

**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)**

# **ФІЗИКА І ТЕХНОЛОГІЯ ТОНКИХ ПЛІВОК ТА НАНОСИСТЕМ**

**Матеріали XI Міжнародної конференції**

**МКФТТПН-ХІ**

**Т О М 2**

*7-12 травня, 2007 р.*

Івано-Франківськ  
Україна

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

Прокопів В.В.

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

Точкові дефекти визначають основні електричні та фотоелектричні властивості напівпровідникових матеріалів. Тому важливою задачею матеріалознавства є визначення концентрації дефектів, та встановлення їх впливу на параметри кристалів.

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

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 компоненту 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

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

де  $H$  – ентальпія утворення нейтрального дефекту,  $F_{\text{vib}}$  – 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,  $\mu$  – хімічний потенціал електронів.

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

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

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

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

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,  $\nu$  – 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 компоненту  $P$ ).