

УДК 621.315.592: 533

В.В. Прокопів (мол.)

n_x – P – T -діаграми рівноваги для CdTe, PbTe, SnTe при двотемпературному відпалі

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76025, Україна*

У рамках кристалохімічного формалізму квазіхімічних рівнянь утворення точкових дефектів для двотемпературного відпалу одержано аналітичні вирази залежностей концентрації носіїв заряду (n_x) від технологічних факторів: температури відпалу (T); парціального тиску пари телуру (P_{Te_2}), металу (P_M). Побудовані просторові n_x – P_{Te_2} – T -діаграми та визначені умови формування матеріалу n - і p -типу провідності із наперед заданою концентрацією носіїв струму.

Ключові слова: напівпровідники, точкові дефекти, квазіхімічні рівняння, діаграми рівноваги.

V.V. Prokopiv (Jr)

n_x – P – T -diagrams of Equilibrium for CdTe, PbTe, SnTe of Two Temperature Annealing

*Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University,
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine*

Within the framework for the two temperature annealing analytical expressions of dependences of concentration of transmitters of charge (n_x) are got formalism of quasichemical equations of formation of point defects from technological factors: temperatures of annealing (T); partial pressure of pair of телуру (P_{Te_2}), to the metal (P_M). Spatial n_x – P_{Te_2} – T -diagrams is built but the terms of forming of material of n - and p -type are certain as conductivity with the beforehand set concentration of transmitters of current.

Key words: semiconductors, point defects, quasichemical equations, diagrams of equilibrium.

Стаття постуила до редакції 28.01.2011; прийнята до друку 25.02.2011.

Вступ

Халькогеніди металів II і IV груп Періодичної таблиці первнів мають широке використання у напівпровідниковій техніці:

- детектори жорсткого випромінювання, перетворювачі сонячної енергії, елементи телекомутаційних мереж (CdTe) тощо [1];

- базові матеріали для термоелектричних перетворювачів теплової енергії, фотоприймальних і випромінювальних структур ІЧ-діапазону (PbTe, SnTe) тощо [2].

Ступінь практичного використання кристалів визначається можливостями їх одержання із

наперед заданими властивостями, зокрема, з певною концентрацією носіїв струму, n - чи p -тип провідності і т. ін. Так, у нелегованих кадмій (плюмбум, станум) телуридах тип і концентрація вільних носіїв заряду зумовлені власними точковими дефектами кристалічної ґратки: вакансіями металу і халькогену та міжвузловими атомами [1, 2]. Ступінь відхилення від стехіометрії та дефектна підсистема кристалів визначається умовами вирощування та обробки матеріалу (температура, тиск, склад пари тощо). Серед ефективних технологічних процесів слід відзначити метод двотемпературного відпалу кристалів при заданих температурі (T) і

парціальному тиску пари компонентів P_{Te_2} , P_M ($M - Cd, Pb, Sn$) (рис. 1) [3]. Для аналітичного опису залежностей типу провідності і концентрації носіїв струму від технологічних факторів використовують метод квазіхімічного моделювання [4].

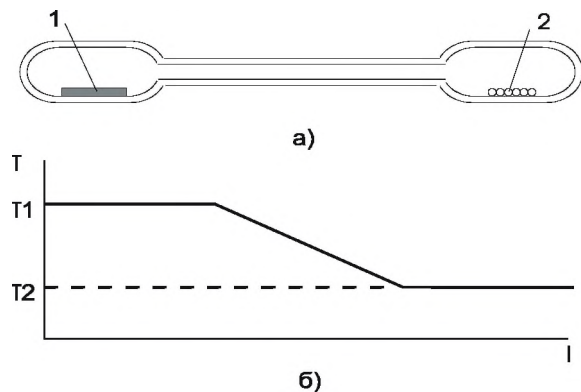


Рис. 1. Схема ампули для двотемпературного відпалу (а) і профіль температури (б): 1 – кристали $MeTe$; 2 – компоненти Te (Me) [8].

Мета роботи полягала в тому, щоби на основі кристалохемічних підходів одержати аналітичні вирази і побудувати просторові діаграми для залежності концентрації носіїв струму та температури термодинамічного $n-p$ -переходу при двотемпературному відпалі кристалів та встановити умови формування кристалів із заздалегідь заданими електричними параметрами.

I. Кристалофізика дефектних підсистем

Кристалохемічний підхід для опису впливу технологічних факторів на концентрацію носіїв струму вимагає знання типу точкових дефектів та їх зарядового стану.

Кадмій телурид кристалізується в структурі цинкової обманки (сфалерит) (рис. 2) [5]. Просторова група сфалериту $F\bar{4}3m$. На одну елементарну комірку припадає чотири молекули $CdTe$. Кожний атом Cd (Te) має навколо себе чотири атоми Te (Cd), розмішених у вершинах правильного тетраедра на відстанях $\sqrt{3}a/4$, де a – параметр кубічної ґратки. Будь-який атом одного виду оточений дванадцятьма атомами того ж виду, розмішених на відстанях $\sqrt{2}a/2$. Структуру $CdTe$ можна представити як дві гранецентровані ґратки кадмію і телуру, які зміщені одна відносно одної на чверть тілесної діагоналі кубічної комірки. Вона відповідає щільній упаковці ...ABCABC... (рис. 2).

Основними видами точкових дефектів у структурі типу $NaCl$, в якій кристалізуються плумбум і станум телуриди, є вакансії в

катионних і аніонних підґратках, міжвузлові атоми в тетраедричних порожнинах, які не зайняті власними йонами, а також їх комплексами (рис. 3) [2]. Головним питанням при цьому є їх зарядовий стан, який визначають різними методиками фізичних досліджень: фотолюмінесценція, X-промінева люмінесценція, ЕПР, ЯМР та інші.

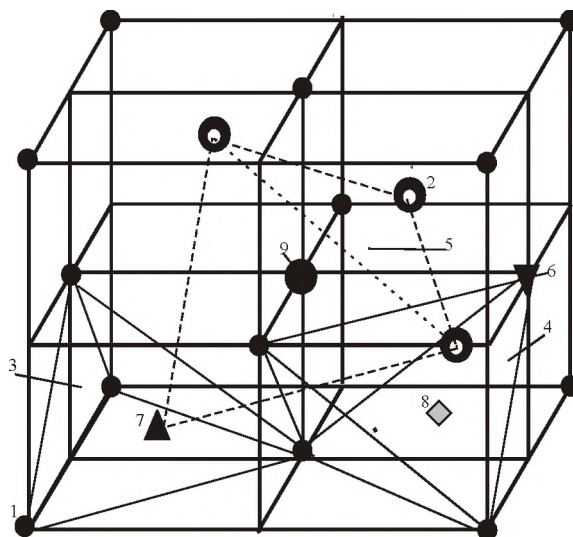


Рис. 2. Точкові атомні дефекти у кристалічній структурі $CdTe$ типу сфалериту: 1 – атом кадмію Cd_{Cd} ; 2 – атом телуру Te_{Te} ; 3, 4 – тетраедрична порожнина в оточенні кадмію; 5 – тетраедрична порожнина в оточенні телуру; 6 – вакансія кадмію V_{Cd} ; 7 – вакансія телуру V_{Te} ; 8 – вкорінений атом телуру Te_i ; 9 – вкорінений атом кадмію Cd_i .

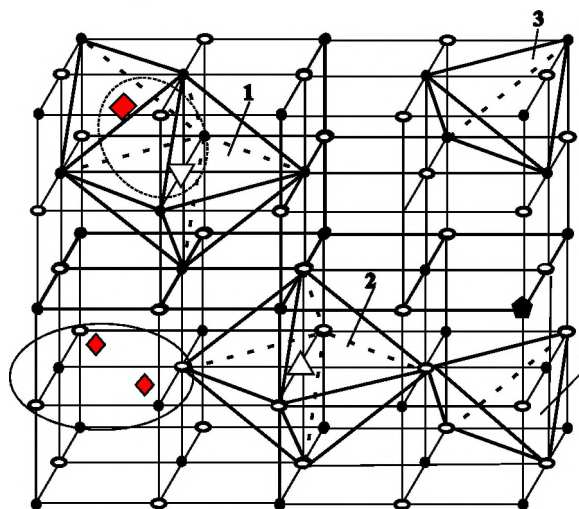


Рис. 3. Модель дефектів у кристалічній ґратці типу $NaCl$: \bullet – атом $Pb(Sn)$; \circ – атом Te ; 1, 2 – октаедричні порожнини в оточенні металу (телуру); 3, 4 – тетраедричні порожнини в оточенні металу (телуру); \blacktriangle – вакансія металу; \blacktriangledown – вакансія телуру; \blacklozenge – вкорінений первень III групи (Al); \blacklozenge – первень третьої групи на місці $Pb(Sn)$; \blacksquare – комплекс; \odot – окрема фаза A_2Te_3 [13].

II. Квазіхімічні рівняння утворення точкових дефектів

2.1. Кадмій телурид. Рівноваговий стан власних точкових дефектів кристалів CdTe при їх термічному відпалі у паровій фазі кадмію P_{Cd} можна описати системою квазіхімічних рівнянь (табл. 1) [6]. Тут: індекс V – пара; Cd_{Cd} – атоми у вузлі; Cd_i , Te_i – міжвузлові атоми; V_{Cd} , V_{Te} – вакансії кадмію і телуру відповідно; e^- – електрони; h^+ – дірки; « \leftrightarrow » і « \rightarrow » – знаки заряду.

У вибраній моделі реакція I описує збудження власної провідності, реакція II – рівновагу «пара кадмію – вакансії телуру»; реакції III і VI – рівновагу «пара кадмію – міжвузлові атоми кадмію і телуру» відповідно; реакція IV-V – рівновагу «пара кадмію – вакансії кадмію»; VII – повне рівняння електронейтральності. Сумісний розв'язок системи рівнянь I-VI дає можливість визначити концентрацію дефектів через константи рівноваги K , парціальний тиск пари кадмію P_{Cd} та концентрацію електронів n :

$$\left[V_{Cd}^- \right] = K_{11} \cdot n / P_{Cd} \quad (1)$$

$$\left[V_{Cd}^{2-} \right] = K_{10} \cdot n^2 / P_{Cd}; \quad (2)$$

$$\left[Te_i^- \right] = K_{12} \cdot n / P_{Cd}; \quad (3)$$

$$\left[Cd_i^{2+} \right] = K_9 \cdot P_{Cd} / n^2; \quad (4)$$

$$\left[V_{Te}^{2+} \right] = K_8 \cdot P_{Cd} / n^2. \quad (5)$$

Маючи вирази для концентрації дефектів (1)-(5) і враховуючи умову повної електронейтральності (табл. 1, VII), можна записати рівняння для визначення концентрації електронів n :

$$2 \cdot K_{10} \cdot n^4 + (K_{11} + K_{12} + P_{Cd}) \cdot n^3 - K_1 \cdot P_{Cd} \cdot n - 2 \cdot P_{Cd}^2 \cdot (K_8 + K_9) = 0. \quad (6)$$

Холлівську концентрацію носіїв струму n_X , що визначають на експерименті, знаходять з умови, що $n_X = n - p$. Оскільки $p = K/n$ (табл. 1, I), тоді

$$n_X = n - K/n. \quad (7)$$

Маючи на увазі, що термодинамічний $n-p$ -перехід настає за умови $n = p$, з рівняння електронейтральності (табл. 1, VII) одержимо вираз для парціального тиску кадмію P_{Cd}^* , що відповідає термодинамічному $n-p$ -переходу:

$$P_{Cd}^* = \left(\frac{(K_1)^{3/2} \cdot (K_{11} + K_{12} + 2 \cdot K_{10} \cdot (K_1)^{3/2})}{2 \cdot (K_8 + K_9)} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

2.2. Плюмбум телурид. Знаючи тип дефектів PbTe (рис. 3) і їх зарядові стани термодинамічну рівновагу кристалічної ґратки за двотемпературним відпалом можна описати системою квазіхімічних рівнянь, що наведені в табл. 2 [7].

Реакція (I) описує утворення нейтральних вакансій та міжвузлових атомів плюмбуму за механізмом Френкеля, а (V) – нейтральних вакансій плюмбуму при взаємодії з парою телуру; (II)-(III) – реакції йонізації утворених дефектів; (IV) – реакція збудження власної провідності. Рівняння (VI) – загальна умова електронейтральності кристала.

Рівняння (I)-(VI) дають можливість визначити концентрацію електронів n через константи рівноваги K та парціальний тиск пари телуру P_{Te} . Отримуємо рівняння 3-го степеня відносно n :

$$An^3 + Bn^2 - C = 0, \quad (9)$$

де

$$\begin{cases} A = 2K'_b \cdot R^2; \\ B = K_i \cdot R(K_b \cdot R + K_i); \\ C = K_i^2(K_a \cdot K_f + K_i \cdot R). \end{cases}$$

Таблиця 1

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах кадмій телуриду та їх константи рівноваги $K = K^0 \exp(-\Delta H/kT)$ [1]

Позначення реакції	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K , (см^{-3} , Па)	ΔH , eВ
I	$0 \leftrightarrow e^- + h^+$	$K_i = np$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50
II	$Cd^V \leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K_8 = \left[V_{Te}^{2+} \right] P_{Cd}^{-1} n^2$	$3 \cdot 10^{57}$	1,47
III	$Cd^V \leftrightarrow Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K_9 = \left[Cd_i^{2+} \right] n^2 P_{Cd}^{-1}$	$8 \cdot 10^{60}$	2,09
IV	$Cd_{Cd}^0 + 2e^- \leftrightarrow V_{Cd}^{2-} + Cd^V$	$K_{10} = \left[V_{Cd}^{2-} \right] P_{Cd} n^{-2}$	$1 \cdot 10^{15}$	1,14
V	$Cd_{Cd}^0 + e^- \leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd^V$	$K_{11} = \left[V_{Cd}^- \right] P_{Cd} n^{-1}$	$8 \cdot 10^6$	2,08
VI	$CdTe + e^- \leftrightarrow Te_i^- + Cd^V$	$K_{12} = \left[Te_i^- \right] P_{Cd} n^{-1}$	395	1,19
VII	$n + \left[V_{Cd}^- \right] + 2 \left[V_{Cd}^{2-} \right] + \left[Te_i^- \right] = p + 2 \left[Cd_i^{2+} \right] + 2 \left[V_{Te}^{2+} \right]$			

Таблиця 2

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах плумбум телуриду та їх константи рівноваги $K = K^0 \exp(-\Delta H/kT)$ [1]

Позначення реакції	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K, (см ⁻³ , Па)	ΔH, еВ
I	$Pb_{Pb} = Pb_i^0 + V_{Pb}^0$	$K_F = [V_{Pb}^0] \cdot [Pb_i^0]$	$4,8 \cdot 10^{48}$	2,96
II	$Pb_i^0 = Pb_i^+ + e^-$	$K_a = [Pb_i^+] \cdot n / [Pb_i^0]$	$1,25 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,01
IIIa	$Pb_i^0 = Pb_i^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [Pb_i^{2+}] \cdot n^2 / [Pb_i^0]$	$1,56 \cdot 10^{30} \cdot T^3$	0,02
III	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^- + h^+$	$K_b = [V_{Pb}^-] \cdot p / [V_{Pb}^0]$	$1,83 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,01
IIIa	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Pb}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Pb}^0]$	$3,35 \cdot 10^{30} \cdot T^3$	0,02
IV	"0" = $e^- + h^+$	$K_i = n \cdot p$	$7,42 \cdot 10^{29} \cdot T^3$	0,38
V	$\frac{1}{2} Te_2^V = V_{Pb}^0 + Te_{Te}^0$	$K_{Te_2^V} = [V_{Pb}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$4,0 \cdot 10^{17}$	0,28
VI	$[V_{Pb}^-] + 2[V_{Pb}^{2-}] + n = [Pb_i^+] + p$			

Знаючи концентрацію електронів і користуючись співвідношеннями (I)-(V), можна знайти холлівську концентрацію носіїв заряду n_X , концентрацію дірок p , одно- та двозарядних вакансій плумбуму $[V_{Pb}^-]$, $[V_{Pb}^{2-}]$, одно- та двозарядних міжвузлових атомів плумбуму $[Pb_i^+]$, $[Pb_i^{2+}]$:

$$n_X = n - K_i; p = K_i / n; \quad (10)$$

$$[V_{Pb}^-] = K_b \cdot R \cdot n \cdot K_i^{-1}; \quad (11)$$

$$[Pb_i^+] = K_a K_F R^{-1} n^{-1}; \quad (12)$$

$$[Pb_i^{2+}] = K'_a K_F R^{-1} n^{-2}; \quad (13)$$

$$[V_{Pb}^{2-}] = K'_b \cdot R \cdot n^2 \cdot K_i^{-2}, \quad (14)$$

де $R = K_{Te_2^V} P_{Te_2}^{1/2}$.

2.3. Станум телурид. Рівновагу «кристал-пара» ($SnTe - P_{Te_2}$) під час двотемпературного відпаду можна описати за допомогою квазіхімічних рівнянь, приведених у табл. 3 [8]. Зауважимо, що тут прийнято до уваги той факт, що ділянка гомогенності SnTe повністю зміщена до халькогену (телуру), що є причиною формування вакансій у катіонній підгратці V_{Sn}^{2-} , V_{Sn}^{4-} (табл. 3).

Реакція (I) описує утворення нейтральних вакансій за механізмом Шоттки, а (II) –

нейтральних вакансій плумбуму при взаємодії з паровою халькогену; (III)-(IV) – реакцію йонізації утворених вакансій; (V) – реакцію збудження власної провідності; рівняння (VI) – загальну умову електронейтральності кристала.

Рівняння (I)-(VI) дають можливість визначити концентрацію дірок p через константи квазіхімічних реакцій K і парціальний тиск пари телуру P_{Te_2} ($R = K_{Te_2^V} \cdot P_{Te_2}^{1/2}$):

$$Ap^6 + Bp^5 - Cp^3 - Dp^2 + Fp = 0, \quad (15)$$

де

$$\left. \begin{aligned} A &= 2K'_a \cdot K_s (K_i^2 \cdot R)^{-1}; \\ B &= 1; \\ C &= K_i + R \cdot K_b; \\ D &= 2K'_b \cdot R; \\ F &= 4K_b'' \cdot R. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Рівняння (I)-(VI) дають можливість також визначити холлівську концентрацію дірок p_X , концентрацію електронів n , вакансій станума $[V_{Sn}^{2-}]$, $[V_{Sn}^{4-}]$ і телуру $[V_{Te}^{2+}]$:

$$p_X = p - K_i / p, \quad n = K_i / p; \quad (17)$$

$$[V_{Sn}^{2-}] = R \cdot K'_b \cdot p^{-2}; \quad (18)$$

$$[V_{Sn}^{4-}] = R \cdot K_a'' \cdot p^{-4}; \quad (19)$$

$$[V_{Te}^{2+}] = K'_a \cdot K_s \cdot p^2 \cdot (R \cdot K_i^2)^{-1}. \quad (20)$$

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах станум телуриду та їх константи рівноваги $K=K^0 \exp(-\Delta H/kT)$ [1]

Позначення реакції	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K , (см^{-3} , Па)	ΔH , еВ
I	"0" = $V_{Te}^0 + V_{Sn}^0$	$K_S = [V_{Sn}^0] \cdot [V_{Te}^0]$	$1,1 \cdot 10^{48}*$	2,38*
II	$\frac{1}{2} Te_2^V = V_{Sn}^0 + Te_{Te}^0$	$K_{Te_2, V} = [V_{Sn}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$4,0 \cdot 10^{17}*$	-0,38*
III	$V_{Te}^0 = V_{Te}^+ + e^-$	$K_a = [V_{Te}^+] \cdot n / [V_{Te}^0]$	$1,21 \cdot 10^{16} \cdot T^{3/2}$	0,01
IIIa	$V_{Te}^0 = V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 / [V_{Te}^0]$	$1,46 \cdot 10^{32} \cdot T^3$	0,02
IV	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^- + h^+$	$K_b = [V_{Sn}^-] \cdot p / [V_{Sn}^0]$	$1,21 \cdot 10^{16} \cdot T^{3/2}$	0,01
IVa	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Sn}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Sn}^0]$	$1,46 \cdot 10^{32} \cdot T^3$	0,02
IVб	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^{4-} + 4h^+$	$K''_b = [V_{Sn}^{4-}] \cdot p^4 / [V_{Sn}^0]$	$2,14 \cdot 10^{64} \cdot T^6$	0,04
V	"0" = $e^- + h^+$	$K_i = n \cdot p$	$3,66 \cdot 10^{31} \cdot T^3$	0,18
VI	$4[V_{Sn}^{4-}] + 2[V_{Sn}^{2-}] + n = 2[V_{Te}^{2+}] + p$			

* – ефективні значення.

Запропонована модель квазіхімічних реакцій може бути застосована для чисельних розрахунків рівноважних концентрацій носіїв струму та концентрацій атомних дефектів у кристалах телуриду стануму, якщо відомі з достатньою точністю константи рівноваги квазіхімічних реакцій та їхні температурні залежності. Значення передекспоненційних множників K_0 і зміни ентальпій реакцій ΔH для констант K_S , $K_{Te_2, V}$ взяті із [9], а для K'_a , K'_b , K_i – із [10].

III. Просторові n_x – P – T діаграми

Для практичного використання важливо знати технологічні умови формування матеріалу із наперед заданими електричними параметрами – тип провідності (p - чи n -тип), концентрація носіїв струму – холлівська концентрація носіїв струму n_x . У цьому сенсі можуть бути корисними просторові діаграми n_x – P_{Te_2} – T отримані на основі результатів кристалохімічного розрахунку, які відображають зазначені вище залежності.

3.1. Кадмій телурид. Результати розрахунку, отримані на основі теоретичних моделей наведені на рис. 4. Із діаграми видно, що при відпалі кристалів CdTe змінюються не тільки концентрація холлівських носіїв струму, але і тип

провідності. Результати теоретичної аналізи вказують на те, що збільшення парціального тиску пари кадмію P_{Cd} , як і зниження температури відпалу T (рис. 4), зумовлюють топологічно ідентичні зміни. При низьких значеннях парціального тиску пари кадмію P_{Cd} одержуємо матеріал p -типу провідності. Із збільшенням P_{Cd} спостерігається зменшення концентрації дірок p , інверсія провідності з p - на n -тип (термодинамічний p - n -перехід) і подальше зростання концентрації електронів n . У випадку температурної залежності холлівської концентрації носіїв струму, за низьких значень температури відпалу T одержуємо матеріал n -типу провідності; із підвищенням T спочатку відбувається спадання концентрації електронів n , аж до моменту настання n - p -переходу, а потім – зростання концентрації дірок p (рис. 2).

Зауважимо, що підвищення температури відпалу T зміщує значення парціального тиску кадмію, що відповідає термодинамічному p - n -переходу в бік більш високих значень (рис. 4). При цьому, змінити тип провідності матеріалу лише температурою відпалу T можна для інтервалу тисків кадмію 10–1000 Па. За тиску $P_{Cd} < 10$ Па одержуємо матеріал тільки p -типу, а при $P_{Cd} > 1000$ Па – тільки n -типу провідності за повним інтервалом температур відпалу T (800–1200 К).

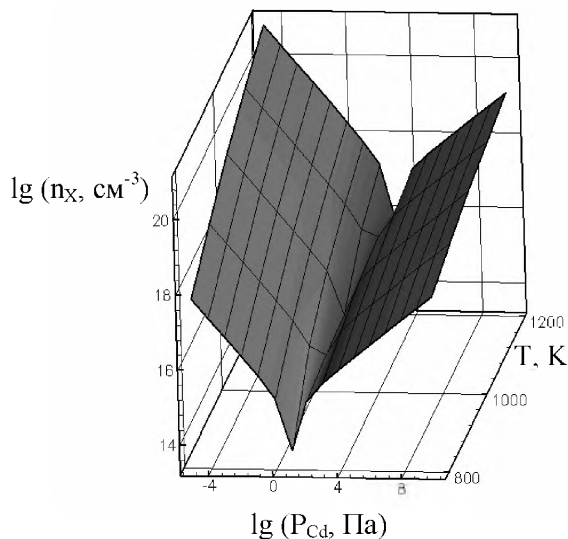


Рис. 4. Розрахункова просторова фазова n_x - P_{Cd} - T -діаграма рівноваги CdTe.

3.2. Плюмбум телурид. Результати розрахунку залежності холлівської концентрації n_x від температури відпалу T та парціального тиску пари телуру P_{Te_2} наведені на рис. 5. Як видно з рис. 5, за низьких температур відпалу отримуємо кристали p -типу провідності. З підвищенням температури відпалу і сталому парціальному тиску пари телуру холлівська концентрація дірок зменшується і за певної температури відбувається зміна типу провідності з p -типу на n і починає зростати концентрація електронів.

За низьких парціальних тисків пари телуру утворюються кристали PbTe n -типу провідності. Із збільшенням парціального тиску пари телуру при постійній температурі відпалу концентрація електронів спадає, і при певному значенні тиску пари телуру спостерігається зміна типу провідності з n на p -тип і в подальшому зростає концентрація дірок.

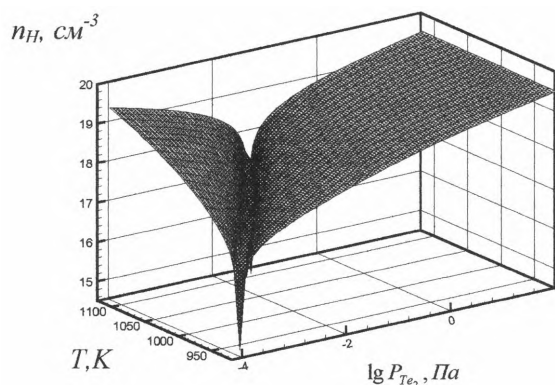


Рис. 5. Просторова p_x - P_{Te_2} - T -діаграма рівноваги плюмбум телуриду [13].

Розрахунок концентрації вільних носіїв заряду та йонізованих дефектів показав, що при низьких температурах відпалу переважають

двократно йонізовані вакансії плюмбуму V_{Pb}^{2-} . З ростом температури зростає концентрація всіх дефектів і найшвидше – $[Pb_i^+]$, що і пояснює температурний хід холлівської концентрації n_x .

Підвищення парціального тиску пари телуру при незмінній температурі відпалу призводить до росту концентрації дірок, концентрація електронів у кристалі при цьому зменшується. Це обумовлено зростанням концентрації одно- та двозарядних вакансій плюмбуму $[V_{Pb}^-]$, $[V_{Pb}^{2-}]$ і зменшенням концентрації міжвузлових атомів плюмбуму $[Pb_i^+]$ із збільшенням парціального тиску пари телуру.

3.3. Станум телурид. Результати розрахунку залежностей концентрації носіїв струму від температури відпалу і парціального тиску пари телуру наведено на рис. 6.

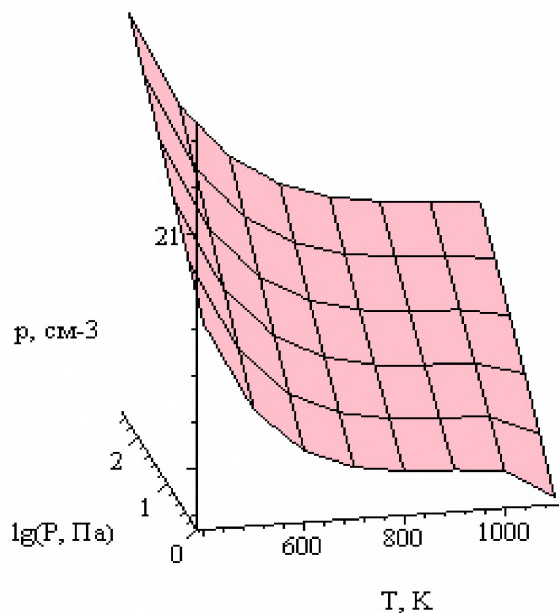


Рис. 6. Просторова p_x - P_{Te_2} - T -діаграма рівноваги станум телуриду.

Як видно з рис. 6, у межах ділянки гомогенності з підвищенням температури відпалу холлівська концентрація дірок зменшується. Зростання парціального тиску пари телуру при незмінній температурі відпалу призводить до зростання концентрації дірок (рис. 6). При відпалі станум телуриду в умовах, коли матеріал насичується металом чи халькогеном, концентрація дірок визначається межами ділянки гомогенності. Розрахунок концентрації дефектів показав, що у кристалах SnTe вакансії телуру $[V_{Te}^{2+}]$ утворюються у незначних кількостях і концентрація носіїв струму визначається в основному вакансіями стануму. Причому, концентрація $[V_{Sn}^{2-}]$ із збільшенням температури

спадає, а концентрація $[V_{Sn}^{4-}]$ зростає і за температур, близьких до температури топлення, значення концентрацій обох типів дефектів вирівнюється. За більш низьких температур переважають двократно заряджені вакансії стануму $[V_{Sn}^{2-}]$.

Підвищення парціального тиску пари телуру P_{Te_2} за сталих температур відпалу призводить до зростання концентрації дірок (рис. 6), при цьому зростає концентрація двократно $[V_{Sn}^{2-}]$ йонізованих вакансій стануму, а концентрація чотирикратно йонізованих вакансій $[V_{Sn}^{4-}]$ спадає.

Висновки

1. На основі моделювання процесів дефектоутворення в кристалах CdTe, PbTe, SnTe квазіхімічними реакціями одержано аналітичні вирази залежностей концентрації носіїв заряду (n_X) від технологічних факторів двотемпературного відпалу: температури відпалу (T); парціального тиску пари телуру (P_{Te_2}), металу (P_M).

2. Побудовані просторові $n_X - P_{Te_2} - T$ -діаграми та визначені умови формування матеріалу n - і p -типу провідності із наперед заданою концентрацією носіїв струму.

Література

1. **Фізико-хімічні проблеми** напівпровідникового матеріалознавства. – Том III. Сполуки $A^{IV}B^{VI}$. Частина I. Кадмій телурид: монографічний збірник / Д.М. Фреїк М.О. Галушак, В.В. Прокопів та ін. За заг. ред. Дмитра Фреїка. – Івано-Франківськ: видавництво Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу, 2010. – 394 с.
2. **Фізико-хімічні проблеми** напівпровідникового матеріалознавства. – Том I. Кристали $A^{IV}B^{VI}$ / Д.М. Фреїк, В.Ф. Пасічняк, В.В. Борик, та ін. За заг. ред. Дмитра Фреїка. – Івано-Франківськ: Видавничо-дизайнерський відділ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2007. – 338 с.
3. **Кристалохімія і термодинаміка** дефектів у сполуках $A^{IV}B^{VI}$. / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, М.О. Галушак та ін. – Івано-Франківськ: Плай, 1999. – 164 с.
4. **Крегер Ф.** Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. – Москва: Мир, 1969. – 654 с.
5. **Фізика и химия соединений $A^{IV}B^{VI}$** / Под ред. С.А. Медведева. – Москва: Мир. – 1970. – 624 с.
6. **Фреїк Д.М.** Термодинамічний n - p -перехід у кристалах телуриду кадмію / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, У.М. Писклинець // Фізика і хімія твердого тіла. – 2002. – Т. 3, № 1. – С. 58–61.
7. **Прокопів В.В.** Константи рівноваги квазіхімічних реакцій утворення власних точкових дефектів різного зарядового стану в телуриді свинцю / В.В. Прокопів, Л.Й. Межиловська, В.Б. Ваньчук, В.В. Прокопів (мол.) // Фізика і хімія твердого тіла. – 2005. – Т. 6. – № 4. – С. 622–627.
8. **Фреїк Д.М.** Кристалохімія власних атомних дефектів у кристалах телуриду олова / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, В.В. Борик, Я.І. Дроняк. // Фізика і хімія твердого тіла. – 2001. – Т. 2. – № 4. – С. 543–548.
9. **Зломанов В.П.** Собственные и примесные дефекты в соединениях группы $A^{IV}B^{VI}$ / В.П. Зломанов, А.М. Гаськов // Рост полупроводниковых кристаллов и пленок: Новые методики, легирование, критерии функциональной пригодности материалов. Новосибирск, Ч. II. – 1984. – С. 116–133.
10. **Фреїк Д.М.** Квазіхімічний опис нестехіометрії телуриду олова / Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів // Фізика і хімія твердого тіла. – 2001. – Т. 2. – № 2. – С. 223–227.

Прокопів В.В. (мол.) – аспірант кафедри фізики і хемії твердого тіла.

Рецензент

Сіренко Г.О. – доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри неорганічної та фізичної хемії Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника.