

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

Фізико-хімічний інститут

Бердянський державний педагогічний університет

Державний фонд фундаментальних досліджень

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова

Інститут металофізики імені Г.В. Курдюмова

Інститут загальної і неорганічної хімії імені В.І. Вернадського

Інститут хімії поверхні

Інститут термоелектрики

УКРАЇНСЬКЕ ФІЗИЧНЕ ТОВАРИСТВО

АСОЦІАЦІЯ "ВЧЕНІ ПРИКАРПАТТЯ"

ЛЮБЛІНСЬКИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ (ПОЛЬЩА)

*Присвячується 40-річчю наукової
школи з фізико-хімічних проблем
напівпровідникового
матеріалознавства Прикарпатського
національного
університету імені Василя
Стефаника*

ФІЗИКА І ТЕХНОЛОГІЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТА НАНОСИСТЕМ

Матеріали XII Міжнародної конференції

МКФТТПН-ХІІ

Т О М 2

18-23 травня 2009 р.

Івано-Франківськ
Україна

Термодинаміка власних точкових дефектів у кристалах сполук $A^{IV}B^{VI}$

Прокопів В.В.

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
Івано-Франківськ, Україна*

Точкові дефекти визначають основні електричні та фотоелектричні властивості матеріалів сполук $A^{IV}B^{VI}$. Тому важливою задачею матеріалознавства є визначення концентрації дефектів, та встановлення їх впливу на параметри кристалів.

В даній роботі запропоновано і розроблено метод термодинамічних потенціалів для розрахунку дефектної структури кристалів сполук $A^{IV}B^{VI}$.

Рівноважні концентрації точкових дефектів у кристалі при двотемпературному відпалі будемо визначати з умови рівноваги в гетерогенній системі при заданих тиску P і температурі T , якою є рівність хімічних потенціалів кожного компонента у всіх фазах системи:

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

де G^s , N^s , G^g , N^g – термодинамічні потенціали Гібса і концентрації частинок у кристалі та газі відповідно, i – М, N.

Енергія Гібса кристала

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

де H – ентальпія утворення нейтрального дефекту, F_{vib} – вільна коливна енергія дефекту, $[D]$ – концентрації дефекту D , n та p – концентрації електронів та дірок, E_C , E_V – енергія дна зони провідності та верху валентної зони, S_k – конфігураційна ентропія, S_n та S_p – ентропія електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні.

При наявності заряджених дефектів потрібно враховувати рівняння електронейтральності: $N_C e^{\frac{\mu}{kT}} - N_V e^{\frac{\mu + E_g}{kT}} = \sum Z \cdot [D^z]$, де N_C , N_V – густина станів у зоні провідності та у валентній зоні відповідно, E_g – ширина забороненої зони, μ – хімічний потенціал електронів.

Хімічний потенціал дефекту, що дорівнює хімічному потенціалу компонента взятому зі знаком «+» або «-» в залежності від типу дефекту, визначали шляхом диференціювання енергії Гібса по концентрації дефектів.

$$\mu_{D_i}^s = H_i - kT \ln \left(\frac{J - \sum [D]}{[D_i]} \right) + \left[n \left(\frac{E_C}{kT} - \ln \left(\frac{N_C - n}{n} \right) \right) + p \left(\frac{E_V}{kT} + \ln \left(\frac{N_V - p}{p} \right) \right) \right] \times$$

$$\times \frac{kT \cdot Z_i}{\sqrt{(\sum Z [D])^2 + 4N_C N_V \exp(-E_g / kT)}}$$

Хімічний потенціал газу М: $\mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi m kT)^{3/2}))$.

Для двоатомного газу N_2 :

$$\mu_0 = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^{3/2}) + \ln(h^3 / (8\pi^2 IkT)^{3/2}) + \ln(h\nu / (kT))).$$

m – маса атома або молекули, $I = ml^2$ – момент інерції молекули, l – відстань між ядрами молекули, ν – внутрішня частота коливань молекули.

Таким чином ми отримали систему рівнянь типу $\pm\mu_{D_i}^s = \mu_i^g$ для знаходження рівноважної концентрації дефектів.

Концентрації точкових дефектів визначали для V_M , V_N , M_i , N_i . Кожен з цих дефектів може знаходитись у трьох зарядових станах: нейтральний, однократно або двократно заряджений. Таким чином маємо систему із дванадцяти змінними, розв'язуючи яку одержимо залежності холлівської концентрації носіїв заряду та атомних дефектів від технологічних факторів двотемпературного відпалу (температури відпалу T , парціального тиску пари компонента P).

Thermodynamics of Own Point Defects in Crystals of $A^{IV}B^{VI}$ Compounds

Prokopiv V.V.

Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine

By the method of thermodynamics potentials expects concentrations of point defects and free charge carriers in the crystals of $A^{IV}B^{VI}$ compounds in depending of technological factors at the two-temperature annealing (annealing temperature T , partial pressure of pair component P).