacobsen, *Phonon-limited mobility in n-type single-layer MoS₂ from first principles*, Phys. Rev. B, 85, 115317 (2012); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115317>.
- [10] O. Restrepo, K. Varga, S. Pantelides, *First-principles calculations of electron mobilities in silicon: phonon and Coulomb scattering*, Appl. Phys. Lett., 94, 212103 (2009); <https://doi.org/10.1063/1.3147189>.
- [11] O.D. Restrepo, K.E. Krymowski, J. Goldberger, W. A Windl, *A first principles method to simulate electron mobilities in 2D materials*, New J. Phys. 16, 105009 (2014); <https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/10/105009>.
- [12] X. Li, J.T. Mullen, Z. Jin, K.M. Borysenko, M. Buongiorno Nardelli, K.W. Kim, *Intrinsic electrical transport properties of monolayer silicene and MoS₂ from first principles*, Phys. Rev. B 87, 115418 (2013); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.115418>.
- [13] Wu. Li, *Electrical transport limited by electron-phonon coupling from Boltzmann transport equation: An ab initio study of Si, Al, and MoS₂*, Phys. Rev. B 92, 075405 (2015); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.075405>.
- [14] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, *Local electron interaction with point defects in sphalerite zinc selenide: calculation from first principles*, Journal of Electron. Mater. 47, 4212 (2018); <https://doi.org/10.1007/s11664-018-6068-1>.
- [15] O.P. Malyk, *Prediction of the kinetic properties of sphalerite CdSe_xTe_{1-x} (0.1 ≤ x ≤ 0.5) solid solution: an ab initio approach*, Journal of Electron. Mater. 49, 3080 (2020); <https://doi.org/10.1007/s11664-020-07982-6>.
- [16] O.P. Malyk, *Electron scattering on the short-range potential of the crystal lattice defects in ZnO*, Can. J. Phys. 92, 1372 (2014); <https://doi.org/10.1139/cjp-2013-0075>.
- [17] O.P. Malyk, S.V. Syrotyuk, *Heavy hole scattering on intrinsic acceptor defects in cadmium telluride: calculation from the first principles*, Physics and Chemistry of Solid State. 23 (1), 89 (2022); <https://doi.org/10.15330/pcss.23.1.89-95>.
- [18] O.P. Malyk. *Calculation of the electron wave function and crystal potential in a sphalerite semiconductor at a given temperature*, Journal of nano- and electronic physics. 14, 05007 (2022); [https://doi.org/10.21272/jnep.14\(5\).05007](https://doi.org/10.21272/jnep.14(5).05007).
- [19] G.L. Hansen, J.L. Schmit, T.N. Casselman, *Energy gap versus alloy composition and temperature in Hg_{1-x}Cd_xTe*, J. Appl. Phys. 53, 7099 (1982); <https://doi.org/10.1063/1.330018>.
- [20] N.A.W. Holzwarth, A.R. Tackett, G.E. Matthews, *A Projector Augmented Wave (PAW) code for electronic structure calculations, Part I: atompaw for generating atom-centered functions*, Computer Phys. Comm., 135, 329 (2001); [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(00\)00244-7](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(00)00244-7).
- [21] A.R. Tackett, N.A.W. Holzwarth, G.E. Matthews, *A Projector Augmented Wave (PAW) code for electronic structure calculations, Part II: pwpaw for periodic solids in a plane wave basis*, Computer Phys. Comm. 135, 348 (2001); [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(00\)00241-1](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(00)00241-1).
- [22] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Generalized gradient approximation made simple*, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996); <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
- [23] C. de Boor, *A Practical Guide to Splines*, (Springer-Verlag, New York, 1978).
- [24] O.P. Malyk, *Electron scattering in Cd_xHg_{1-x}Te at high temperature*, Ukr. J. Phys., 35, 1374 (1990).
- [25] S. Yamada, *On the electrical and optical properties of p-type cadmium telluride crystals*, J. Phys. Soc. Jpn. 15, 1940 (1960); <https://doi.org/10.1143/JPSJ.15.1940>.
- [26] O.P. Malyk, *Nonelastic charge carrier scattering in mercury telluride*. J. Alloys Compd. 371/1-2, 146 (2004); <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2003.07.033>.
- [27] N.V. Agrinskaja, M.V. Alekseenko, O. A. Matveev, *On the mechanism of carrier scattering in chlorine-doped cadmium telluride crystals*, Fiz. Tech. Poluprovod. 5, 1029 (1981).

O. P. Malyk

Transport phenomena in CdTe:Cl and CdTe:Cu - calculation from the first principles

Semiconductor Electronics Department, Lviv Polytechnic National University, Lviv, Ukraine. omalyk@ukr.net

In the presented article the method of determining the energy spectrum, the wave function of the charge carrier and the crystal potential in CdTe at an arbitrarily given temperature is considered. Using this approach within the framework of the supercell method the temperature dependences of the ionization energies of various types of defects caused by the introduction of chlorine and copper impurities in cadmium telluride are calculated. Also the offered method allows to define the temperature dependence of the optical and acoustic deformation potentials and as well as the dependence on the temperature the charge carrier's scattering parameters on ionized impurities, polar optical, piezooptic and piezoacoustic phonons. Within the framework of short-range scattering models the temperature dependences of the charge carrier's mobility and Hall factor are considered.

Keywords: Transport phenomena, Crystal defects, CdTe, Ab initio calculation.