

## ТЕРМОДИНАМІКА І КРИСТАЛОХІМІЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У КРИСТАЛАХ IV-VI

Д.М. Фреїк, Л.В. Туровська, В.М. Бойчук, Л.Й. Межиловська,  
І.М. Андрійшин

*Кафедра фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний  
університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57,  
Івано-Франківськ, 76000, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua*

Сполуки IV-VI є базовими матеріалами для термоелектричних перетворювачів енергії, що функціонують в області середніх температур, приладів інфрачервоної техніки, інжекційних лазерів для оптичного діапазону. Точкові дефекти та їх комплекси у значній мірі відповідальні за фізико-хімічні властивості матеріалу. На даний час немає єдиної думки щодо природи цих дефектів та їх зарядового стану.

Рівноважні концентрації точкових дефектів у кристалі при двотемпературному відпалі визначали методом термодинамічних потенціалів з умови рівноваги в гетерогенній системі при заданих тиску  $P$  і температурі  $T$ . На основі отриманої системи рівнянь типу  $\pm\mu_{D_i}^s = \mu_i^g$  побудовані залежності холлівської концентрації носіїв заряду та атомних дефектів у PbTe від технологічних факторів двотемпературного відпалу (температури відпалу  $T$ , парціального тиску пари компоненту  $P_{Pb}$ ). При низьких тисках пари телуру отримуємо матеріал n-типу провідності. Зі зростанням  $P_{Te_2}$  спостерігаємо зменшення концентрації електронів, термодинамічний n-p-перехід та подальше зростання концентрації дірок. Для області низьких тисків домінуючими дефектами є міжвузлові атоми плюмбуму  $Pb_i^+$ ,  $Pb_i^{2+}$ . В точці n-p-переходу відбувається перерозподіл в концентраціях домінуючих точкових дефектів, і вже при вищих значеннях  $P_{Te_2}$  домінуючими дефектами є катіонні вакансії  $V_{Pb}^{2-}$ ,  $V_{Pb}^-$ . Для нижчих температур відпалу конверсія типу провідності відбувається при менших значеннях парціального тиску телуру.

Аналіз кристалоквазіхімічних рівнянь дозволяє провести розрахунки концентрації точкових дефектів та носіїв струму, а також холлівської концентрації від вмісту телуру. При зростанні концентрації телуру в кристалах спочатку спостерігаємо зменшення концентрації електронів, конверсію провідності з n- на p-тип та подальше зростання концентрації дірок. Також має місце різке зростання концентрації вакансій плюмбуму  $V_{Pb}^{2-}$ ,  $V_{Pb}^-$ . Зі зростанням величини початкового відхилення від стехіометрії на боці Pb точка конверсії провідності із n- на p-тип зміщується на бік більших концентрацій телуру.