

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ, МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА**

Фізико-хімічний інститут
Бердянський державний педагогічний університет
Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

**ДЕРЖАВНЕ АГЕНТСТВО З ПИТАНЬ НАУКИ, ІННОВАЦІЇ ТА
ІНФОРМАЦІЇ УКРАЇНИ**

Державний фонд фундаментальних досліджень

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова
Інститут загальної і неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського
Інститут хімії поверхні ім. О.О.Чуйка

УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО
АСОЦІАЦІЯ "ВЧЕНІ ПРИКАРПАТТЯ"
ЛЮБЛІНСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ (ПОЛЬЩА)
УНІВЕРСИТЕТ ГАЗІ (ТУРЕЧЧИНА)

ФІЗИКА І ТЕХНОЛОГІЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТА НАНОСИСТЕМ

Матеріали XIII Міжнародної конференції

МКФТТПН-XIII

Т О М 2

16-21 травня 2011 р.

Івано-Франківськ
Україна

Thermodynamics of native point defects in crystals of compounds $A^{IV}B^{VI}$

Prokopiv V.V.

Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine

The basic electrical and photovoltaic properties of Lead Chalcogenides are defined by their point defects. Therefore an important task of material science is determinate the defect concentration, and establishing their influence on the crystal parameters. The method of thermodynamic potentials for calculation of crystals Lead Chalcogenides defect structure is proposed in this paper.

Equilibrium concentration of point defects in crystal by annealing two-temperature annealing determine from condition of equilibrium in the heterogeneous system at given pressure P and temperature T , which is the equality the chemical potentials of each component in all phases of system:

$$\mu_i^s = \mu_i^g, \quad \text{or} \quad dG_i^s / dN_i^s = dG_i^g / dN_i^g,$$

where G^s, N^s, G^g, N^g – Gibbs thermodynamic potentials and the concentration of particles in the crystal and gas, respectively, $i - M, N$.

Gibbs energy of crystal determine as:

$$G = U_0 + \sum (H + F_{vib})[D] + nE_C - pE_V - T(S_n + S_p + S_k)$$

where H – enthalpy of neutral defect formation, F_{vib} – free vibration energy of defect, $[D]$ – defect concentration D , n and p – electrons and holes concentration, E_C, E_V – energy of conductive band and valence band, S_k – configurational entropy, S_n and S_p – entropy of electron in the conductive band and entropy of holes in the valence band.

Chemical potential of defect was determined by differentiation of Gibbs energy on defect concentration.

$$\begin{aligned} \mu_{D_i}^s = H_i - kT \ln \left(\frac{J - \sum [D]}{[D_i]} \right) + \left[n \left(\frac{E_C}{kT} - \ln \left(\frac{N_C - n}{n} \right) \right) + p \left(\frac{E_V}{kT} + \ln \left(\frac{N_V - p}{p} \right) \right) \right] \times \\ \times \frac{kT \cdot Z_i}{\sqrt{(\sum Z[D])^2 + 4N_C N_V \exp(-E_g / kT)}} \end{aligned}$$

So, was receive a system of equations $\pm \mu_{D_i}^s = \mu_i^g$ for finding of equilibrium concentration of defects.

Concentration of point defects was determined for V_M, V_N, M_i, N_i . Each of these defects can be has the three charge state: neutral, one, or double charged. So, we have system of twelve variables and solving that can receive depends of Hall concentration of the charge carriers and atomic defects from technology factors of two-temperature annealing (annealing temperature T , partial vapor pressure of component P).