

Д.М. Фреїк<sup>1</sup>, Л.В. Туровська<sup>2</sup>, І.В. Горічок<sup>1</sup>, О.М. Матківський<sup>1</sup>  
**Кристалохімічне представлення амфотерного впливу  
домішки вісмуту у станум телуриді**

<sup>1</sup>Кафедра фізики і хімії твердого тіла  
Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018, e-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua)  
<sup>2</sup>Кафедра медичної інформатики, медичної і біологічної фізики  
Івано-Франківського національного медичного університету,  
вул. Галицька, 2, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018, e-mail: [lturovska@gmail.com](mailto:lturovska@gmail.com)

Запропоновано моделі точкових дефектів у легованих вісмутом кристалах станум телуриду з урахуванням амфотерної дії домішки ( $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Bi}^{3-}$ ). З'ясовано вплив величини диспропорціонування зарядового стану домішки на зміну концентрації носіїв заряду. На основі запропонованих кристалоквазіхімічних формул розраховано залежності концентрації точкових дефектів, холлівської концентрації носіїв заряду від вмісту легуючої домішки.

**Ключові слова:** станум телурид, легування, точкові дефекти, вісмут, кристалоквазіхімічні формули.

Стаття постуила до редакції 15.05.2014; прийнята до друку 15.09.2014.

## Вступ

Станум телурид – особливий матеріал серед сполук IV-VI через достатньо широку область гомогенності, що повністю лежить на боці халькогену (від  $50,1 \pm 0,1$  до  $50,9 \pm 0,1$  атомного вмісту телуру при 673 К для  $\text{SnTe}$  [1-5]), він характеризується тільки  $p$ -типом провідності та високою концентрацією дірок, яка зростає із збільшенням вмісту телуру (від  $p = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  при насиченні оловом до  $1,5 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  при насиченні телуром за умови відпалу при температурі 973 К для  $\text{SnTe}$  [6]). Рядом теоретичних і експериментальних робіт [7-9] встановлено, що домінуючим типом дефектів у  $\text{SnTe}$  є вакансії у катіонній підґратці  $V_{\text{Sn}}$ . Це пов'язано з тим, що при релаксації напруг навколо катіонного вузла є великий енергетичний ефект. Про це свідчать, зокрема, і спостережуване зменшення параметра ґратки із збільшенням вмісту телуру в області гомогенності та порівняння пікнометричної і рентгенівської густин [6, 9]. Числові розрахунки енергетичного спектра вакансій металу і халькогену [7] показали, що для сполук IV-VI катіонні вакансії є двократно зарядженими акцепторами  $V_{\text{Sn}}^{2-}$ , а аніонні – двократно зарядженими донорами  $V_{\text{Te}}^{2+}$ . Однак за даними мессбауерівської спектроскопії [10] частина атомів стануму для  $\text{SnTe}$  може бути у чотиривалентному стані, тому їх вивільнення буде

зумовлювати утворення йонізованих вакансій  $V_{\text{Sn}}^{4-}$ .

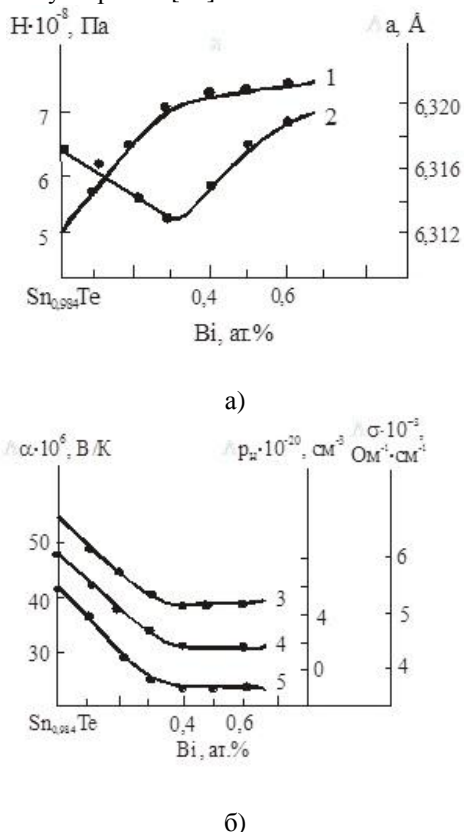
Дослідження концентраційних залежностей властивостей в межах області гомогенності сполуки, а також легування є важливою проблемою, яка потребує вивчення як поведінки точкових дефектів, так і механізмів їх утворення і взаємодії. Крім того, зауважимо, що оптимізація параметрів  $\text{SnTe}$  пов'язана з необхідністю зниження концентрацій носіїв струму шляхом впливу на дефектну підсистему. Цього можна досягти через легування різними домішками, важливими серед яких є елементи V групи Періодичної таблиці, зокрема, вісмут. При цьому досягається зростання коефіцієнта термо-ЕРС, питомої електропровідності і суттєве зменшення коефіцієнта теплопровідності за рахунок зростання розсіювання на фонах [6].

Не дивлячись на значну кількість публікацій з досліджуваної тематики [10-12], на сьогодні не існує єдиної думки щодо природи і зарядового стану точкових дефектів та механізмів легування кристалів  $\text{SnTe}:\text{Bi}$ . Це у значно гальмує перспективу отримання матеріалу із наперед заданими властивостями. У зв'язку з цим у даній роботі проведено вивчення механізмів дефектоутворення у кристалах станум телуриду, легованих вісмутом.

## І. Фізико-хімічні властивості

Вплив домішки вісмуту на властивості  $\text{SnTe}$  було

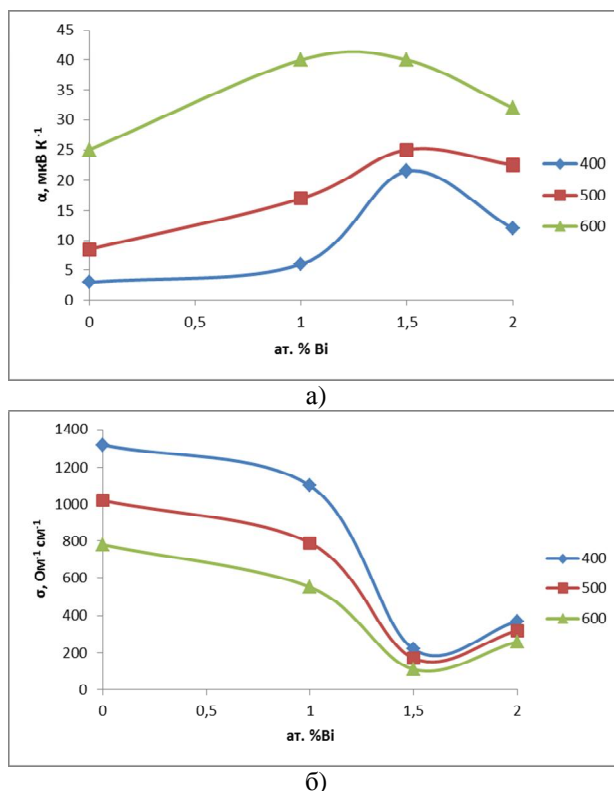
розглянуто у роботі [11]. Так, зокрема, авторами показано, що при легуванні до 0,4 ат. % Ві має місце зростання параметра ґратки ( $a$ ) при зменшенні концентрації носіїв заряду ( $p_H$ ), питомої електропровідності ( $\sigma$ ), коефіцієнта термо-ЕРС ( $\alpha$ ) і мікротвердості ( $H$ ) (рис. 1). Зміна характеру відзначених параметрів в області (0,4-0,6) ат. % Ві, на думку дослідників, свідчить або про межу області гомогенності, або про початок процесів комплексоутворення [11].



**Рис. 1.** Залежності: (а) – параметра елементарної комірки ( $a$  – 1), мікротвердості ( $H$  – 2); (б) – питомої електропровідності ( $\sigma$  – 3), концентрації носіїв струму ( $p_H$  – 4), коефіцієнта термо-ЕРС ( $\alpha$  – 5) стануму телуриду від вмісту вісмуту [11].

Результати досліджень, представлені в [12], щодо характеру концентраційних змін досліджуваних параметрів легованого вісмутом станум телуриду SnTe:Bi (рис. 2) свідчать про складну взаємодію між атомами бісмуту та власними точковими дефектами кристалічної ґратки матриці.

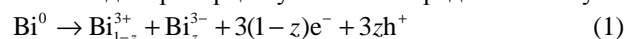
Так, зокрема, при введенні 1,5 ат. % Ві відбувається різке зменшення питомої електропровідності матеріалу до значення  $\approx 200$  (Ом·см)<sup>-1</sup> (рис. 2, б). Коефіцієнт термо-ЕРС для даного зразка при низьких температурах ( $\approx 400$  К) практично не змінюється у порівнянні зі зразком складу 1,0 ат. % Ві, а в області високих температур суттєво зростає (рис. 2, а). Подальше збільшення кількості введеного вісмуту призводить до порівняно незначного збільшення величини питомої електропровідності та зменшення коефіцієнта термо-ЕРС (рис. 2).



**Рис. 2.** Концентраційні залежності коефіцієнта термо-ЕРС ( $\alpha$  – а) та питомої електропровідності ( $\sigma$  – б) легованого вісмутом станум телуриду SnTe:Bi від вмісту Ві за різних температур  $T$ , К: 400; 500; 600 [12].

## II. Кристалоквазіхімічний аналіз

Відомо, що домішки V групи Періодичної таблиці (Sb, Bi) по-різному впливають на енергетичний спектр електронів у сполуках IV-VI [13], що пов'язують з їх амфотерними властивостями. Бісмут, заміщуючи станум у його підґратці, є донором. При цьому реалізується його йонізація із стану  $\text{Bi}^0(6s^26p^3)$  в стан  $\text{Bi}^{3+}(6s^26p^0) + 3e^-$ . Відносно підґратки  $\text{Sn}^{2+}$  домішка знаходиться у стані  $\text{Bi}^{3+} \rightarrow \text{Bi}_{\text{Sn}}^{1+}$ . У підґратці телуру бісмут йонізується  $\text{Bi}^0(6s^26p^3) \rightarrow \text{Bi}^{3-}(6s^26p^6) + 3h^+$  і є акцептором, і при цьому відносно підґратки  $\text{Te}^{2-}$  домішка знаходиться у стані  $\text{Bi}^{3-} \rightarrow \text{Bi}_{\text{Te}}^{1-}$ . Однаковий по абсолютній величині зарядовий стан Ві ( $\text{Bi}^{3+}$  і  $\text{Bi}^{3-}$ ) зумовлює самокомпенсацію легуючої дії вісмуту. Той факт, що домішка може займати як позиції стануму, так і позиції телуру в кристалічній структурі SnTe можна описати диспропорціонуванням її зарядового стану:



Тут  $z$  – величина диспропорціонування зарядового стану Ві. Співвідношення між  $\text{Bi}^{3+}$  та  $\text{Bi}^{3-}$  і визначатиме донорну чи акцепторну дію домішки.

З погляду кристалоквазіхімічного підходу, який ґрунтується на понятті антиструктури [14], легуючий кластер для домішки вісмуту за умови розміщення йонів Ві як у катіонній, так і аніонній підґратках буде представлено наступним чином:

$$V_{Sn}^{//} V_{Te}^{**} + Bi^0 \rightarrow \left[ V_z^{//} Bi_{1-z}^{\bullet} \right]_{Sn} \left[ V_{1-z}^{**} Bi_z^{\prime} \right]_{Te} + 3(1-z)e^{-} + 3zh^{+} \quad (2)$$

Тут  $V_{Sn}^{//} V_{Te}^{**}$  – антиструктура SnTe,  $V_{Sn}^{//}, V_{Te}^{**}$  – вакансії Sn і Te відповідно,  $e^{-}$  – електрони,  $h^{+}$  – дірки, „/”, „•”, „’” – негативний і позитивний заряди відповідно.

Кристалоквазіхімічна формула  $p$ -SnTe зі складним спектром точкових дефектів у катіонній підґратці (дво- і чотиризарядні вакансії стануму  $V_{Sn}^{//}, V_{Sn}^{////}$ ), згідно [15], має вигляд:

$$\left[ Sn_{1-\alpha}^{\times} V_{\alpha(1-\delta)}^{//} V_{\alpha\delta}^{////} \right]_{Sn} Te_{Te}^{\times} + 2\alpha(1+\delta)h^{+} \quad (3)$$

Тут  $\alpha$  – величина початкового відхилення від стехіометрії на боці Te,  $\delta$  – коефіцієнт диспропорціонування зарядового стану вакансій стануму, „x” – нейтральний заряд.

Суперпозиція (3) з легуючим кластером (2) представить кристалоквазіхімічну формулу  $p$ -SnTe:Bi:

$$(1-x) \left\{ \left[ Sn_{1-\alpha}^{\times} V_{\alpha(1-\delta)}^{//} V_{\alpha\delta}^{////} \right]_{Sn} Te_{Te}^{\times} + 2\alpha(1+\delta)h^{+} \right\} + x \left\{ \left[ V_z^{//} Bi_{1-z}^{\bullet} \right]_{Sn} \left[ V_{1-z}^{**} Bi_z^{\prime} \right]_{Te} + 3(1-z)e^{-} + 3zh^{+} \right\} \rightarrow$$

$$\rightarrow \left[ Sn_{(1-\alpha)(1-x)}^{\times} V_{\alpha(1-\delta)(1-x)+zx}^{//} V_{\alpha\delta(1-x)}^{////} Bi_{(1-z)x}^{\bullet} \right]_{Sn} \left[ Te_{1-x}^{\times} V_{(1-z)x}^{**} Bi_{zx}^{\prime} \right]_{Te} + (2\alpha(1+\delta)(1-x) + 3zx)h^{+} + 3(1-z)xe^{-} \quad (4)$$

Тут  $x$  – атомна частка Bi.

### III. Розрахунок концентрації точкових дефектів і носіїв струму

Запропонований механізм легування, а також кристалоквазіхімічна формула (4) дають можливість знайти аналітичні залежності як концентрації

окремих точкових дефектів, так і носіїв струму від величини відхилення від стехіометричного складу у базовій сполуці ( $\alpha$ ), вмісту домішки ( $x$ ) та величини коефіцієнта диспропорціонування зарядового стану домішки ( $z$ ). Так, для  $p$ -SnTe:Bi, згідно кристалоквазіхімічної формули (4), повне рівняння електронейтральності запишеться наступним чином:

$$n + \left| q_{V_{Sn}^{//}} \right| \left[ V_{Sn}^{//} \right] + \left| q_{V_{Sn}^{////}} \right| \left[ V_{Sn}^{////} \right] + \left| q_{Bi_{Te}^{\bullet}} \right| \left[ Bi_{Te}^{\bullet} \right] = p + \left| q_{V_{Te}^{**}} \right| \left[ V_{Te}^{**} \right] + \left| q_{Bi_{Sn}^{\bullet}} \right| \left[ Bi_{Sn}^{\bullet} \right], \quad (4')$$

де  $n = 3A(1-z)x$ ,  $p = A(2\alpha(1+\delta)(1-x) + 3zx)$ ,  
 $[Bi_{Te}^{\bullet}] = Azx$ ,  $[V_{Sn}^{//}] = A(\alpha(1-\delta)(1-x) + zx)$ ,  
 $[V_{Sn}^{////}] = A\alpha\delta(1-x)$ ,  $[Bi_{Sn}^{\bullet}] = A(1-z)x$ ,  
 $[V_{Te}^{**}] = A(1-z)x$ ,  $|q_{Bi_{Te}^{\bullet}}| = |q_{Bi_{Te}^{\bullet}}| = 1$ ,  $|q_{V_{Sn}^{//}}| = |q_{V_{Te}^{**}}| = 2$ ,  
 $|q_{V_{Sn}^{////}}| = 4$ . Тут  $A = \frac{2Z}{a^3}$ ,  $Z$  – число структурних одиниць в елементарній комірці,  $a$  – параметр ґратки.

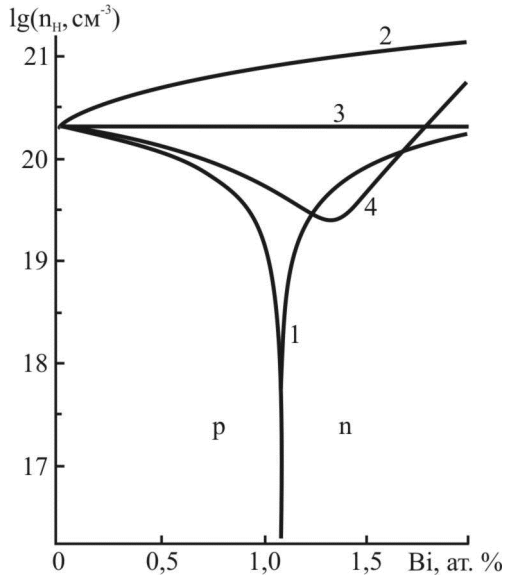
Холлівська концентрація носіїв струму  $n_H$  буде визначатися як:

$$n_H = A[2\alpha(1+\delta)(1-x) + 6zx - 3x] \quad (4'')$$

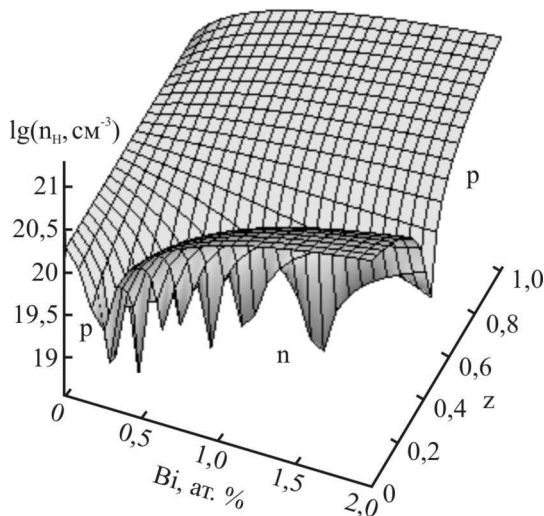
З розрахунку холлівської концентрації (рис. 3) видно, що при значенні  $z < 0,5$  домішка чинить донорну дію ( $[Bi_{Sn}^{\bullet}] > [Bi_{Te}^{\bullet}]$ ) для  $p$ -SnTe:Bi (рис. 3 – крива 1): зменшення концентрації основних носіїв, термодинамічний  $p$ - $n$ -перехід та подальше зростання концентрації електронів. При переважанні йонів бісмуту в позиціях телуру  $z > 0,5$

( $[Bi_{Te}^{\bullet}] > [Bi_{Sn}^{\bullet}]$ ) має місце протилежна залежність: значне зростання концентрації дірок (рис. 3 – крива 2). У випадку  $z = 0,5$  (рис. 3 – крива 3) відбувається повна самокомпенсація домішки (концентрації йонів  $Bi_{Sn}^{\bullet}$  та  $Bi_{Te}^{\bullet}$  рівні) і холлівська концентрація в обох випадках зменшується незначно. Порівнюючи результати розрахунку (рис. 3) та експериментальні дані (рис. 1-2), можна зробити висновок про те, що до рівня концентрації вісмуту 1,5 ат. % має місце реалізація випадку  $z < 0,5$ , тобто домінує механізм заміщення катіонних вузлів (концентрація йонів бісмуту в стані  $Bi_{Sn}^{\bullet}$  переважає над концентрацією  $Bi_{Te}^{\bullet}$ ). Розширення області гомогенності на боці халькогену із утворенням вакансій у підґратці металу  $V_{Sn}^{2-}$  (рис. 5 – крива 4) добре пояснює спостережувані зменшення параметра елементарної комірки  $a$  (рис. 1, а) і величини питомої електропровідності  $\sigma$  (рис. 2, б). Якщо б при легуванні утворення вакансій не відбувалось, то значення параметра елементарної комірки зростало

б, оскільки йонний радіус  $\text{Bi}^{3+}$  ( $1,2\text{\AA}$ ) є більший за йонний радіус  $\text{Sn}^{2+}$  ( $1,02\text{\AA}$ ).



**Рис. 3.** Залежність холлівської концентрації носіїв струму ( $n_H$ ) в кристалах  $p\text{-SnTe:Bi}$  ( $\alpha = 0,2$  ат. %) від вмісту вісмуту при величині коефіцієнта диспропорціонування зарядового стану домішки  $z$ : 0,4 (1); 0,8 (2); 0,5 (3);  $f(x)$  (4).

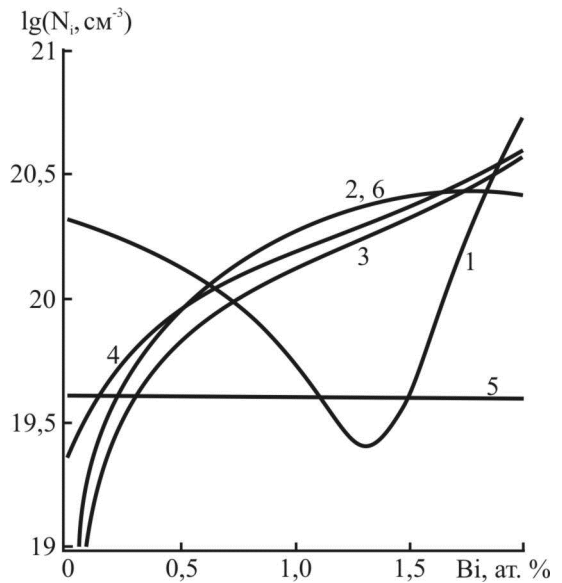


**Рис. 4.** Просторова діаграма залежності холлівської концентрації носіїв струму ( $n_H$ ) в кристалах  $p\text{-SnTe:Bi}$  ( $\alpha = 0,2$  ат. %) від вмісту вісмуту і значення величини диспропорціонування зарядового стану домішки ( $z$ ).

З ростом концентрації домішки ( $> 1,5$  ат.%) процеси самокомпенсації посилюються, що вказує на реалізацію випадку  $z > 0,5$  (зростає частка йонів бісмуту, вкорінених в аніонній підґратці  $\text{Bi}_{\text{Te}}^{1-}$ ), і зумовлює збільшення концентрації дірок, а, отже, і питомої електропровідності, що й має місце на експерименті (рис. 2, б). Ріст параметра елементарної комірки при таких концентраціях домішки [12], очевидно, зумовлений тим, що йонний радіус  $\text{Bi}^{3+}$  ( $2,13\text{\AA}$ ) є більшим за йонний радіус  $\text{Te}^{2-}$ .

Підсумовуючи вище сказане, можна стверджувати, що співвідношення йонів бісмуту (а отже, коефіцієнт диспропорціонування  $z$ ) залежить від його вмісту в  $\text{SnTe:Bi}$ :  $z = f(x)$ . Така складна залежність, представлена на рис. 3 (крива 4), найкраще описує процес впливу домішки на електрофізичні властивості матеріалу, враховуючи її перерозподіл між катіонною і аніонною підґратками, та добре узгоджується з експериментальними даними [11-12].

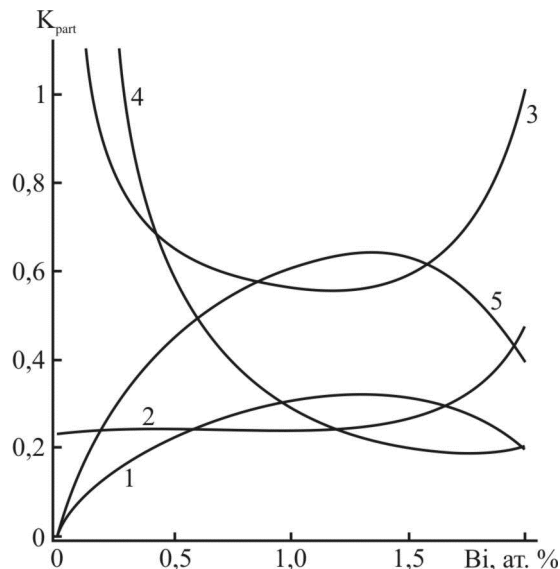
Відзначені вище особливості поведінки холлівської концентрації носіїв струму в залежності від вмісту домішки та її зарядового стану добре ілюструє просторова діаграма (рис. 4).



**Рис. 5.** Залежність холлівської концентрації носіїв струму ( $1 - n_H$ ) та концентрації точкових дефектів в кристалах  $p\text{-SnTe:Bi}$  ( $\alpha = 0,2$  ат. %) від вмісту легуючої домішки.  $N_i$ : 2 –  $[\text{Bi}_{\text{Sn}}^{1+}]$ ; 3 –  $[\text{Bi}_{\text{Te}}^{1-}]$ ; 4 –  $[\text{V}_{\text{Sn}}^{2-}]$ ; 5 –  $[\text{V}_{\text{Sn}}^{4-}]$ ; 6 –  $[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}]$ .

З розрахунку концентрації точкових дефектів для випадку легування вісмутом (рис. 5) видно, що домінуючими дефектами є йони бісмуту, вкорінені як у підґратці стануму  $\text{Bi}_{\text{Sn}}^{1+}$ , так і в підґратці телуру  $\text{Bi}_{\text{Te}}^{1-}$  кристалічної ґратки станум телуриду, концентрація яких зростає зі збільшенням вмісту легуючої домішки  $\text{Bi}$  (рис. 5 – криві 2, 3). При цьому в околі концентрації домішки 1,5 ат. % відбувається зміна співвідношення концентрацій домішки в катіонній та аніонній позиціях (рис. 5 – криві 2, 3; рис. 6 – криві 1, 2). Значний вклад у провідність вносять також двократно йонізовані вакансії стануму  $\text{V}_{\text{Sn}}^{2-}$ , концентрація яких зростає зі збільшенням вмісту домішки (рис. 5 – крива 4), та двозарядні вакансії телуру  $\text{V}_{\text{Te}}^{2+}$ , залежність концентрації яких має дещо складніший характер (рис. 5 – крива 6). Варто відмітити, що концентрація чотиризарядних катіонних вакансій

$V_{Sn}^{4-}$  для  $p$ -SnTe:Bi (рис. 5 – крива 5) зі зростанням вмісту домішки зменшуються незначно. Концентраційна залежність парціальних коефіцієнтів компенсації точкових дефектів добре ілюструє їх перерозподіл і вклад у провідність (рис. 6).



**Рис. 6.** Залежність парціальних коефіцієнтів компенсації точкових дефектів  $K_{part}$

$$1 - K_{Bi_{Sn}^{1+}} = \frac{[Bi_{Sn}^{1+}]}{2[V_{Sn}^{2-}] + 4[V_{Sn}^{4-}] + [Bi_{Te}^{1-}]};$$

$$2 - K_{Bi_{Te}^{1-}} = \frac{[Bi_{Te}^{1-}]}{2[V_{Te}^{2+}] + [Bi_{Pb}^{1+}]}; \quad 3 -$$

$$K_{V_{Sn}^{2-}} = \frac{2[V_{Sn}^{2-}]}{2[V_{Te}^{2+}] + [Bi_{Pb}^{1+}]}; \quad 4 - K_{V_{Sn}^{4-}} = \frac{4[V_{Sn}^{4-}]}{2[V_{Te}^{2+}] + [Bi_{Pb}^{1+}]};$$

$$5 - K_{V_{Te}^{2+}} = \frac{2[V_{Te}^{2+}]}{2[V_{Sn}^{2-}] + 4[V_{Sn}^{4-}] + [Bi_{Te}^{1-}]} \text{ в кристалах}$$

$p$ -SnTe:Bi від вмісту вісмуту.

## Висновки

1. Запропоновано кристалокхімічні формули нестехіометричних кристалів  $p$ -SnTe:Bi, які враховують складний спектр точкових дефектів у станум телуриді ( $V_{Sn}^{2-}$ ,  $V_{Sn}^{4-}$ ,  $V_{Te}^{2+}$ ) та різний зарядовий стан йонів домішки  $Bi^{3+}$  і  $Bi^{3-}$ .
2. Встановлено, що легування SnTe вісмутом пов'язане із механізмом заміщення йонами бісмуту як катіонних ( $Bi^{3+} \rightarrow Bi_{Sn}^{1+}$ ), так і аніонних ( $Bi^{3-} \rightarrow Bi_{Te}^{1-}$ ) вакансій.
3. Визначено характер зміни значення величини диспропорціонування зарядового стану домішки вісмуту ( $Bi^{3+}$ ,  $Bi^{3-}$ ) та його вплив на електрофізичні властивості матеріалу. Зокрема, встановлено, що на початкових етапах легування (до 1,5 ат. % Bi) має місце переважання йонів домішки в катіонній підгратці  $Bi_{Sn}^{1+}$ , а при подальшому легуванні відбуваються процеси самокомпенсації і зростає частка йонів бісмуту в позиціях телуру  $Bi_{Te}^{1-}$ .
4. Розраховано залежності холлівської концентрації носіїв заряду та концентрації точкових дефектів кристалів  $p$ -SnTe:Bi від складу. Показано, що домінуючими дефектами в даному випадку є йони бісмуту в катіонних і аніонних вузлах кристалічної ґратки станум телуриду  $Bi_{Sn}^{1+}$ ,  $Bi_{Te}^{1-}$ , двозарядні вакансії телуру  $V_{Te}^{2+}$  та стануму  $V_{Sn}^{2-}$ , співвідношення між якими визначається вмістом домішки Bi.

**Фреїк Д.М.** – заслужений діяч науки і техніки України, доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;  
**Туровська Л.В.** – кандидат хімічних наук, асистент кафедри медичної інформатики, медичної і біологічної фізики;  
**Горічок І.В.** – докторант;  
**Матківський О.М.** – аспірант.

- [1] R.F. Brebrick, J. Phys. Chem. Solids 24(1), 27 (1963).
- [2] N.Kh. Abrikosov, L.M. Salimova, Poluprovodnikovye materialy na osnovie soedinenii A<sup>IV</sup>B<sup>VI</sup> (Nauka, Moskva, 1975).
- [3] V.P. Zlomanov, P-T-x – diagrammy dvuhkomponentnyh sistem (MGU, Moskva, 1980).
- [4] E.I. Rogachova, H.V. Horne, N.K. Zhygariyeva, A.B. Ivanova, Izv. AN SSSR. Neorganicheskiye materialy 27(2), 267 (1991).
- [5] V.L. Kuznietsov, Izv. AN SSSR. Neorganicheskiye materialy 32 (3), 261 (1996).
- [6] V.M. Shperun, D.M. Freik, V.V. Prokopiv, Teluryd olova. Fyzyko-khimichni vlastyvoli (Plai, Ivano-Frankivsk, 2002).
- [7] B.A. Volkov, O.A. Pankratov, Zh.Ekspieriment. i teor. Fiziki, 75(4), 1362 (1978).
- [8] V.P. Zlomanov, A.M. Gaskov, Rost poluprovodnikovyh kristallov i plionok: Novyye metodiki, liegirovaniia, kriterii funktsyonalnoi prihodnosti materialov, Novosibirsk 116 (1984).
- [9] D.M. Freik, V.V. Prokopiv, M.O. Halushchak, M.V. Pyts, H.D. Mateik, Krystalohimiia i termodynamika atomnyh defektiv u spolukah AIVBVI (Plai, Ivano-Frankivsk. 162 p. (1999).
- [10] D. Baltrunas, S. Motiejunas, E. Rogacheva. Effect of the Deviation from Stoichiometry on the Mossbauer Parameters of SnTe // Phys. Stat. Sol. (a). 97, pp 131-133 (1986).

- [11] N.I. Dzyubenko, E.I. Rogacheva, V.M. Kosevich, S.A. Laptev, A.V. Arankin., *Izv. AN SSSR. Neorganicheskiye. materialy* 19(9), 1457 (1983).
- [12] I.V. Horichok, O.M. Matkivskii, D.M. Freik, H.Ya. Hurhula, *Fizyka i khimiya tverdogo tila* 15(3), 469 (2014).
- [13] V.I. Kaidanov, S.A. Niemov, Yu.I. Ravich, *Fizika i tiehnika poluprovodnikov* 28(3), 369 (1994).
- [14] S.S. Lisniak, *Neorganicheskiye. materialy* 32(2), 1913 (1992).
- [15] D.M. Freik, L.V. Turovska, L.D. Yurchyshyn, L.Yo. Mezhylovska, *Fizika i himiia tveiodogo tela* 11(2), 355 (2010).

D.M. Freik<sup>1</sup>, L.V. Turovska<sup>2</sup>, I.V. Horichok<sup>1</sup>, O.M. Matkivskiy<sup>1</sup>

## **Crystal-Chemical Interpretation of Amphoteric Influence of Bismuth Impurity in Tin Telluride**

<sup>1</sup>*Department of Physics and Chemistry of Solid State  
at the Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University,  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, e-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua);*

<sup>2</sup>*Department of Medical Informatics, Medical and Biological Physics  
at Ivano-Frankivsk National Medical University,  
2, Halytska Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, e-mail: [lturovska@gmail.com](mailto:lturovska@gmail.com)*

Models of point defects of doped by bismuth tin telluride crystals considering amphoteric influence of dopant ( $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Bi}^{3-}$ ) have been specified. The influence of disproportionation of charge state of impurity on the conductivity type has been determined. Based on the proposed crystal-quasichemical formulae dependences of concentrations of point defects, the Hall concentration of current carriers on dopant content have been calculated.