

КРИСТАЛОХІМІЧНІ МОДЕЛІ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ І ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ ZnS

Г.Я. Гургула, Н.Д. Фреїк, М.П. Вадюк, Т.П. Вінтоняк
*Кафедра фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатського національного
університету імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57,
Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

Цинк сульфід – доволі складний об’єкт для дослідження завдяки особливостям кристалічної структури, різноманітності структурних дефектів, багатому спектру точкових дефектів, що призводить до суперечливої інтерпретації результатів дослідження. Тому до цього часу немає чіткого пояснення щодо виду переважаючих дефектів і їх зарядового стану у цинк сульфіді в залежності від умов його одержання. Не виявлені і кількісні співвідношення між різними типами дефектів, які дозволили б встановити залежність фізико-хімічних властивостей, зокрема типу провідності, від концентрації і виду точкових дефектів.

Зроблено аналіз дефектної підсистеми на основі кристалоквазіхімічних моделей та виявлено їх вплив на фізико-хімічні властивості сульфиду цинку. На відміну від звичайної, спрощеної, хімічної формули ZnS, отримана кристалоквазіхімічна формула визначає спектр точкових дефектів, які обумовлюють n-тип провідності кристалу цинк сульфід, тобто дає більш повну інформацію про його дефектну підсистему.

Так, зокрема, для n-ZnS кристалоквазіхімічна формула матиме вигляд:

$$(Zn_{\gamma\alpha+1-\alpha}^{\times} V_{\alpha(1-\gamma)}^{//})_{Zn} (S_{(1-\alpha)}^{\times} V_{\alpha}^{\bullet\bullet})_S (Zn_{\alpha(1-\gamma)(1-\delta)}^{\bullet} Zn_{\alpha\delta(1-\gamma)}^{\bullet\bullet})_i + \alpha(\gamma + \delta - \delta\gamma + 1)e'$$

Тут Zn_{Zn}^{\times} , S_S^{\times} – цинк і сульфур у вузлах кристалічної ґратки, $V_{Zn}^{//}$ – двозарядні вакансії цинку, V_S^{\bullet} – однозарядні вакансії сульфуру, Zn_i^{\bullet} – однозарядні міжвузлові атоми цинку, $Zn_i^{\bullet\bullet}$ – двозарядні міжвузлові атоми телуру, α – мольна доля легуючого компонента, e' – концентрація електронів, “•”, “/”, “×” – позитивний, негативний та нейтральний заряди.

З отриманих кристалоквазіхімічних формул можна визначити не тільки переважаючі типи точкових дефектів, але і залежності їх концентрацій від хімічного складу – величини відхилення від стехіометрії (α , β), вмісту легуючих елементів (Zn, S) відповідно. Так, зокрема, для кристалів n-ZnS, домінуючими дефектами в яких є вакансії сульфуру ($V_S^{\bullet\bullet}$) та міжвузлові атоми цинку (Zn_i^{\bullet} , $Zn_i^{\bullet\bullet}$), із збільшенням відхилення від стехіометрії (α) відбувається зростання усіх типів точкових дефектів та носіїв заряду.