

В.М. Бойчук, О.В. Ткачик, Л.В. Туровська, Н.І. Дикун

## Кристалоквазіхімічні формули нестехіометричного п्लомбум телуриду із складним спектром точкових дефектів і процеси самолегування

Фізико-технічний факультет

Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул.Шевченка, 57, м.Івано-Франківськ, Україна, 76025, e-mail: freik.ru.if.ua

Запропоновано кристалоквазіхімічні формули для кристалів n- і p-PbTe із складним спектром точкових дефектів у катіонній підґратці. Проаналізовано механізми самолегування n-PbTe Телуром і p-PbTe Пломбумом та визначено умови реалізації n-p і p-n-переходів відповідно.

**Ключові слова:** пломбум телурид, Пломбум, Телур, точкові дефекти, кристалоквазіхімія.

Стаття поступила до редакції 07.09.2006; прийнята до друку 15.03.2007.

### Вступ

У напівпровідниках  $A^{IV}B^{VI}$ , вміст сторонніх домішок в яких не перевищує фонові величини, тип і концентрація вільних носіїв заряду для області домішкової провідності зумовлені власними точковими дефектами кристалічної ґратки [1].

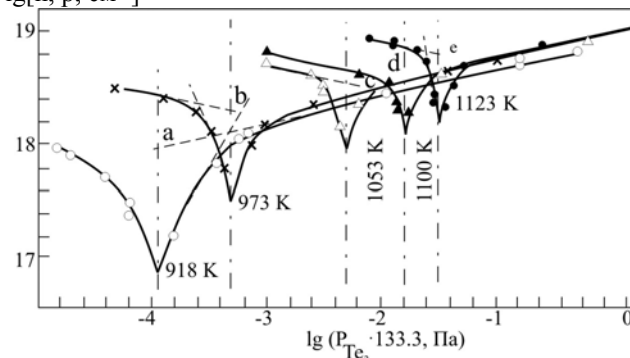
Пломбум халькогеніди мають провідність n-типу при надлишку Пломбуму відносно стехіометричного складу і провідність p-типу при надлишку халькогену [1-3]. У випадку пломбум телуриду максимальні значення концентрації носіїв складають:  $1,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  електронів при 993 К і  $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  дірок при 1053 К [4-5].

На рис. 1 наведені ізотерми залежності концентрації носіїв струму від парціального тиску пари Телуру  $P_{\text{Te}_2}$  [1]. При низьких тисках пари халькогену кристали мають електронну провідність, а в області високих тисків – діркову. При парціальних тисках халькогену  $P_{\text{Te}_2}$ , більших і менших, що відповідають мінімуму, концентрація носіїв зростає і досягає постійного нахилу (рис. 1).

Слід відзначити, що результати вимірювань концентрації носіїв як функції від парціального тиску пари халькогену (рис. 1) можуть бути пояснені в однаковій мірі дефектоутворенням як за Шотткі, так і за Френкелем [6,7]. Для пломбум телуриду авторами [49-51] для пояснення характеру зміни електричних властивостей в залежності від відхилення від стехіометрії застосовувалась модель дефектів за Шотткі: були розраховані енергії утворення вакансій

Пломбуму і Телуру, які дорівнюють 0,3 і 1,2 еВ відповідно. У ряді інших робіт [3,9] прийнято, що в пломбум телуриді переважаючими є дефекти Френкеля.

Дослідження механізму дифузії у пломбум халькогенідах дає цінну додаткову інформацію про природу точкових дефектів, пов'язаних з відхиленням від стехіометрії. Дослідження процесу самодифузії  $\text{Pb}^{210}$  у пломбум телуриді дало можливість виявити тип переважаючих дефектів у катіонній підґратці в залежності від відхилення від стехіометрії. У  $\lg[n, p, \text{см}^{-3}]$



**Рис. 1.** Ізотерми залежності концентрації носіїв струму від парціального тиску пари Телуру для пломбум телуриду [1].

пломбум халькогенідах коефіцієнт самодифузії  $\text{Pb}^{210}$  змінюється по кривій з мінімумом в залежності від вмісту халькогену. Мінімум знайдений поблизу стехіометричного складу. Ці результати узгоджуються з переважанням в катіонній підґратці дефектів Френкеля ( $\text{Pb}_i + \text{V}_{\text{Pb}}$ ). Автори [1] вважають,

що атоми Телуру  $Te^{127}$  в міжвузлях відіграють більш важливу роль в процесі самодифузії плюмбум телуриду р-типу в порівнянні з вакансіями Плюмбуму. Слід відзначити, що у зв'язку із більшою рухливістю міжвузлові атоми порівняно із вакансіями можуть вносити значний вклад у процес дифузії навіть у тому випадку, коли їх концентрація значно менша концентрації вакансій. Для визначення переважаючого типу дефектів у плюмбум халькогенідах використовувався метод порівняння експериментальної густини з теоретичною [10]. Зроблено висновок, що донорні рівні пов'язані із Плюмбумом у міжвузлях, а акцепторні – з вакансіями Плюмбуму. Ці дані знаходяться в добрій відповідності з результатами дослідження самодифузії  $Pb^{210}$  в  $PbTe$  [9].

Розрахунок енергетичного спектру точкових дефектів підтверджує, що міжвузловий  $Pb$  у  $PbTe$  є двозарядним донором, а міжвузловий  $Te$ , швидше за все є електронейтральним. Що стосується антиструктурних дефектів, то  $Pb$  на місці  $Te$  в  $PbTe$  – двократний акцептор, а халькоген  $Te$  на місці  $Pb$  – двократний донор [11].

Розрахунки перерозподілу електронної густини для випадку вакансій, показують, що вже в кластері з найближчих атомів практично відновлюється електронейтральність [11]. Так, для  $V_{Pb}$ , в  $PbTe$  надлишковий заряд кластера в двократно іонізованому стані дорівнює приблизно 0,14 е, в однократно іонізованому – 0,01 е. Решта надлишкового заряду розподілено на великих відстанях. Внаслідок цього подавлено розсіювання вільних носіїв заряду на іонізованих вакансіях.

$$(1-\alpha)[Pb_{Pb}^x Te_{Te}^x] + \alpha\{[Pb_{(1-\gamma)}^{II} V_{\gamma}^{II}]_{Pb} [V_{\gamma}^x V_{1-\gamma}^{II}]_{Te} (Pb_{\gamma}^{II})_i\} \rightarrow [Pb_{1-\alpha}^x Pb_{\alpha(1-\gamma)}^{II} V_{\alpha\gamma}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha\gamma}^x V_{\alpha(1-\gamma)}^{II}]_{Te} (Pb_{\alpha\gamma}^{II})_i \rightarrow$$

$$\rightarrow [Pb_{1-\alpha\gamma}^x V_{\alpha\gamma}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha\gamma}^x V_{\alpha(1-\gamma)}^{II}]_{Te} (Pb_{\alpha\gamma}^{II})_i + 2\alpha(1-\gamma)e' \rightarrow [Pb_{1-\alpha\gamma}^x V_{\alpha\gamma(1-\delta)}^{II} V_{\alpha\gamma\delta}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{II}]_{Te} (Pb_{\alpha\gamma}^{II})_i + [2\alpha + \alpha\gamma\delta]e'$$

Тут  $[V_{\alpha\gamma}^{II}]_{Pb} \rightarrow [V_{\alpha\gamma(1-\delta)}^{II}]_{Pb} + [V_{\alpha\gamma\delta}^{II}]_{Pb} + \alpha\gamma\delta e'$ .

Аналогічно кристалоквазіхімічне представлення нестехіометричного р- $PbTe$  (надлишок Телуру у границях області гомогенності) описується як

$$(1-\beta)[Pb_{Pb}^x Te_{Te}^x] + \beta\{[V_{Pb}^{II} [Te_{(1-\gamma)}^{II} V_{\gamma}^{II}]_{Te} (Te_{\gamma}^x)_i]\} \rightarrow [Pb_{1-\beta}^x V_{\beta}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\beta}^x Te_{\beta(1-\gamma)}^{II} V_{\beta\gamma}^{II}]_{Te} (Te_{\beta\gamma}^x)_i \rightarrow$$

$$\rightarrow [Pb_{1-\beta}^x V_{\beta}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\beta\gamma}^x V_{\beta\gamma}^{II}]_{Te} (Te_{\beta\gamma}^x)_i + 2\beta(1-\gamma)h^{\bullet} \rightarrow [Pb_{1-\beta}^x V_{\beta(1-\delta)}^{II} V_{\beta\delta}^{II}]_{Pb} [Te_{1-\beta\gamma}^x V_{\beta\gamma}^{II}]_{Te} (Te_{\beta\gamma}^x)_i + [2\beta(1-\gamma) - \beta\delta]h^{\bullet}$$

Тут  $[V_{\beta}^{II}]_{Pb} \rightarrow [V_{\beta(1-\delta)}^{II}]_{Pb} + [V_{\beta\delta}^{II}]_{Pb} + \beta\delta e'$ .

Таким чином, діркова провідність плюмбум телуриду пов'язана із вакансіями у катіонній  $V_{Pb}^{II}$ ,  $V_{Pb}^I$  (1), а електронна – у аніонній  $V_{Te}^{II}$  (2) підгратках кристалічної структури плюмбум телуриду.

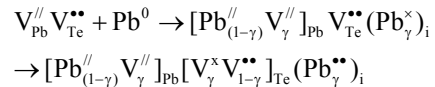
Одержані кристалоквазіхімічні формули (1) і (2) дають можливість розрахувати концентрацію точкових дефектів у катіонній та аніонній підгратках і вільних носіїв заряду (n, p) як в n- $PbTe$ , так і р- $PbTe$  відповідно.

Таким чином відсутні достовірні дані як про вид точкових дефектів, так і про їх зарядовий стан. Це можна пояснити тим, що формування дефектної підсистеми у значній мірі визначається технологічними факторами приготування матеріалу. У роботі проаналізовано вплив складного спектру точкових дефектів на зміну типу провідності і концентрації носіїв струму.

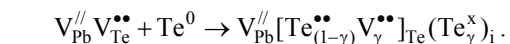
## I. Кристалоквазіхімічні формули нестехіометричного плюмбум телуриду

В основу методу кристалоквазіхімічного аналізу дефектної підсистеми покладено поняття про антиструктуру, на основі якої здійснюється суперпозиція кристалоквазіхімічних кластерів базової і легуючої сполуки [12]. Антиструктурною плюмбум телуриду є галеніт  $V_{Pb}^{II} V_{Te}^{II}$ , де  $V_{Pb}^{II}$  і  $V_{Te}^{II}$  – двократнозаряджені негативна вакансія Плюмбуму і позитивна вакансія Телуру, „ $''$ ” і „ $''$ ” – негативний і позитивний заряди відповідно.

Кристалоквазіхімічний кластер n –  $PbTe$  (надлишок Плюмбуму у границях області гомогенності) з врахуванням диспропорціонування вакансій у катіонній підгратці  $Pb$  буде:



Кластер:



Кластер:

В хімії вигідно використовувати мольні долі – кількість дефектів, які припадають на один моль речовини. Але у зонній моделі концентрацію електронів і дірок природно виражати числом частинок в одиниці об'єму, тобто у вигляді дійсних концентрацій. Враховуючи цю обставину, виразимо концентрацію дефектів (N) через їхні мольні долі  $\alpha(\beta)$ .

Згідно [7] концентрація частинок бінарної сполуки в  $1 \text{ см}^3$  визначається:

$$N = \frac{2\rho N_A}{M} \alpha, \quad (3)$$

де  $\rho$  – густина ( $\text{г}\cdot\text{см}^{-3}$ ),  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$  моль $^{-1}$ ,  $M$  – молярна маса ( $\text{г}\cdot\text{моль}^{-1}$ ).

Враховуючи, що густину можна визначити через параметр елементарної комірки (а) як

$$\rho = \frac{MZ}{N_A a^3}, \quad (4)$$

де  $Z$  – число структурних одиниць (молекул) в елементарній комірці ( $Z=4$ ). Для  $N$  остаточно отримаємо:

$$A = \frac{2Z}{a^3} \alpha. \quad (5)$$

Рівняння електронейтральності для (1):

$$q_n n + q_{V_{Pb}''} [V_{Pb}'''] + q_{V_{Pb}'} [V_{Pb}'] = q_p p + q_{V_{Te}''} [V_{Te}'''] + q_{Pb_i''} [Pb_i'''], \quad (6)$$

де  $p = 0$ ,  $n = A(2\alpha + \alpha\gamma\delta)$ ,  $[V_{Pb}'''] = A\alpha\gamma(1 - \delta)$ ,  $[V_{Pb}'] = A\alpha\gamma\delta$ ,  $[V_{Te}'''] = A\alpha$ ,

$[Pb_i'''] = A\alpha\gamma$ ,  $q_n = q_{V_{Pb}''} = q_p = 1$ ,  $q_{V_{Pb}'} = q_{V_{Te}''} = q_{Pb_i''} = 2$ .

Тоді холлівська концентрація  $n_H = n - p$  буде:

$$n_H = A(2\alpha + \alpha\gamma\delta). \quad (7)$$

Для надстехіометрії Телуру рівняння електронейтральності згідно (2) буде:

$$q_n n + q_{V_{Pb}''} [V_{Pb}'''] + q_{V_{Pb}'} [V_{Pb}'] = q_p p + q_{V_{Te}''} [V_{Te}'''], \quad (8)$$

де  $q_n = q_{V_{Pb}''} = q_p = 1$ ,  $q_{V_{Pb}'} = q_{V_{Te}''} = 2$ .

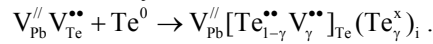
$n = 0$ ,  $p = 2A\beta(1 - \gamma) - A\beta\delta$ ,  $[V_{Pb}'''] = A\beta(1 - \delta)$ ,  $[V_{Pb}'] = A\beta\delta$ ,  $[V_{Te}'''] = A\beta\gamma$ .

Холлівська концентрація  $n_H = n - p$  буде:

$$n_H = 2A\beta(1 - \gamma) - A\beta\delta. \quad (9)$$

## II. Кристалоквазіхімічні формули самолегованого п्लомбум телуриду

Для  $n - \text{PbTe}$  процес самолегування телуром опишеться наступним чином:



$$\begin{aligned} (1-x) \{ [Pb_{1-\alpha\gamma}^x V_{\alpha\gamma(1-\delta)}'' V_{\alpha\gamma\delta}']_{Pb} [Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha}''']_{Te} (Pb_{\alpha\gamma}^x)_i + (2\alpha + \alpha\gamma\delta)e' \} + x \{ V_{Pb}'' [Te_{1-\gamma}'' V_{\gamma}''']_{Te} (Te_{\gamma}^x)_i \} \rightarrow \\ \rightarrow [Pb_{(1-\alpha\gamma)(1-x)}^x V_{\alpha\gamma(1-\delta)(1-x)+x}'' V_{\alpha\gamma\delta(1-x)}']_{Pb} [Te_{(1-\alpha)(1-x)+(1-\gamma)x}^x V_{\alpha(1-x)+\gamma x}''']_{Te} (Pb_{\alpha\gamma(1-x)}^x)_i (Te_{\gamma x}^x)_i + \\ + (2\alpha + \alpha\gamma\delta)(1-x)e' + 2(1-\gamma)xh^* \end{aligned} \quad (10)$$

Рівняння електронейтральності для (10):

$$q_n n + q_{V_{Pb}''} [V_{Pb}'''] + q_{V_{Pb}'} [V_{Pb}'] = q_p p + q_{V_{Te}''} [V_{Te}'''] + q_{Pb_i''} [Pb_i'''], \quad (11)$$

де  $p = 2Ax(1 - \gamma)$ ,  $n = A(2\alpha + \alpha\gamma\delta)(1 - x)$ ,  $[V_{Pb}'''] = A((\alpha\gamma(1 - \delta)(1 - x) + x))$ ,  $[V_{Pb}'] = A\alpha\gamma\delta(1 - x)$ ,

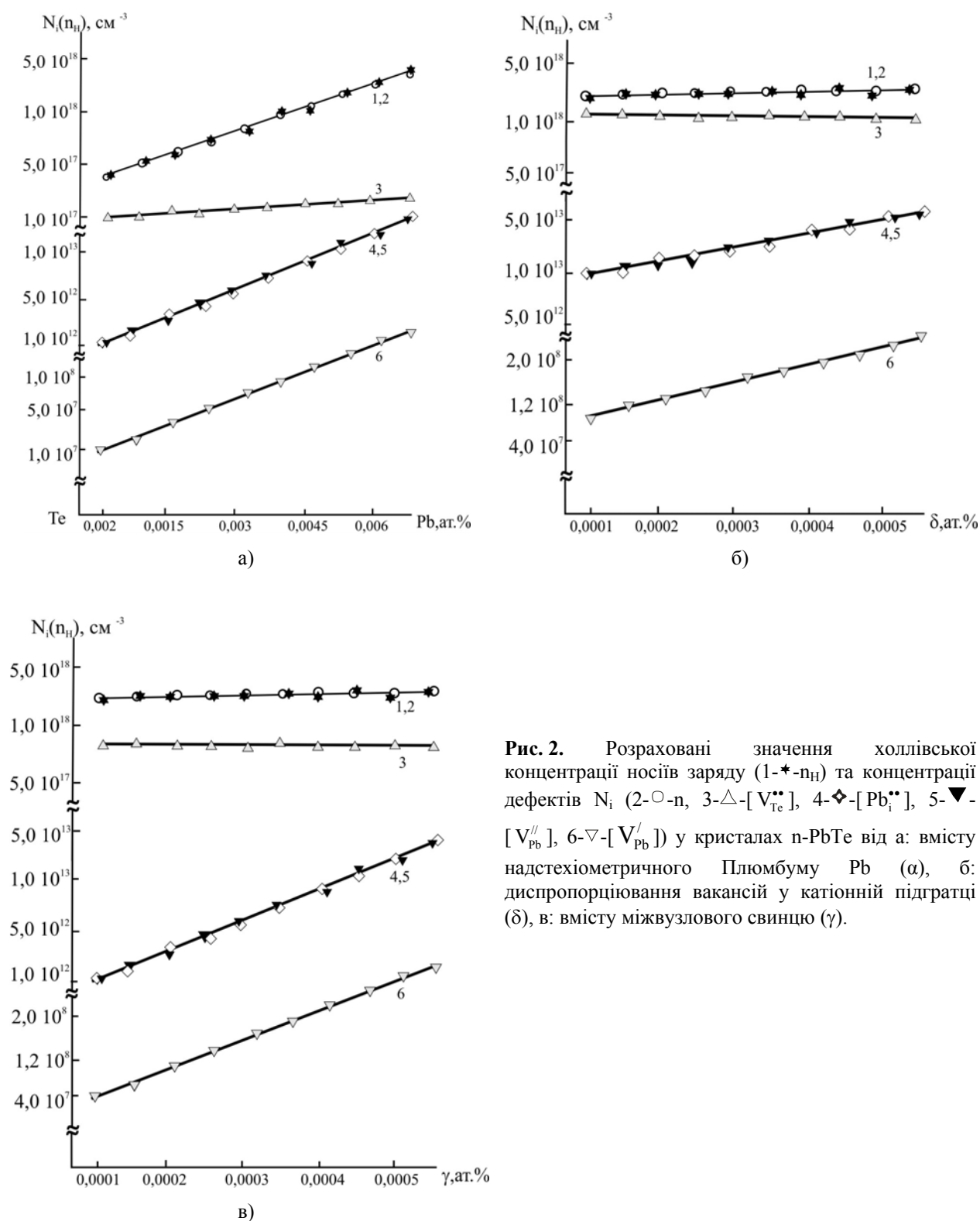
$[V_{Te}'''] = A(\alpha(1 - x) + \gamma x)$ ,  $[Pb_i'''] = A\alpha\gamma(1 - x)$ ,  $q_n = q_{V_{Pb}''} = q_p = 1$ ,  $q_{V_{Pb}'} = q_{V_{Te}''} = q_{Pb_i''} = 2$ .

Холлівська концентрація у цьому випадку буде:

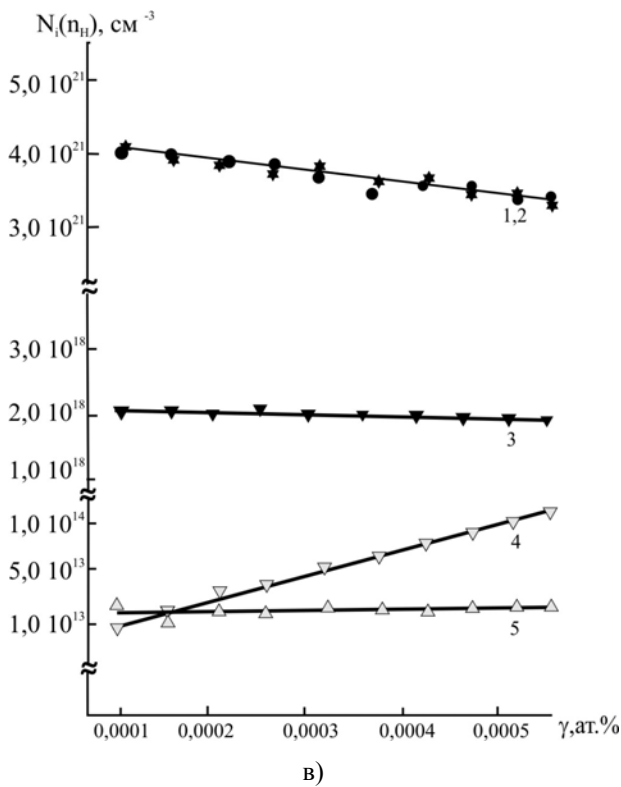
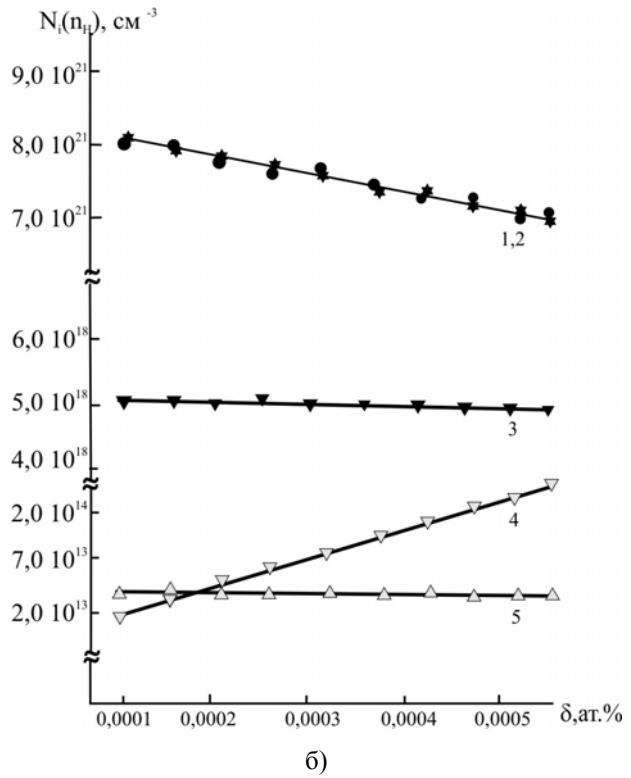
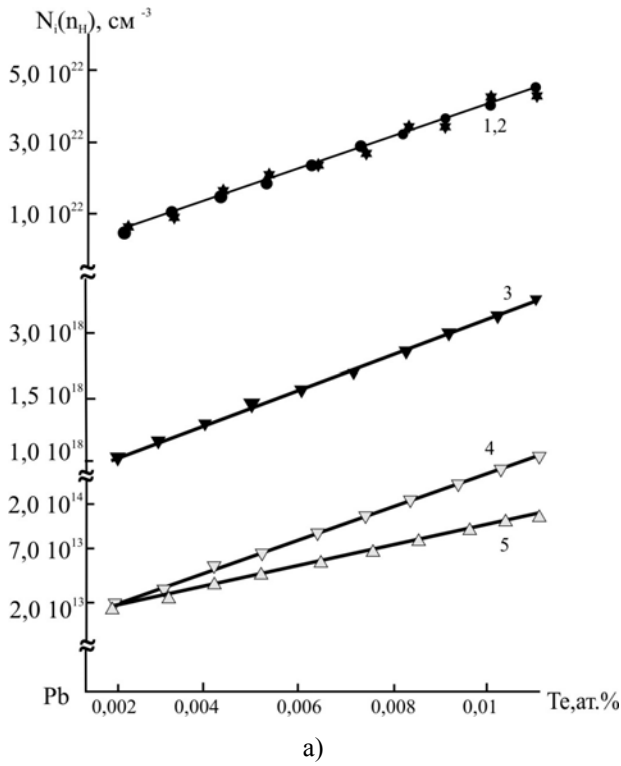
$$n_H = A[(2\alpha + \alpha\gamma\delta)(1 - x) - 2x(1 - \gamma)]. \quad (12)$$

Для випадку п्लомбум телуриду з переважаючою

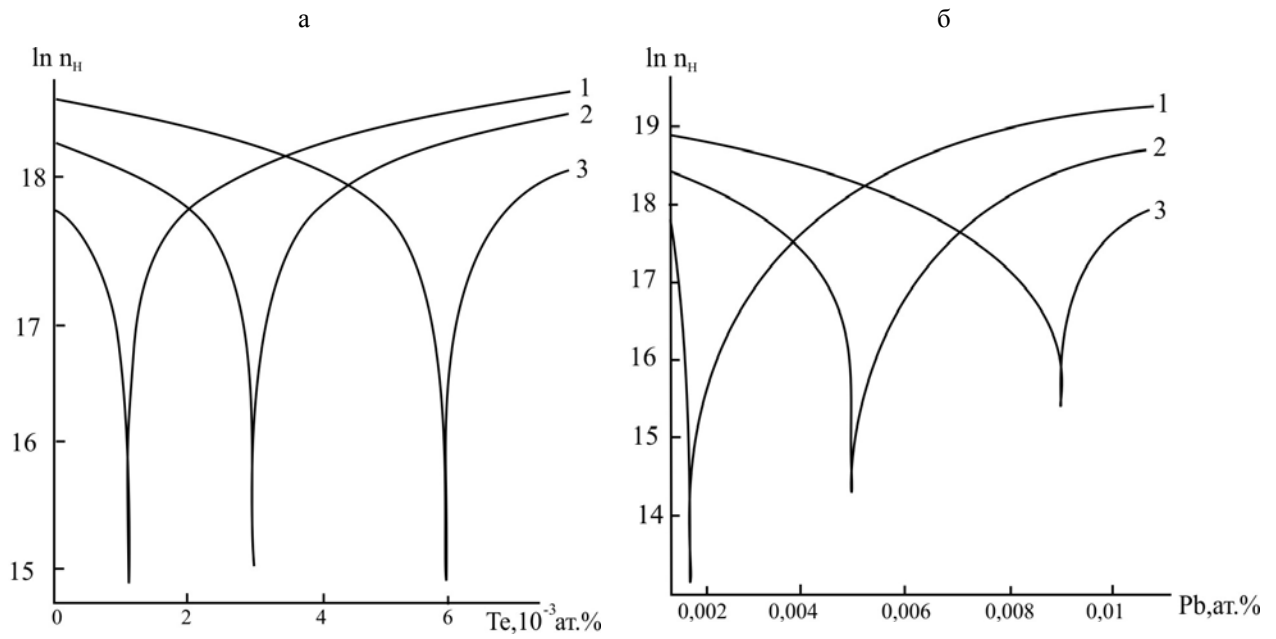
дірковою провідністю при легуванні Пломбумом отримаємо:



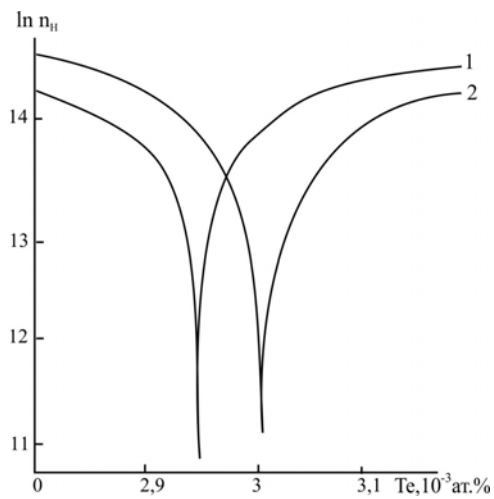
**Рис. 2.** Розраховані значення холлівської концентрації носіїв заряду (1- $\bullet$ - $n_H$ ) та концентрації дефектів  $N_i$  (2- $\circ$ - $n$ , 3- $\triangle$ - $[V_{Te}^{**}]$ , 4- $\diamond$ - $[Pb_i^{**}]$ , 5- $\blacktriangledown$ - $[V_{Pb}^{//}]$ , 6- $\nabla$ - $[V_{Pb}^/]$ ) у кристалах n-PbTe від а: вмісту надстехіометричного Плумбуму Pb ( $\alpha$ ), б: диспропорціювання вакансій у катіонній підгратці ( $\delta$ ), в: вмісту міжвузлового свинцю ( $\gamma$ ).



**Рис. 3.** Розраховані значення холлівської концентрації носіїв заряду (1- $\ast$ - $n_H$ ) та концентрації дефектів  $N_i$  (2- $\bullet$ - $p$ , 3- $\blacktriangledown$ - $[V_{Pb}^{//}]$ , 4- $\nabla$ - $[V_{Pb}^/]$ , 5- $\triangle$ - $[V_{Te}^{**}]$ ) у кристалах  $p$ - $PbTe$  від а: вмісту надстехіометричного Телуру  $Te$  ( $\beta$ ), б: диспропорціювання вакансій у катіонній підгратці ( $\delta$ ), в: вмісту міжвузлового Телуру ( $\gamma$ ).



**Рис. 4.** Залежність холлівської концентрації носіїв струму ( $n_H$ ) самолегованих n- PbTe (а) і р- PbTe (б) від вмісту надстехіометричного елементу Te і Pb для різного початкового відхилення від стехіометрії –  $\alpha$ , ат % Pb : 0,001 (1), 0,003 (2), 0,006 (3) (а);  $\beta$ , ат. % Te : 0,001 (1), 0,005 (2), 0,009 (3) (б).



**Рис. 5** Залежність холлівської концентрації носіїв струму ( $n_H$ ) для n- PbTe:Te від концентрації домішки при різних механізмах легування: 1 – заміщення телуром аніонних вакансій; 2 – заміщення і вкорінення Телуру у міжвузля.

$$V_{Pb}^{//} V_{Te}^{**} + Pb^0 \rightarrow [Pb_{1-\gamma}^{//} V_{\gamma}^{//}]_{Pb} V_{Te}^{**} (Pb_{\gamma}^x)_i \rightarrow [Pb_{1-\gamma}^{//} V_{\gamma}^{//}]_{Pb} V_{Te}^{**} (Pb_{\gamma}^{**})_i + 2\gamma e'$$

$$(1-x) \{ [Pb_{1-\beta}^x V_{\beta(1-\delta)}^{//} V_{\beta\delta}^{\prime}]_{Pb} [Te_{1-\beta\gamma}^x V_{\beta\gamma}^{**}]_{Te} (Te_{\beta\gamma}^x)_i + (2\beta(1-\gamma) - \beta\delta) h^* \} + x \{ [Pb_{1-\gamma}^{//} V_{\gamma}^{//}]_{Pb} V_{Te}^{**} (Pb_{\gamma}^{**})_i + 2\gamma e' \} \rightarrow$$

$$\rightarrow [Pb_{(1-\beta)(1-x)+(1-\gamma)x}^x V_{\beta(1-\delta)(1-x)+\gamma x}^{\prime} V_{\beta\delta(1-x)}^{\prime}]_{Pb} [Te_{(1-\beta\gamma)(1-x)}^x V_{\beta\gamma(1-x)+x}^{**}]_{Te} (Te_{\beta\gamma(1-x)}^x)_i (Pb_{\gamma x}^{**})_i +$$

$$+ (2\beta(1-\gamma) - \beta\delta)(1-x) h^* + 2x e' \quad (13)$$

Рівняння електронейтральності буде мати вигляд:

$$q_n n + q_{V_{Pb}^{//}} [V_{Pb}^{//}] + q_{V_{Pb}^{\prime}} [V_{Pb}^{\prime}] = q_p p + q_{V_{Te}^{**}} [V_{Te}^{**}] + q_{Pb_i^{**}} [Pb_i^{**}], \quad (14)$$

де  $q_n = q_{V_{Pb}^{//}} = q_p = 1$ ,  $q_{V_{Pb}^{\prime}} = q_{V_{Te}^{**}} = q_{Pb_i^{**}} = 2$ .

$$n = 2Ax, \quad p = A(\beta(1-\gamma) - \beta\delta), \quad [V_{Pb}^{//}] = A(\beta(1-\delta)(1-x) + \gamma x), \quad [V_{Pb}^{\prime}] = A\beta\delta(1-x), \quad [V_{Te}^{**}] = A(\beta\gamma(1-x) + x),$$

$$[Pb_i^{**}] = A\gamma x.$$

Холлівська концентрація  $n_H = n - p$ :

$$n_H = A[2x - \beta(1-\gamma) + \beta\delta]. \quad (15)$$

Результати розрахунків концентрації дефектів (N), носіїв заряду (n, p) і холлівської концентрації ( $n_H$ ) наведено на рис. 2-5.

### III. Аналіз результатів

У випадку n-PbTe згідно рис. 2 із збільшенням надстехіометричного Плюмбуму ( $\alpha$ ) зростають значення холлівської концентрації ( $n_H$ ), концентрації вільних носіїв заряду (n) та концентрації таких дефектів, як одно- і двозарядні вакансії Плюмбуму ( $V_{Pb}^{\prime}, V_{Pb}^{//}$ ), міжвузлові атоми Плюмбуму ( $Pb_i^{**}$ ); концентрація двозарядних вакансій Телуру ( $V_{Te}^{**}$ ) змінюється незначно (рис. 2, а). Зі зростанням величини диспропорціювання ( $\delta$ ) збільшується концентрація міжвузлового Плюмбуму, одно- і двозарядних вакансій Плюмбуму; значення холлівської концентрації носіїв заряду; концентрації вільних носіїв струму та вакансій Телуру практично залишається без змін (рис.2, б). Із збільшенням вмісту міжвузлового Плюмбуму ( $\gamma$ ) зростають концентрації одно- і двозарядних вакансій Плюмбуму; зміна холлівської концентрації носіїв заряду, концентрації вільних носіїв струму і вакансій Телуру незначна (рис 2, в). Концентрації міжвузлового Плюмбуму, одно- і двозарядних вакансій Плюмбуму є малі в порівнянні з концентраціями вільних носіїв струму і вакансій Телуру.

Відповідно для р-типу, як видно з рис.3, із зростанням вмісту надстехіометричного Телуру зростають холлівська концентрація носіїв заряду, концентрація вільних носіїв струму та концентрації одно- і двозарядних вакансій Плюмбуму і вакансій Телуру (рис.3, а). Із збільшенням величини диспропорціювання вакансій у катіонній підґратці зменшується холлівська концентрація носіїв заряду

та концентрація вільних носіїв, зростають концентрації однозарядних вакансій Плюмбуму, а концентрації двозарядних вакансій Плюмбуму і Телуру залишаються без змін (рис.3, б). Із зростанням вмісту міжвузлового Телуру зменшуються холлівська концентрація носіїв заряду і концентрація вільних носіїв струму, зростає концентрація однозарядних вакансій Плюмбуму; концентрації двозарядних вакансій Плюмбуму і Телуру змінюються незначно (рис.3, в). Концентрації однозарядних вакансій Плюмбуму і двозарядних вакансій Телуру є незначними в порівнянні з концентраціями вільних носіїв струму і двозарядних вакансій Плюмбуму.

У випадку самолегуювання для n-PbTe графік залежності холлівської концентрації від відхилення від стехіометрії зміщується в бік більших концентрацій Телуру для різних початкових відхилень від стехіометрії (рис. 4, а). Відповідно для р-PbTe графік залежності холлівської концентрації від відхилення від стехіометрії зміщується в бік більших концентрацій Плюмбуму для різних значень початкових відхилень від стехіометрії (рис. 4, б).

При реалізації механізму заміщення і вкорінення Телуру в міжвузля для n-PbTe n-p- перехід зміщується в бік більших концентрацій халькогену.

### Висновки

1. Проведено аналіз робіт, присвячених розгляду дефектної підсистеми у плюмбум телуриді.
2. Запропоновано кристалоквазіхімічні рівняння нестехіометричного n- і р- PbTe із складним спектром точкових дефектів:  $V_{Pb}^{2-}, V_{Pb}^{-}, V_{Te}^{2+}, Pb_i^{2+}; V_{Pb}^{2-}, V_{Pb}^{-}, V_{Te}^{2+}, Te_i^0$  відповідно.
3. На основі кристалоквазіхімічних рівнянь самолегуюваного n-PbTe Телурум і р-PbTe Плюмбумом. зроблено висновок про перерозподіл дефектів як у катіонній, так і у аніонній підґратках.

**Бойчук В.М.** – кандидат хімічних наук;  
**Ткачик О.В.** – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;  
**Туровська Л.В.** – студент;  
**Дикун Н.І.** – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] Абрикосов Н.Х., Шелимова Л.Е. *Полупроводниковые материалы на основе соединений  $A^I B^{VI}$* . Наука, М. 196 с. (1975).
- [2] Ю.Н. Равич, В.А. Ефимова, В.А. Смирнова. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS*. Наука, М. 384 с. (1968).
- [3] Ф. Крегер. *Химия несовершенных кристаллов*. Мир, М. 654 с. (1969).
- [4] Ф.Ф. Сизов. Нестехиометрические дефекты в узкощелевых полупроводниках  $A^{IV}B^{VI}$  // *Неорганические материалы*, **24** (12), сс. 1972-1976 (1988).
- [5] Н. Heinrich. Defects in IV-VI compounds // *Lect. Notes*, **133**, pp. 407-426 (1980).
- [6] А.М. Гаськов, В.П. Зломанов, А.В. Новоселова. Область гомогенности телурида свинца // *Неорганические материалы*, **15** (8), сс. 1476-1478 (1979).
- [7] Д.М. Фрейк, В.В. Прокопів, М.О. Галушак, М.В. Пиц, Г.Д. Матеїк. *Кристалохімія і термодинаміка дефектів у сполуках  $A^{IV}B^{VI}$* . Плай, Івано-Франківськ. 164 с (1999).
- [8] Я.Л. Хариф, И.Х. Аветисов, П.В. Ковтуненко. Физико-химический метод определения растворимости Те в PbTe // *Электронная техника: Материалы*, **2**, сс. 72-74 (1984).
- [9] Я.Л. Хариф, И.Х. Аветисов, П.В. Ковтуненко. Температурная инверсия растворимости в PbTe // *Неорганические материалы*, **22** (8), сс. 1271-1274 (1986).
- [10] В.П. Зломанов, А.М. Гаськов. Проблемы стехиометрии и дефектообразования в материалах электронной техники // *Процессы роста полупроводниковых кристаллов и пленок*. Новосибирск, сс. 182-187 (1988).
- [11] Д.М. Заячук, В.А. Шендеровський. Власні дефекти і електронні процеси в  $A^{IV}B^{VI}$  // *Український фізичний журнал*, **36** (11), сс. 1691-1713 (1991).
- [12] С.С. Лисняк. Кристаллохимическая модель исследований в химии твердого тела // *Неорганические материалы*, **29**(9), сс. 1913-1917 (1992)

V.M. Boychuk, O.V. Tkachyk, L.V. Turovska, N.I. Dykun

## Crystal-Quasichemical Formulas of Not Stoichiometrical Lead Telluride with the Difficult Spectrum of Point Defects and Processes of a Self-Doping

*Physical-technical faculty  
of the 'Vasily Stefanyk' Precarpathian National University,  
57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, e-mail: freik@pu.if.ua*

Crystal-quasichemical formulas for crystals of n- and p-PbTe with the difficult spectrum of point defects in a cationic sublattice are proposed. Mechanisms of a self-doping of n-PbTe by Tellurium and of p-PbTe by Lead are analysed and requirements of embodying of n-p and p-n-transitions accordingly are determined.