

PACS numbers: 61.05.cp, 68.37.Hk, 68.55.J-, 71.15.Mb, 71.20.Nr, 73.20.At, 78.20.Ci

## Оптико-енергетичні властивості об'ємного та тонкоплівкового телуриду кадмію (CdTe)

Г. А. Ільчук<sup>1</sup>, Р. Ю. Петрусь<sup>1</sup>, А. І. Кашуба<sup>1,2</sup>, І. В. Семків<sup>1</sup>,  
Е. О. Зміївська<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»,  
вул. Степана Бандери, 12,  
79013 Львів, Україна

<sup>2</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Тарнавського, 107,  
79005 Львів, Україна

У роботі подано результати експериментальних і теоретичних досліджень оптико-енергетичних властивостей монокристалічного зразка та тонких плівок CdTe. Наведено методіку синтезу, результати структурних та оптичних досліджень монокристалу та плівок CdTe, осаджених на поверхню слюди. У межах методи псевдопотенціалу теоретично вивчено динаміку зміни параметрів електронної підсистеми у кристалі та плівці CdTe. Встановлено, що заборонена щілина кристалу має прямозонний характер. На основі густини станів встановлено генезу зони провідності та валентної зони. З використанням співвідношення Крамерса–Кроніга одержано спектри поглинання та відбивання, які задовільно корелюють з одержаними експериментальними даними.

The results of the experimental and theoretical studies of the optical-energy properties of a single crystal and thin films of CdTe are presented. The synthesis, structural and optical studies of the CdTe single crystal and thin films deposited on the mica are performed. By the method of pseudopotential, the dynamics of parameters' change of the electron subsystem in the CdTe crystal and films is theoretically studied. As established, the CdTe is characterized by direct band gap. Based on the density of states, the genesis of the conduction and valence bands is revealed. Using the Kramers–Kronig relations, the absorption and reflection spectra of the CdTe are obtained. Theoretical models and experimental data are in a good agreement.

В работе представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований оптико-энергетических свойств монокристаллического образца и тонких плёнок CdTe. Приведена методика синтеза, результаты структурных и оптических исследований монокристалла и плёнок CdTe,

осаждених на поверхню слюди. В рамках метода псевдопотенціала теоретично вивчена динаміка зміни параметрів електронної підсистеми в кристалі та плівці CdTe. Встановлено прямозонний характер забороненої зони кристалу. На основі густини станів встановлено генезис зони провідності та валентної зони. З використанням співвідношення Крамерса–Кроніга отримано спектри поглинання та відбиття, які задовільно корелюють з отриманими експериментальними даними.

**Ключові слова:** монокристал, тонка плівка, електронний енергетичний спектр, густина станів, оптичні функції.

**Key words:** single crystal, thin film, band-energy structure, density of states, optical functions.

**Ключевые слова:** монокристалл, тонкая плёнка, электронный энергетический спектр, плотность состояний, оптические функции.

*(Отримано 24 вересня 2018 р.)*

## 1. ВСТУП

Синтеза високоякісних монокристалів і тонких плівок CdTe, одержання та розуміння фізичної інформації про їхні структурні, оптичні й електронні властивості є необхідною умовою створення стабільних пристроїв на їх основі.

Зокрема, монокристали та тонкі плівки CdTe є перспективними матеріалами для створення детекторів рентгенівського і  $\gamma$ -випромінювання, що можуть стабільно працювати навіть за кімнатних температур, а також тонкоплівкових сонячних елементів завдяки оптимальному значенню ширини забороненої зони. Ефективність кращих сонячних елементів на лабораторному рівні зараз перевищує 22% [1], а модулі на основі CdTe досягли 18,6%, перевищуючи модулі мультикристалічного кремнію (за даними National Renewable Energy Laboratory). Сонячні елементи на основі CdTe, безумовно, є ключовими структурами фотовольтаїки, але залишається ряд певних технологічних завдань, вирішення яких, може привести до підвищення ефективності перетворення сонячної енергії.

Прогрес сонячних модулів наступного покоління забезпечується використанням комірок на основі варізонних структур, що характеризуються зміною ширини забороненої зони за товщиною [2], що уможливить збирати всі фотони з ультрафіолетової, видимої й інфрачервоної (ІЧ) областей. Цю ідею було експериментально випробувано на структурах GaAs/AlGaAs [3], вирощених з органічної парової фазової епітаксії (MOVPE), та до сьогодні інтенсивно використовують [4–6]. Ідея розширення спектрального робочого діапазону

завдяки використанню варізонних поглинальних шарів також вплинула на розвиток тонкоплівкових сонячних елементів на основі CdTe. Крім класичного використання телуриду кадмію [7], [8], перспективним є використання твердих розчинів заміщення на його основі, таких як CdZnTe [9], CdSeTe [10], CdMnTe [11].

Для створення варізонних структур з наперед заданими фізичними властивостями важливо розуміти кристалічну й енергетичну структури досліджуваного матеріалу. Оскільки вищевказані сполуки є твердими розчинами заміщення телуриду кадмію, то першим кроком до вивчення та прогнозування характеристик цих сполук є з'ясування структури чистого CdTe. Зонно-енергетичний спектр досліджуваних сполук CdTe є достатньо добре вивченим [12–16]. Однак тенденції світового розвитку електроніки вимагають мінімізацію витрат матеріалів на виробництво та мініятуризацію кінцевого продукту. Саме тому в останні десятиліття увагу дослідників привернуто на створення та вивчення властивостей наноструктурованих матеріалів, а перехід у дослідженнях до тонких плівок уможливило виявити ряд нових властивостей. Тому в роботі представлено порівняння теоретичних розрахунків оптико-енергетичних властивостей монокристалічного та тонкоплівкового CdTe.

## 2. МЕТОДИКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

### 2.1. Синтеза монокристалів і тонких плівок CdTe

Монокристали телуриду кадмію було вирощено з парової фази в замкненому об'ємі методом хемічних транспортних реакцій (ХТР) з використанням для забезпечення хемічного транспорту одного з трьох галогеновмісних переносників  $\text{NH}_4\text{X}$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ), згідно з методикою, описаною в [17]. Ріст проводили в трубчатій печі, яка уможлиблювала створювати дві ізотермічні температурні зони і в яку поміщали завантажену та вакуумовану ( $P = 1,3 \cdot 10^{-4}$  Па) ампулу. В частині ампули, яка містилась у високотемпературній зоні, знаходилося джерело в ізотермічних умовах за температури  $T_{\text{дж}}$ , а в зоні нижчих температур  $T_{\text{ос}}$  в ізотермічних умовах відбувалось осадження речовини та ріст монокристалу.

Одержання тонких плівок CdTe проводили у квазізамкнутому об'ємі (КЗО), згідно з методикою, описаною в [18]. Ця метода уможливило одержувати полікристалічні плівки CdTe в умовах, близьких до термодинамічної рівноваги, що забезпечує потрібні кристалографічні й електрофізичні властивості плівок. В процесі вирощування плівок CdTe області джерела й осадження знаходилися в ізотермічних умовах, що уможливило забезпечити рівномірний перехід матеріалу в парову фазу та його осадження в зоні кристалізації.

В якості підкладинок було використано щойно сколені пластинки слюди. Для одержання плівок CdTe встановлювали температурні режими  $T_{oc} = 770$  К,  $T_{дж} = 860$  К. Температурні режими росту ( $T_{дж}$ ,  $T_{oc}$ ) було обрано на основі термодинамічної аналізи складу парової фази (ПФ) та процесів масоперенесення; передбачали проведення процесу вирощування в умовах близьких до рівноважних.

## 2.2. Методика досліджень структури та морфології поверхні

Масиви експериментальних інтенсивностей і кутів відбивання від досліджуваних зразків у вигляді тонких плівок CdTe, нанесених на підкладинку із слюди, одержано на автоматичному дифрактометрі STOE STADI P (виробник — фірма 'STOE&Cie GmbH', Німеччина) з лінійним позиційно-прецизійним детектором PSD за схемою геометрії Бреґґа–Брентано на відбиття (увігнутий Гемонохроматор (1 1 1) типу Іоганна;  $CuK_{\alpha 1}$ -випромінення;  $2\theta/\omega$ -сканування, інтервал кутів  $2\theta$  —  $20,000^\circ \leq 2\theta \leq 117,905^\circ$  з кроком  $0,015^\circ$ ; температура при зйомці  $T = 25,0 \pm 0,2^\circ\text{C}$ ). Первинну обробку експериментальних дифракційних масивів, розрахунок теоретичних дифрактограм, рентгенівську фазову аналізу, індексування параметрів елементарних комірок проводили за допомогою пакету програм STOE WinXPOW і програми PowderCell [19].

Морфологію поверхні й елементний склад плівок CdTe досліджено з використанням растрового електронного мікроскопа РЕМ-106И («Селмі», м. Суми) з енергодисперсійним рентгенівським аналізатором (ЕДАР).

## 2.3. Методика розрахунку

Розрахунки оптико-енергетичних властивостей кристалів і плівок CdTe проводили в рамках теорії функціоналу густини (DFT). Для розрахунку властивостей монокристалічного CdTe використано кристалічну ґратницю, основні параметри якої наведено нижче. Для опису обмінно-кореляційних властивостей кристалів використано наближення узагальненої градієнтної апроксимації GGA (в параметризації Пердью, Бурке і Ернцергофа (PBE)). Електронні енергії та густини визначено з рівняння Кона–Шема [20]. Для опису йонних потенціалів використано ультрам'які Вандербільтові псевдопотенціали [21]. Для кореляційного потенціалу застосовано формулу Кеєрлі–Алдера та вираз Гелл-Манна–Бракнера у границі високої густини. Розподіл зарядової густини обчислювали методом спеціальних точок із залученням техніки демпфування заряду. Для кожної кристалічної структури проводили релаксацію позицій йонів на основі розрахованих атомових сил та

визначали інтегральне напруження комірки.

Для розрахунків використано енергію обрізання плоских хвиль  $E_{\text{cut-off}} = 290$  еВ. Збіжність загальної енергії становила близько  $5 \cdot 10^{-6}$  еВ/атом. Електронна конфігурація для атомів є такою: у Cd —  $[\text{Kr}]4d^{10}5s^2$ , у Te —  $[\text{Kr}]5s^25p^4$ , де стан  $[\text{Kr}]$  належить до остова. Інтегрування по Бріллюєновій зоні виконувалося по сітці з  $2 \times 2 \times 2$  к-точок, одержаних за допомогою схеми Монхорста–Пака [22]. Спінові ступені вільності електронів у цьому розрахунку не враховано [23].

Оптимізацію атомових координат і параметрів елементарної комірки проведено з використанням методи Бройдена–Флетчера–Гольдфарба–Шанно (BFGS) [24]. Оптимізацію продовжували доти, поки сили, що діють на атоми не стали меншими за  $0,01$  еВ/Å, максимальне зміщення —  $10^{-6}$  Å, а механічні напруження в комірці — меншими за  $0,02$  ГПа. Зонно-енергетичну діаграму побудовано за високосиметрійними точками Бріллюєнової зони у оберненому просторі:  $\Gamma(0;0;0)$ ,  $M(0,5;0,5;0)$ ,  $R(0,5;0,5;0,5)$ ,  $X(0,5;0;0)$ ,  $F(0;0,5;0)$ ,  $Q(0;0,5;0,5)$ ,  $Z(0;0;0,5)$ .

Моделі плівки CdTe формували з об'ємного кристалу CdTe вздовж осі  $(1\ 0\ 0)$  кристалу. Відстань між формульними одиницями збільшувалася на  $15$  нм, утворюючи вакуумну щілину, щоб уникнути взаємодії між шарами.

Теоретично досліджені структури мають товщину до  $10$  нм, що є меншим, ніж у експериментально синтезованих плівках CdTe ( $1$  мкм). Оскільки першопринципні розрахунки плівок товщиною у  $1$  мкм вимагають значних комп'ютерних ресурсів, представлені нижче результати відображають вплив розмірного ефекту на властивості наноструктур.

Вибір методики теоретичних розрахунків зумовлений достатньо високим збігом теорії з експериментом для інших монокристалічних [25]–[28] та наноструктурованих матеріалів [29], [30].

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ТА ТЕОРЕТИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

#### 3.1. Рентгеноструктурна аналіза плівок CdTe

З аналізу дифрактограми для CdTe (рис. 1) встановлено, що плівка є однофазною. Фаза — сполука CdTe (структурний тип — ZnS, просторова група —  $F43m$ ,  $Z = 4$ ). Уточнений параметр елементарної гранецентрованої кубічної комірки  $a = 6,4765(19)$  Å, об'єм  $V = 271,7(2)$  Å<sup>3</sup>. Детальна аналіза положення експериментальних рефлексів та їхніх інтенсивностей у порівнянні із теоретичними засвідчила дуже сильну переважну орієнтацію зерен фази CdTe у синтезованій плівці (текстуру). Спостерігаються рефлекси від площин з Міллеровими індексами  $hkl$ :  $(111)$ ,  $(222)$ ,  $(333)$ ,

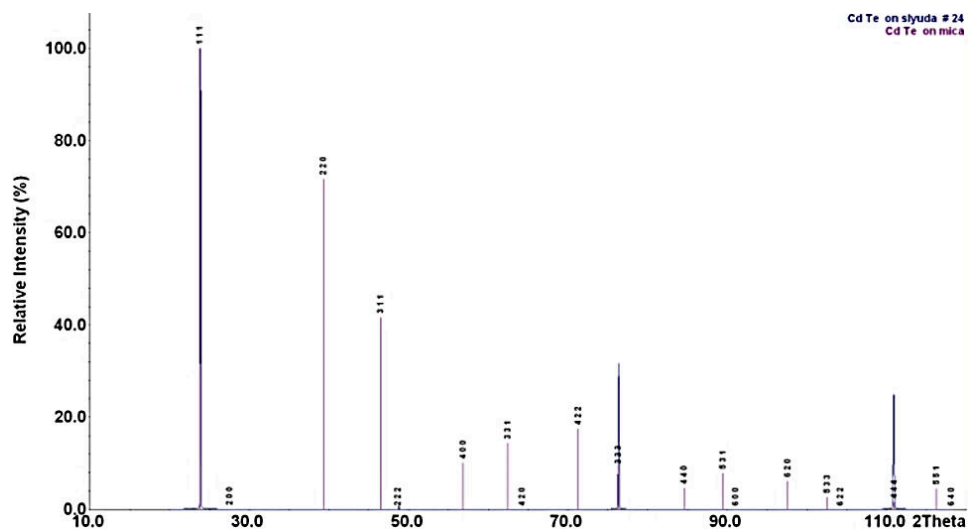


Рис. 1. Експериментальна дифрактограма плівки CdTe (синій колір) і теоретична дифрактограма фази CdTe на підкладинці слюди (червоний колір, разом із відмітками  $hkl$ ).<sup>1</sup>

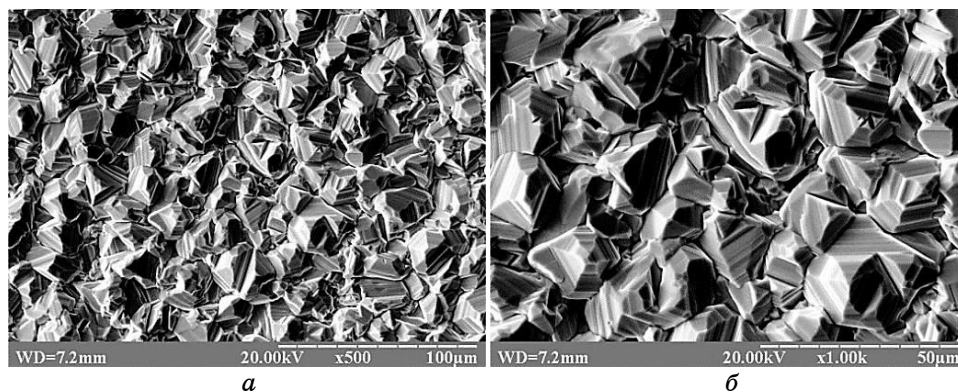


Рис. 2. Морфологія поверхні плівки CdTe на підкладинці слюди; РЕМ-106И, 20 кВ:  $\times 500$  (а),  $\times 1000$  (б).<sup>2</sup>

(444), тоді як рефлекси із іншими наборами  $hkl$  є майже повністю загашені за інтенсивностями.

### 3.2. Морфологія поверхні плівок CdTe

Мікрофотографію фрагменту осадженої плівки CdTe на підкладинці слюди зображено на рис. 2. Бачимо, що поверхня плівки є

рівномірно вкритою зернами (кристалітами) сполуки CdTe з середніми розмірами у 20 мкм. Рельєф поверхні не є пласким, що зумовлено різними швидкостями росту окремих кристалітів з різними орієнтаціями переважного напрямку росту. На поверхні плівки спостерігаємо як окремі зерна з чіткими міжзеренними межами, так і зрощення окремих зерен. Вхідні кути на окремих зернах свідчать про наявність двійників зрощення. Це й природньо, адже відомо, що CdTe властиве низьке значення енергії дефекту пакування [31], яке приблизно на порядок перевищує це значення для ковалентних напівпровідників Si та Ge.

Виявлено, що зерна полікристалічної плівки мають чітке огрунування простими кристалографічними формами. На всій поверхні зерен спостерігаються сходинки росту та досконале припасування суміжних зерен; майже не виявлено лакун. Деякі деталі морфології бачимо за великих збільшень (рис. 2, б).

Поверхня характеризується однорідним розподілом зерен за розміром, що уможливорює зробити висновок про однорідні умови росту по всій площині підкладинки.

Мікрорельєф шарів і граней кристалів (кристалітів), яких одержують із парової фази, служить чутливим індикатором умов кристалізації.

### 3.3. Електронний енергетичний спектр монокристалічного та плівкового CdTe

Для того, щоб виявити різницю між експериментальними [32] та рівноважними теоретичними параметрами ґратниці, використано процедуру оптимізації моделю структури, яка полягає у знаходженні мінімуму повної енергії, залежно від об'єму елементарної комірки кристалу.

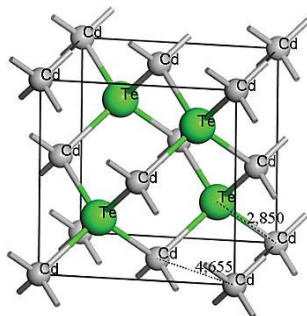
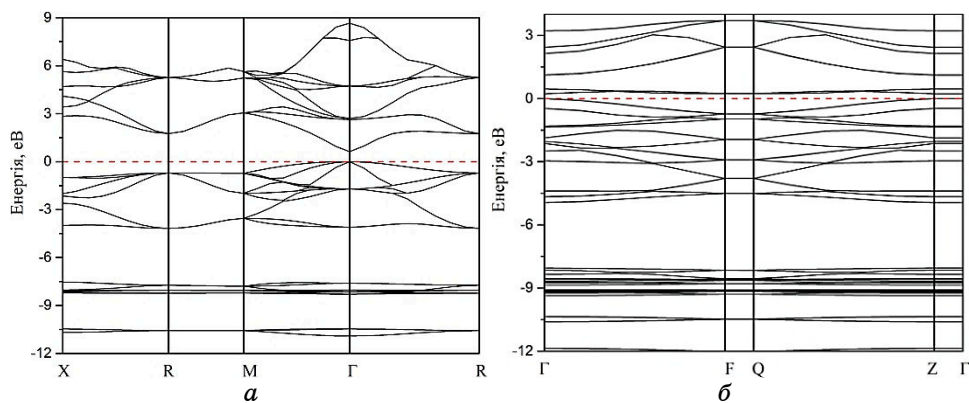
У таблиці наведено експериментальні [32] і розраховані значення рівноважних параметрів елементарної комірки кристалу CdTe (рис. 3). Для визначення координат атомів було знайдено конфігурацію координат, за якої повна енергія комірки є мінімальною.

На рисунку 4 зображено повну зонну енергетичну діаграму кристалу та плівки CdTe уздовж високосиметрійних ліній Бріллюєнової зони. Тут енергію відраховано від рівня Фермі (його положення відповідає точці 0 eV). Враховуючи, що товщина плівки відповідає одній формульній одиниці елементарної комірки, бачимо наявність розмірного ефекту, який проявляється в зменшенні ширини забороненої зони. Зазначимо, що для експериментальних зразків подібна ситуація не спостерігається, оскільки одержані плівки CdTe мають товщини порядку мікрометра.

Аналіза показує, що найменші енергетичні проміжки забороненої зони локалізовані в центрі Бріллюєнової зони (точка  $\Gamma$ ).

**ТАБЛИЦЯ.** Експериментальні та рівноважні розрахункові параметри структури кристалу CdTe.<sup>3</sup>

Параметри	Експеримент (в даній роботі)	Експеримент [31]	Теоретичні розрахунки (монокристал)
Просторова група	$F43m$	$F43m$	$F43m$
Точкова група	$T_d$	$T_d$	$T_d$
$a$ , Å	6,4765(19)	6,28	6,31
$V$ , Å <sup>3</sup>	271,7(2)	247,673	251,239

**Рис. 3.** Кристалічна ґратниця CdTe (міжатомова віддаль в одиницях Å).<sup>4</sup>**Рис. 4.** Зонно-енергетична діаграма монокристалу (а) і тонкої плівки (б) CdTe.<sup>5</sup>

Отже, кристал характеризується прямою забороненою зоною.

Порівнюючи теоретичні результати з літературними експериментальними даними [33], бачимо, що розрахунки в наближеннях GGA PBE для кристалу занижують значення ширини забороненої зони.

Найпростішим способом одержати близькі до експерименту ре-



зультати є застосування так званого оператора «ножиць», що приводить до зміни ширини забороненої щілини зсувом зон провідності в зону вищих енергій [34]. Успіхи, що досягаються з використанням оператора «ножиць», засновані на тісній близькості дисперсійної залежності енергій зон провідності, яка визначається з розв'язку рівнянь Кона–Шема. Зрушення зон провідності розрахункового енергетичного спектра зазвичай проводять до досягнення експериментального значення мінімальної ширини енергетичної щілини  $E_g$  сполуки. Для узгодження абсолютних значень  $E_g$  тут проведено корекцію розрахункової величини на значення  $\Delta E = 0,797$  еВ.

Аналіза парціальних внесків окремих орбіталей у функцію повної густини станів (рис. 5) та парціальних внесків окремих зон в електронну густину дала змогу визначити генезу зони провідності та валентних зон сполуки CdTe. Найнижчі зони від  $-12$  до  $-10$  еВ сформовані  $s$ -станами Телуру та  $s$ -,  $p$ -станами Кадмію. Формування наступних зон, що диспергують біля енергетичної мітки від  $-10$  до  $-5$  еВ, відбувається від внесків  $d$ -станів Те. Вершина валентного комплексу є практично сформованою з  $p$ -станів Те та Cd. Натомість, дно зони провідності, в основному, сформовано  $p$ -станами Те і Cd з підмішуванням  $s$ -станів обох елементів. Враховуючи правила відбору, результати розрахунків зонно-енергетичних спектрів і густини станів, можемо припустити, що найменшу заборонену щілину формують прямі  $s$ - $p$ -переходи.

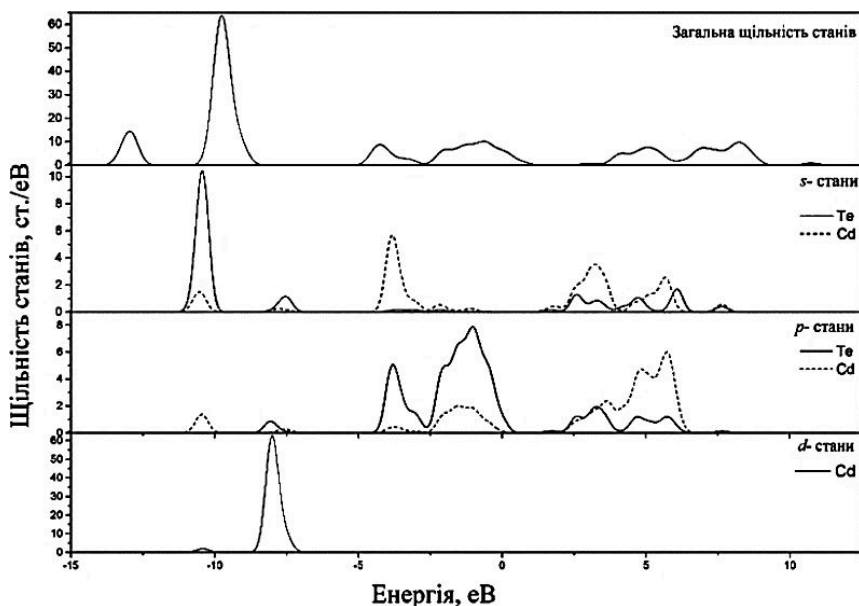


Рис. 5. Густина станів CdTe.<sup>6</sup>

### 3.4. Оптичні властивості плівок CdTe

Проведено дослідження спектральної залежності оптичного пропускання (Shimadzu UV-3600) у видимій і близькій інфрачервоній областях.

Спектри пропускання  $T(\lambda)$  плівок CdTe (рис. 6) характеризуються чітко вираженим краєм фундаментального поглинання, локалізованим в околі 850 нм, що є підтвердженням наявності сполуки

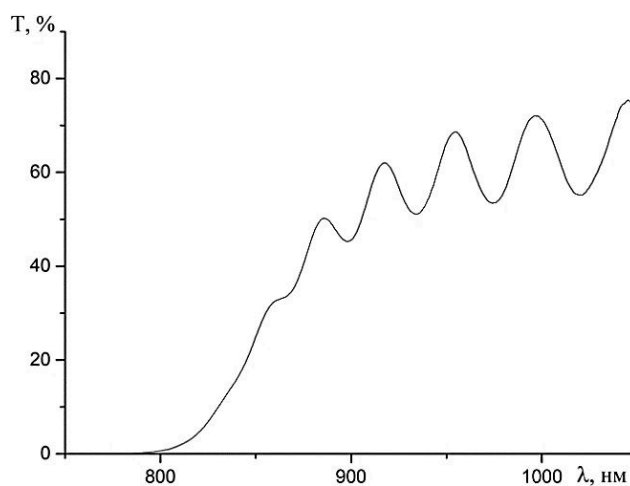


Рис. 6. Спектри пропускання плівки CdTe.<sup>7</sup>

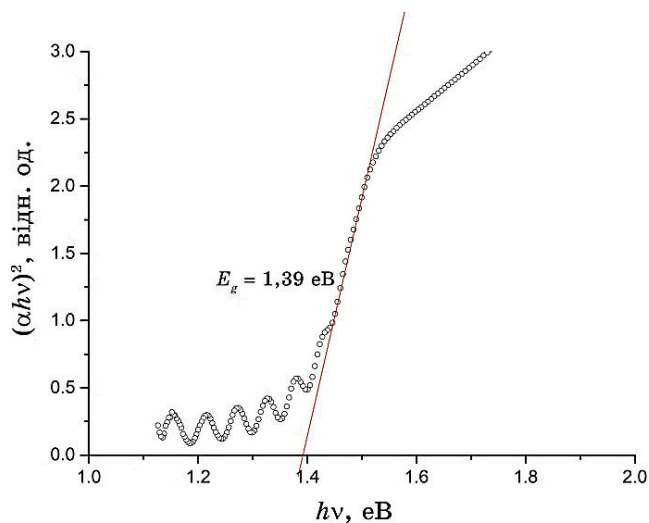


Рис. 7. Спектральна залежність оптичного поглинання для плівки CdTe.<sup>8</sup>

кадмію телуриду. Спектри пропускання також характеризуються наявністю екстремумів інтерференції, що свідчить про досконалість одержаних плівок. На рисунку 6 бачимо чіткі інтерференційні максимуми та мінімуми в діяпазоні довжин хвиль від 850 до 1050 нм, пов'язані з набігом фази на  $2\pi$  у фазовій товщині за зміни довжини світлової хвилі.

Було розраховано товщину плівки CdTe ( $h = 3,5$  мкм) з використанням методики [35], що базується на визначенні екстремумів спектральної залежності енергетичного коефіцієнта пропускання.

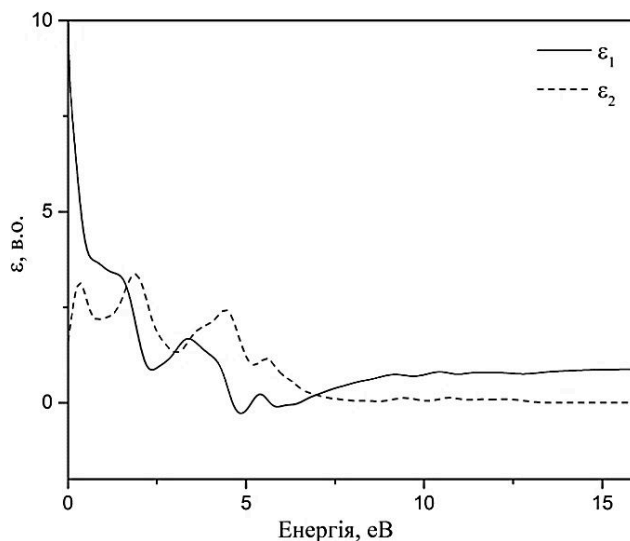
Спектральна залежність поглинання плівок CdTe у координатах  $(\alpha h\nu)^2 - h\nu$  демонструє наявність краю фундаментального поглинання. Проведено екстраполяцію лінійних ділянок кривої  $(\alpha h\nu)^2$  до перетину з віссю енергій (рис. 7) за методикою [36] і визначено оптичну ширину забороненої зони плівки CdTe: 1,39 еВ.

Лінійний характер залежностей  $(\alpha h\nu)^2 = f(h\nu)$  в інтервалі 1,45–1,50 еВ вказує на формування краю поглинання прямими міжзонними оптичними переходами.

Уявну частину діелектричної функції  $\varepsilon(\eta\omega)$  ( $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$ ) для CdTe (рис. 8) було розраховано з використанням наступного співвідношення [37]:

$$\varepsilon_2(\hbar\omega) = \frac{2e^2\pi}{V\varepsilon_0} \sum_{K,v,c} |\langle \Psi_K^c | \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{r} | \Psi_K^v \rangle|^2 \delta(E_K^c - E_K^v - \hbar\omega),$$

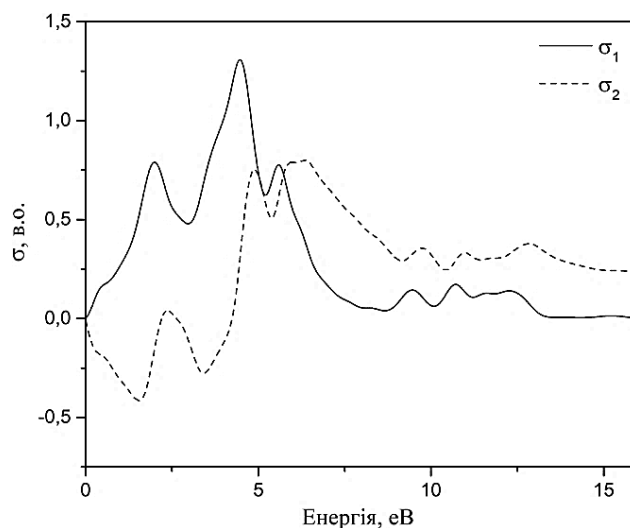
де  $V$  — об'єм елементарної комірки;  $E_K$  — енергія смуги; індекси  $s$  і



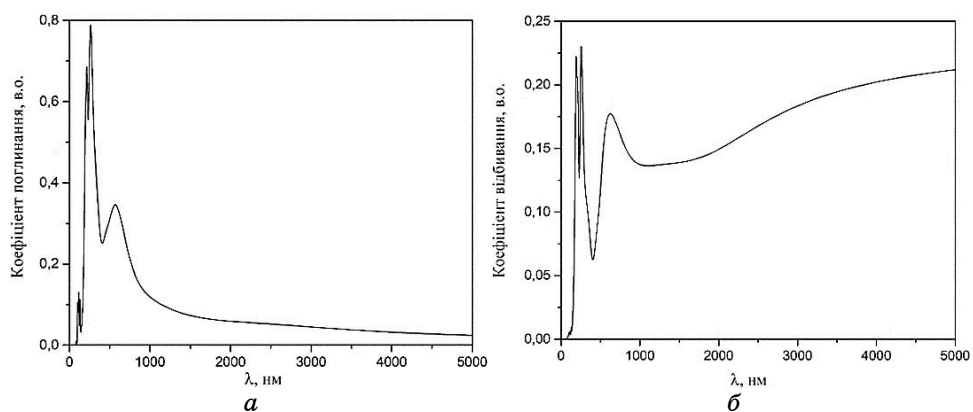
**Рис. 8.** Дійсна й уявна складові функції діелектричної проникності  $\varepsilon$  тонкої плівки CdTe.<sup>9</sup>

$v$  позначають стани провідності та валентної зони відповідно;  $u$  — періодична частина орбіталей комірки (хвильових функцій) у  $k$ -точці. Реальну частину діелектричної функції  $\varepsilon_1(\eta\omega)$  було одержано з використанням співвідношення Крамерса–Кроніга:

$$\varepsilon_1(\hbar\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{t\varepsilon_2(t)dt}{t^2 - (\hbar\omega)^2}.$$



**Рис. 9.** Дійсна й уявна складові спектрів оптичної провідності  $\sigma(\eta\omega)$  тонкої плівки CdTe.<sup>10</sup>



**Рис. 10.** Теоретично розраховані спектри оптичного поглинання (а) та відбивання (б) тонкої плівки CdTe.<sup>11</sup>

Спектри оптичної провідності  $\sigma(\eta\omega)$  CdTe (рис. 9) були одержані на основі їх співвідношення з діелектричною функцією  $\varepsilon(\eta\omega)$  з використанням відповідної зонної структури, розрахованої з перших принципів:

$$\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2 = -i \frac{\omega}{4\pi} (\varepsilon - 1).$$

Теоретично розраховані спектри оптичного поглинання та відбивання представлено на рис. 10.

#### 4. ВИСНОВКИ

Мікрофотографії поверхні плівок показали формування однорідних плівок з рівномірним розподілом зерен сполуки. Результати рентгеноструктурної аналізи підтвердили формування напівпровідникової сполуки CdTe (структурний тип — ZnS, просторова група —  $F43m$ ,  $Z=4$ ). Уточнено параметер елементарної гранецентрованої кубічної комірки:  $a=6,4765(19) \text{ \AA}$ ; об'єм  $V=271,7(2) \text{ \AA}^3$ .

На спектральних залежностях оптичного пропускання спостерігається наявність краю фундаментального поглинання, положення якого відповідає значенням характерним для сполуки CdTe. На спектрі оптичного поглинання зразка CdTe спостерігаються край фундаментального поглинання, на основі якого вдалося встановити значення оптичної ширини забороненої зони, що становить 1,45 eV.

На основі теоретичних розрахунків виявлено, що монокристалічний зразок і тонка плівка CdTe володіють прямою забороненою щільною, локалізованою в  $\Gamma$ -точці Бріллюєнгової зони. Значення величини  $E_g$  зменшується при переході від монокристалу до тонкої плівки, що може бути проявом розмірного ефекту.

Встановлено генезу зони провідності та забороненої зони. Значних відмінностей у густині станів при переході від монокристалу до тонкої плівки не виявлено.

Розраховано основні оптичні функції для тонкої плівки та виявлено схожу із експериментальними результатами тенденцію в поведінці.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. M. A. Green, Y. Hishikawa, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, and A. W. Y. Ho-Baillie, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, **26**: 427 (2018).
2. I. M. Dharmadasa, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **85**: 293 (2005).
3. I. Dharmadasa, J. Roberts, and G. Hill, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **88**: 413 (2005).
4. S. I. Krukovskiy, H. A. Ilchuk, R. S. Krukovskiy, I. V. Semkiv, E. O. Zmiiivska,

- and S. V. Tokarev, *J. Nano-Electron. Phys.*, **10**: 03025-1 (2018).
5. B. Kashyap and A. Datta, *IEEE Trans. Electron Devices*, **64**: 2564 (2017).
  6. S. Krukovskiy, R. Krukovskiy, H. Ilchuk, E. Zmiiovska, and I. Semkiv, *14th International Conference on Advanced Trends in Radioelectronics, Telecommunications and Computer Engineering (TCSET) (IEEE: 2018)*, p. 462; doi:10.1109/TCSET.2018.8336241.
  7. O. I. Olusola, M. L. Madugu, and I. M. Dharmadasa, *Mater. Chem. Phys.*, **191**: 145 (2017).
  8. G. A. Il'chuk, V. V. Kusnezh, V. Yu. Rud', Yu. V. Rud', P. Yo. Shapowal, and R. Yu. Petrus', *Semiconductors*, **44**, Iss. 3: 318 (2010).
  9. A. Morales-Acevedo, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **95**: 2837 (2011).
  10. D. E. Swanson, J. R. Sites, and W. S. Sampath, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **159**: 389 (2017).
  11. I. S. Yahia, F. Yakuphanoglu, S. Chusnutdinow, T. Wojtowicz, and G. Karczewski, *Curr. Appl. Phys.*, **13**: 537 (2013).
  12. J. Gutowski, K. Sebald, and T. Voss, *New Data and Updates for III–V, II–VI and I–VII Compounds (Ed. U. Rössler). Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter (Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology) (Berlin–Heidelberg: Springer: 2010)*, vol. **44C**, p. 287; [https://doi.org/10.1007/978-3-540-92140-0\\_209](https://doi.org/10.1007/978-3-540-92140-0_209).
  13. M. Cardona and D. L. Greenaway, *Phys. Rev.*, **131**: 98 (1963).
  14. S. Bloom and T. K. Bergstresser, *Solid State Commun.*, **6**: 465 (1968).
  15. E. Ghahramani, D. J. Moss, and J. E. Sipe, *Phys. Rev. B*, **43**: 9700 (1991).
  16. J. Ren, L. Fu, G. Bian, M. Wong, T. Wang, G. Zha, W. Jie, T. Miller, M. Z. Hasan, and T.-C. Chiang, *Phys. Rev. B*, **91**: 235303 (2015).
  17. G. A. Ilchuk, *J. Non. Cryst. Solids*, **352**: 4255 (2006).
  18. G. A. Il'chuk, I. V. Kurilo, R. Y. Petrus', and V. V. Kus'nezh, *Inorg. Mater.*, **50**: 559 (2014).
  19. W. Kraus and G. Nolze, *J. Appl. Crystallogr.*, **29**: 301 (1996).
  20. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140**: A1133 (1965).
  21. D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B*, **41**: 7892 (1990).
  22. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, *Phys. Rev. B*, **13**: 5188 (1976).
  23. A. Danylov, H. Ilchuk, and R. Petrus, *Acta Physica Polonica A*, **133**, Iss. 4: 981(2018).
  24. H. B. Schlegel, *J. Comput. Chem.*, **3**: 214 (1982).
  25. M. Ya. Rudysh, M. G. Brik, V. Yo. Stadnyk, R. S. Brezvin, P. A. Shchepanskyi, A. O. Fedorchuk, O. Y. Khyzhun, I. V. Kityk, and M. Piasecki, *Phys. B: Condens. Matter*, **528**: 37 (2018).
  26. A. Majchrowski, M. Chrunik, M. Rudysh, M. Piasecki, K. Ozga, G. Lakshminarayana, and I. V. Kityk, *J. Mater. Sci.*, **53**: 1217 (2018).
  27. A. I. Kashuba, M. Piasecki, O. V. Bovgyra, V. Yo. Stadnyk, P. Demchenko, A. Fedorchuk, A. V. Franiv, and B. Andriyevsky, *Acta Phys. Pol. A*, **133**: 68 (2018).
  28. M. Chrunik, A. Majchrowski, K. Ozga, M. Ya. Rudysh, I. V. Kityk, A. O. Fedorchuk, V. Yo. Stadnyk, and M. Piasecki, *Current Applied Physics*, **17**, Iss. 8: 1100 (2017).
  29. P. M. Yakibchuk, O. V. Bovgyra, and I. V. Kutsa, *J. Phys. Stud.*, **19**: 17021 (2015).
  30. P. M. Yakibchuk, O. V. Bovgyra, L. R. Toporovska, and I. V. Kutsa, *J. Nano-*

- Electron. Phys.*, **9**: 02030-1 (2017).
31. G. A. Il'Chuk, I. V. Kurilo, R. Y. Petrus', V. V. Kus'nezh, and T. N. Stan'ko, *Inorg. Mater.*, **49**, Iss. 4: 329 (2013).
  32. P. E. Van Camp and V. E. Van Doren, *Solid State Commun*, **91**: 607 (1994).
  33. *Cadmium Telluride (CdTe) Band Structure (Eds. O. Madelung, U. Rössler, and M. Schulz). Vol. 41B. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter (II-VI and I-VII Compounds; Semimagnetic Compounds)* (Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag: 1999); doi: 10.1007/10681719\_621.
  34. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.*, **77**: 3865 (1996).
  35. R. Swanepoel, *J. Phys. E*, **16**: 1214 (1983).
  36. G. A. Il'Chuk, I. V. Kurilo, R. Yu. Petrus', and V. V. Kus'nezh, *Inorg. Mater.*, **50**, Iss. 6: 559 (2014).
  37. M. Gajdoš, K. Hummer, G. Kresse, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B*, **73**: 045112 (2006).

---

<sup>1</sup>Lviv Polytechnic National University,  
12, S. Bandera Str.,  
79013 Lviv, Ukraine

<sup>2</sup>Ivan Franko National University of Lviv,  
107 Tarnavsky Str.,  
79005 Lviv, Ukraine

- <sup>1</sup> Fig. 1. The experimental XRD patterns for CdTe film (blue) and the theoretical XRD patterns for CdTe phase on the mica substrate (red, together with *hkl* indexes).
- <sup>2</sup> Fig. 2. Morphology of the CdTe film on mica substrate; REM-106I, 20 kV:  $\times 500$  (*a*),  $\times 1000$  (*b*).
- <sup>3</sup> TABLE. Experimental and calculated parameters of the CdTe crystal structure.
- <sup>4</sup> Fig. 3. CdTe crystal lattice (distance between atoms is in units of Å).
- <sup>5</sup> Fig. 4. Band structure of the CdTe single crystal (*a*) and thin film (*b*).
- <sup>6</sup> Fig. 5. Density of states of CdTe.
- <sup>7</sup> Fig. 6. Transmission spectrum of the CdTe film.
- <sup>8</sup> Fig. 7. Spectral dependence of optical absorption for the CdTe film.
- <sup>9</sup> Fig. 8. The real and imaginary components of dielectric permittivity  $\varepsilon$  of the CdTe thin film.
- <sup>10</sup> Fig. 9. The real and imaginary components of the spectra of the optical conductivity  $\sigma(\eta\omega)$  of the CdTe thin film.
- <sup>11</sup> Fig. 10. Calculated spectra of optical absorption (*a*) and reflection (*b*) of the CdTe thin film.