

## ВІДХИЛЕННЯ ВІД СТЕХІОМЕТРІЇ У КРИСТАЛАХ GeTe ТА КРИСТАЛОХІМІЯ ВЛАСНИХ ДЕФЕКТІВ

Л.Д. Юрчишин

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

Інтерес до напівпровідникових сполук  $A^{IV}B^{VI}$  пов'язаний із широким використанням у термоелектричних перетворювачах енергії, фотоприймачах [1]. Вони також є цікавими з теоретичних позицій у зв'язку із особливими фізико-хімічними властивостями, пов'язаними із відхиленнями від стехіометричного складу. У цьому відношенні найбільшу увагу привертає телурид германію  $Ge_{1-x}Te_x$  із широкою областю гомогенності. Телурид германію являє собою вироджений напівпровідник р-типу ( $x=0,503 - 0,515$  при 600 К) із значною концентрацією носіїв струму ( $p=(0,4-2,5)10^{21} \text{ см}^{-3}$ ) [2].

Весь комплекс фізико-хімічних властивостей  $Ge_{1-x}Te_x$  визначається природою, зарядовим станом і концентрацією власних точкових дефектів та їх комплексів. У роботі методами квазіхімічних рівнянь утворення дефектів та кристалоквазіхімічних формул виконано аналіз дефектної підсистеми у кристалах P-GeTe в межах області гомогенності із врахуванням зміни валентності Ge від 2 до 4.

Акцепторний вплив у  $Ge_{1-x}Te_x$  пов'язаний із вакансіями у катіонній підгратці. При цьому відсутність германію обумовлює перехід двох s-електронів із валентної зони в зону провідності з одночасним "витісненням" чотирьох електронів з кристалу (два s і два p). Електронні р-стани телуру при цьому залишаються у валентній зоні і тому у ній з'являються дві дірки [2]. Із ростом відхилення від стехіометричного складу на бік телуру має місце зменшення коефіцієнта термо-е.р.с. і збільшення питомої електропровідності через ріст концентрації основних носіїв.

На даний час немає єдиної думки щодо природи цих дефектів та їх зарядового стану. Для пояснення відомих експериментальних результатів нами запропоновано реалізацію складного спектра як виду цих дефектів, так і їх зарядового складу. На основі запропонованих квазіхімічних формул [3] розраховано залежність концентрації дефектів, вільних носіїв та холлівської концентрації від ступеня відхилення від стехіометричного складу.

1. Абрикосов Н.Х., Порецкая Л.В., Скуднова Е.В., Шалимова Л.І. Полупроводниковые соединения, их получение и свойства. Наука, М. 177 с. (1967).
2. Коржуев М.А. Теллурид германия и его физические свойства. Наука, М. 103 с. (1986).