

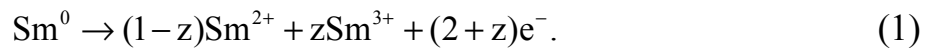
ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ І ТОЧКОВІ ДЕФЕКТИ У СУЛЬФІДІ САМАРІЮ SmS

М.О. Шевчук

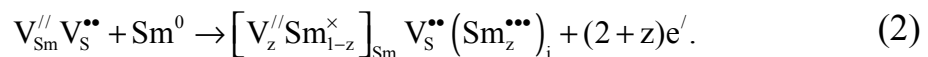
*Кафедра фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатського національного
університету імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57,
Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

SmS відноситься до напівпровідникових матеріалів змінного складу з достатньо широкою областю гомогенності, повністю зміщеною в бік металу. Останнє обумовлює існування матеріалу тільки n-типу провідності із можливою зміною концентрації електронів у значних межах $6 \cdot 10^{18} \div 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Він кристалізується у структурі типу NaCl, параметр ґратки якої із збільшенням вмісту самарію зростає від $a = 5,9694 \text{ \AA}$ для 50,50 ат. % Sm до $5,9718 \text{ \AA}$ для 54,3 ат. % Sm.

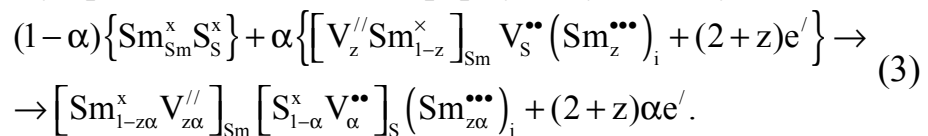
Йонний радіус Sm^{3+} є меншим за йонний радіус Sm^{2+} та атомний радіус самарію. Диспропорціювання зарядового стану самарію запишеться згідно схеми:



В основі кристалоквазіхімічного аналізу лежить суперпозиція відповідного легуючого кластера і кристалохімічної формули сполуки. Кристалохімічний кластер формуються на основі антиструктури, яка для SmS має вигляд $V_{\text{Sm}}^{//} V_{\text{S}}^{**}$. Враховуючи запропоновані моделі дефектної підсистеми нестехіометричного самарій сульфїду, запишемо для них кристалоквазіхімічні формули. Кристалоквазіхімічний кластер n-SmS (надлишок самарію у границях області гомогенності) буде представлений як:



У цьому випадку кристалоквазіхімічна формула буде наступною:



Тут $0 \leq \alpha \leq 0,04$ – відхилення від стехіометричного складу в основній матриці. Рівняння електронейтральності для випадку (3) матиме вигляд:

$$n + q_{V_{\text{Sm}}^{//}} [V_{\text{Sm}}^{//}] = q_{V_{\text{S}}^{**}} [V_{\text{S}}^{**}] + q_{\text{Sm}_i^{***}} [\text{Sm}_i^{***}], \quad (4)$$

де $n = A\alpha(2+z)$, $[V_{\text{Sm}}^{//}] = A z \alpha$, $[V_{\text{S}}^{**}] = A \alpha$, $\text{Sm}_i^{***} = A z \alpha$, $q_{V_{\text{Sm}}^{//}} = q_{V_{\text{S}}^{**}} = 2$, $q_{\text{Sm}_i^{***}} = 3$.

Тоді холлівська концентрація $n_{\text{H}} = |n - p|$, згідно (4), буде:
 $n_{\text{H}} = A\alpha(2+z)$.