

Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів (мол.)

Фазові діаграми рівноваги і квазіхімія власних точкових дефектів кадмій, станум і плюмбум телуридів $CdTe$, $SnTe$, $PbTe$ (огляд)

Фізико-хімічний інститут
Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна, E-mail: freik@pu.if.ua

Зроблено аналіз особливостей фазових діаграм рівноваги бінарних систем $Cd(Sn,Pb)-Te$ та області гомогенності сполук $CdTe$, $SnTe$, $PbTe$. На основі закону діючих мас і квазіхімічних реакцій визначено вид і концентрацію власних точкових дефектів при різних відхиленнях від стехіометрії, встановлено умови реалізації термодинамічних n - p -переходів у кристалах $CdTe$ і $PbTe$ при двотемпературному відпалі.

Ключові слова: кадмій телурид, станум телурид, плюмбум телурид, фазові діаграми, область гомогенності, точкові дефекти, квазіхімія.

Стаття постуила до редакції 12.05.2010; прийнята до друку 15.09.2010

Зміст

Вступ

I. Фазові діаграми рівноваги

1.1. Система $Cd-Te$

1.2. Система $Sn-Te$

1.3. Система $Pb-Te$

II. Квазіхімічні рівняння утворення власних точкових дефектів

2.1. Кадмій телурид

2.2. Станум телурид

2.3. Плюмбум телурид

III. Розрахунок концентрації дефектів

3.1. Кадмій телурид

3.2. Станум телурид

3.3. Плюмбум телурид

IV. Термодинамічний n - p -перехід

4.1. Кадмій телурид

4.2. Плюмбум телурид

V. Розрахунок меж області гомогенності сполук

5.1. Кадмій телурид

5.2. Станум телурид

Висновки

Література

Вступ

Напівпровідникові матеріали сполук II–VI та IV–VI вже на протязі двох століть (XX–XXI) є предметом інтенсивних досліджень як науковців, так

і інженерних працівників. Це пов'язано з особливостями їх властивостей і, у першу чергу, фазовими діаграмами рівноваги [1–3]. Так, зокрема, якщо температурну залежність області гомогенності плюмбум телуриду (IV–VI) можна вважати симетричною, двосторонньою відносно

стехіометричного складу PbTe то станом телуриду (IV–VI) – повністю зміщеною на боці халькогену (Te) [3–6]. Для кадмій телуриду (II–VI) із підвищенням температури характерне її зміщення від металу до халькогену [7]. Відзначені закономірності суттєво впливають на дефектний стан матеріалу і, тому є визначальними при формуванні цілого комплексу структурних, електричних, оптичних, фотоелектричних, люмінесцентних та ряду інших характеристик [8–11].

Практичний сенс сполук (II–VI) і, зокрема CdTe, визначається їх використанням при виготовленні детекторів жорсткого випромінювання, перетворювачів сонячної енергії, елементів телекомунікаційних мереж та низки інших приладів твердотільної електроніки [1,9]. П्लомбум і станом телуриду – базові матеріали для термоелектричних перетворювачів теплової енергії в електричну, що функціонують в інтервалі температур (500–850) K, а також фотоприймальних і випромінювальних структур інфрачервоного діапазону оптичного спектра [6,12].

Особливим фактором, що визначає експлуатаційні характеристики приладових структур є дефекти кристалічної будови матеріалів. Зауважимо, що на даний час недостатньо вивчена природа точкових дефектів у цих матеріалах. Наукова сторона питання потребує належної систематизації експериментальних результатів та їх теоретичного обґрунтування.

Таким чином, проблеми, пов'язані з дослідженням точкових дефектів у кристалах II–VI (CdTe) та IV–VI (SnTe, PbTe) і розробкою фізико-хімічних основ керування їх видом за умов синтезу сполук, вирощування кристалів, відпалів є актуальними. Їх розв'язання може відкрити нові можливості ефективного використання у різних областях науки і техніки. Пропонований у роботі огляд систематизує отримані результати із вище відзначених проблем фізико-хімічного напівпровідникового матеріалознавства сполук кадмій, станом і плумбум телуридів CdTe, SnTe, PbTe.

I. Фазові діаграми рівноваги

1.1. Система Cd-Te. За даними [13] система Cd–Te характеризується наявністю лише однієї хімічної сполуки CdTe, яка відповідає еквімолярному співвідношенню (рис. 1.1,а).

Кадмій телурид алмазоподібний напівпровідник з шириною забороненої зони 1,606 eV (0 K), кристалізується в структурі цинкової обманки (сфалериту) типу ВЗ з тетраедричним координуванням атомів. Просторова група – T_d^2 (F43m), період ґратки складає 0,6481 нм.

Область існування CdTe асиметрична, максимальна температура плавлення сполуки відповідає нестехіометричному складу з надлишком телуру і становить $T_m = 1365$ K (рис. 1.1,б) [14–16].

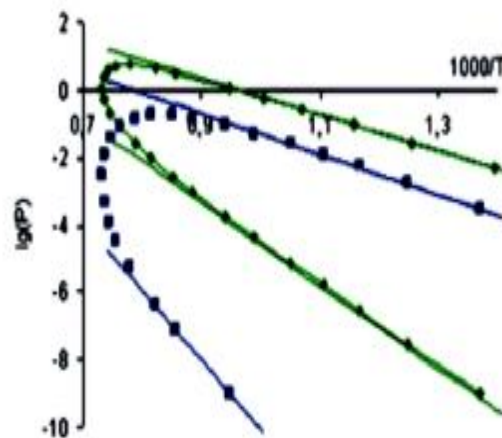
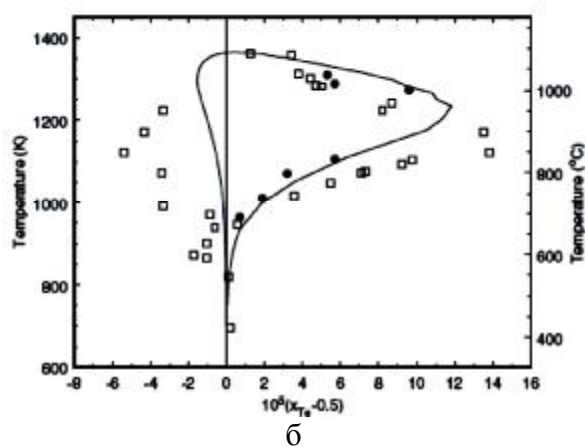
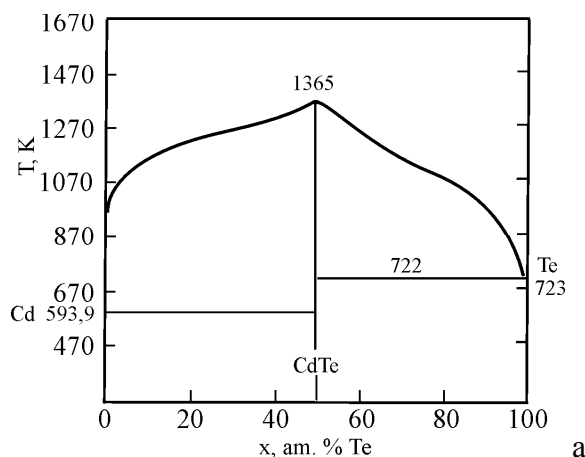


Рис. 1.1. Т-х-проекція фазової діаграми рівноваги системи Cd-Te [13] (а) та Т-х – (б) [14–16] і Р-Т – (в) [16–17] проекції фазових діаграм рівноваги сполуки CdTe.

Стехіометричний CdTe має точку плавлення дещо нижчу, ніж T_m . Для температур менших ніж 1000 К більша частина області гомогенності сполуки лежить на боці надлишку Cd, а для температур вищих 1000 К – зміщується в бік Te (рис. 1.1,б).

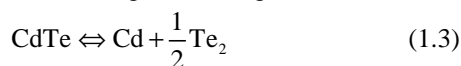
Елементи Cd та Te є відносно легкоплавкими ($T_{пл}(Cd) - 590,9 \text{ К}$, $T_{пл}(Te) - 719 \text{ К}$) [1]. Кадмій в газовій фазі завжди є моноатомним, а телур, при температурах нижчих від температури плавлення, в парі утворює переважно двоатомні молекули. Молекул CdTe у парі виявити не вдалось [1].

Тиски парів компонентів (рис. 1.1,в), згідно [16-17], рівні:

$$\lg P_{Cd}^{\max} = 5,152 - \frac{5342}{T}, \lg P_{Cd}^{\min} = 7,707 - \frac{12297}{T}, \quad (1.1)$$

$$\lg P_{Te_2}^{\max} = 4,7614 - \frac{6034,4}{T}, \lg P_{Te_2}^{\min} = 10,715 - \frac{20802}{T}. \quad (1.2)$$

Парціальні тиски компонентів Cd і Te_2 зв'язані між собою константою рівноваги реакції:



$$K_p = P_{Cd}^2 P_{Te_2}, \text{ або } K_p = P_{Cd} P_{Te_2}^{1/2}. \quad (1.4)$$

Температурні залежності констант рівноваги K за даними різних авторів наведені у табл. 1.1.

Таблиця 1.1

Значення констант рівноваги реакції для парціальних тисків Cd і Te_2 сполуки CdTe

Константа	Числове значення $\lg(K_p)$	Література
$K_p = P_{Cd}^2 P_{Te_2}$	$- 29587/T + 19,047$	[1]
$K_p = P_{Cd} P_{Te_2}^{1/2}$	$- 36202/T + 24,958$	[13]
$K_p = P_{Cd} P_{Te_2}^{1/2}$	$- 15314,2/T + 10,0877$	[16–17]
$K_p = P_{Cd} P_{Te_2}^{1/2}$	$- 34609/T + 22,659$	[18]

Нобель показав [13], що CdTe належить до сполук з помітним відхиленням від стехіометрії, зміна складу в межах області гомогенності обумовлена дефектами ґратки, що визначають тип провідності кристала, рухливість носіїв та їх концентрацію, енергію випромінювальних переходів і інші електричні і оптичні властивості. Ці результати підтверджені фундаментальними дослідженнями, підсумованими у дисертаційних роботах [19–22] та монографіях [8,9].

1.2. Система Sn-Te. Згідно багаточисельних досліджень результати, яких підсумовані у монографії [5] можна стверджувати, що у системі Sn-Te існує одна сполука SnTe що плавиться конгурентно при 1063 К (рис. 1.2,а). Область гомогенності станум телуриду лежить цілком на стороні надлишку телуру відносно стехіометричного складу і має максимальну протяжність від $50,1 \pm 0,1$ до $50,9 \pm 0,1\%$ атомного вмісту телуру при 873 К (рис. 1.2,б)

P-T-проекція P-T-x фазової діаграми є типовою для випадку, коли область гомогенності лежить на стороні надлишку телуру відносно стехіометричного складу. вимірювались в функції від температури і

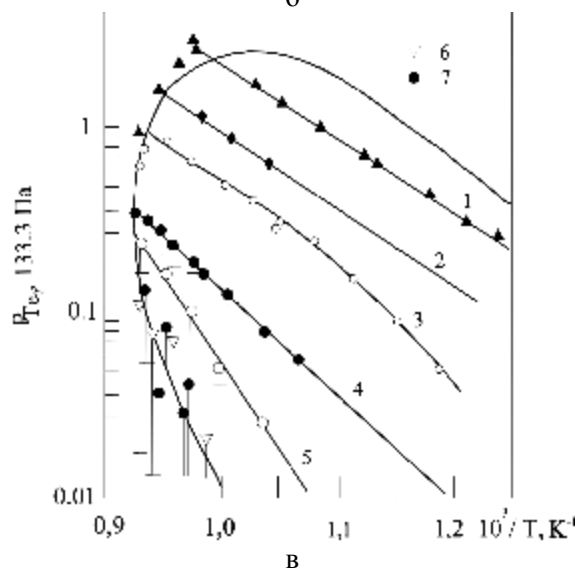
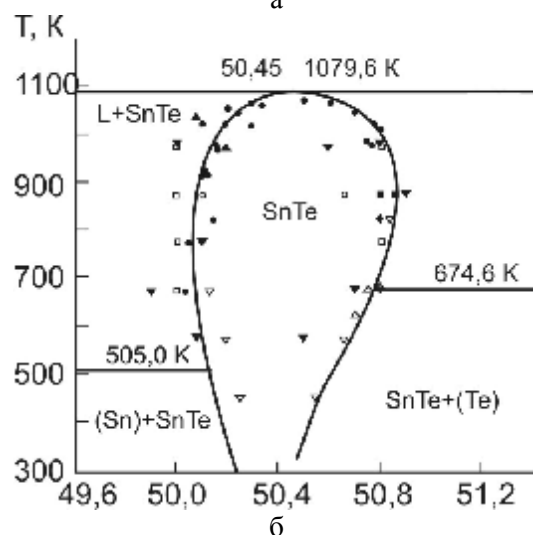
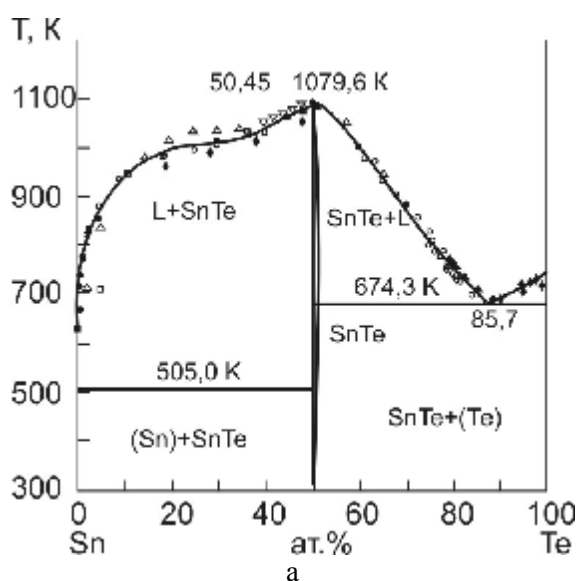


Рис. 1.2. T-x – проекція фазової діаграми рівноваги системи Sn-Te [23] (а) та T-x – (б) і P-T – (в) проекції фазових діаграм рівноваги сполуки SnTe [24] 1 – 50,8 ат.% Te; 2 – 50,7; 3 – 50,6; 4 – 50,5; 5 – 50,4; 6 – 50,3; 7 – 50,2.

складу (рис. 1.2,в) При 1079 К, максимальній точці плавлення SnTe^S , парціальний тиск пари SnTe^V і Te_2^V в рівновазі з твердим станом телуридом дорівнює 115 і 40 Па відповідно. В інтервалі температур 1000–1079 К парціальний тиск SnTe^V не залежить від складу твердої фази SnTe^S . Максимальний парціальний тиск Te_2^V , який може бути досягнений в рівновазі з твердим станом телуридом складає 320 Па і спостерігається між 962 К і 990 К для станом телуриду насиченого телуридом (рис. 1.2,в).

Станом телурид сублимує інконгруентно. Так як пара складається в основному із молекул SnTe і кількість станому, що виділяється при сублимації невелика (менше 0,3 % по масі при сублимації 95% зразка), то сублимацію можна розглядати як квазіконгруентну. Температурну залежність парціальних тисків і констант рівноваг реакцій, що описують сублимацію, представлено в таблицях 1.2 і 1.3.

Таблиця 1.2.

Коефіцієнти рівняння $\lg(P, \text{Па}) = -A \pm \Delta A/T + B \pm \Delta B$ рівноваги $S_{\text{SnTe}+V}$ [25]

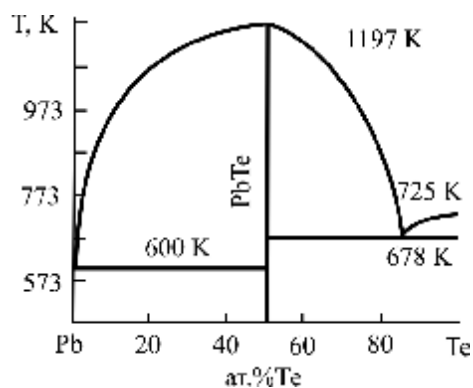
№	Фаза	$A \pm \Delta A$	$B \pm \Delta B$
1	SnTe	11210 ± 260	$12,68 \pm 0,15$
2	Te_2	15450 ± 480	$14,49 \pm 0,50$
3	SnTe_2	152250 ± 580	$14,23 \pm 0,80$
4	Sn_2Te_2	11700 ± 860	$10,52 \pm 0,90$
5	Sn_3Te_3	7940 ± 1630	$4,74 \pm 1,00$
6	$P_{\text{заг}}$	11250 ± 165	$12,73 \pm 0,17$

Таблиця 1.3.

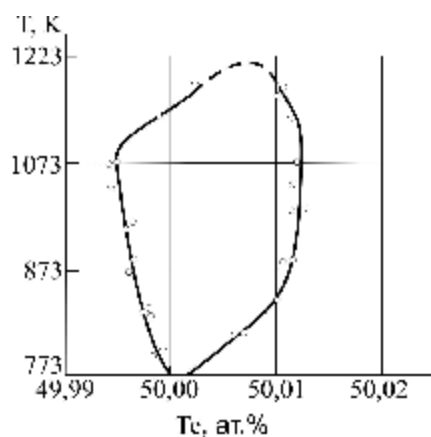
Константи рівноваги $\lg(K, \text{Па}) = -A \pm \Delta A/T + B \pm \Delta B$ у системах станом – телур [25]

Реакція	$A \pm \Delta A$	$B \pm \Delta B$	ΔH_{298}° кДж/ моль
$\text{SnTe}^S = \text{SnTe}^V$	11211 ± 258	$12,68 \pm 0,15$	$53,6 \pm 0,4$
$\text{Sn}_2\text{Te}_2^V = 2\text{SnTe}^V$	10015 ± 347	$14,14 \pm 0,36$	$46,9 \pm 1,4$
$\text{SnTe}_2^V = \text{SnTe}^V + 1/2 \text{Te}_2^V$	3694 ± 216	$8,22 \pm 0,12$	$17,6 \pm 0,1$
$\text{SnTe}^S = \text{SnTe}^S + 1/2 \text{Te}_2^V$	7724 ± 239	$9,75 \pm 0,25$	$34,3 \pm 0,1$
$\text{SnTe}^S = 1/2 \text{Sn}^S + 1/2 \text{SnTe}_2^V$	7626 ± 292	$9,62 \pm 0,82$	$34,8 \pm 0,3$

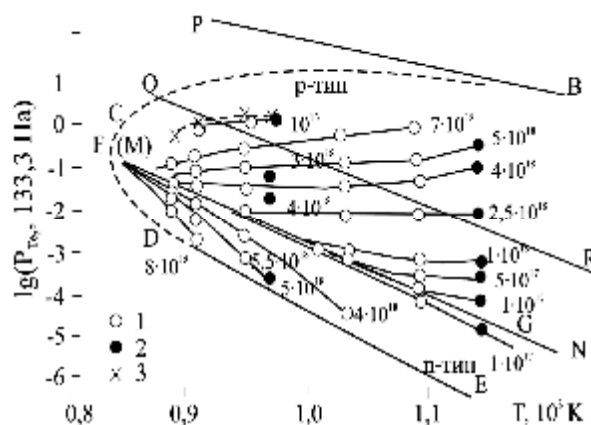
1.3. Система Pb-Te. Аналіз фазової діаграми Pb-Te [26] вказує на наявність однієї сполуки PbTe, яка плавиться конгруентно при температурі 1190 К (рис. 1.3,а). Максимум на кривій ліквідуса не співпадає із стехіометричним складом і знаходиться при 50,002% атомного вмісту Te. Плюмбум телурид



а



б



в

Рис. 1.3. Т-х – проекція фазової діаграми рівноваги системи Pb-Te [26] (а) та Т-х – (б) і Р-Т – (в) проекції фазових діаграм рівноваги сполуки PbTe [25].

утворює з телуrom евтектику при 85,5% атомного вмісту Te з температурою плавлення 678 K (рис. 1.3,а)

Встановлено, що максимальна величина області гомогенності плюмбум телуриду спостерігається при температурі 1133 K і складає $1,3 \cdot 10^{19}$ і $6,3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ для надстехіометричних атомів телуру і плюмбуму відповідно (рис. 1.3,б). Максимальна концентрація вакансій відповідає температурі плавлення ($N_{V_{Pb}} = 8 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $N_{V_{Te}} = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$). Межа області гомогенності насичена плюмбумом, перетинає стехіометричний склад при 1133 K. При загартуванні від температур вище 873 K спостерігається явище мікроосадження надстехіометричного телуру в середині кристала.

Криві однакового відхилення від стехіометрії в сторону телуру і свинцю були одержані шляхом інтерполяції із ізотерм залежності концентрації носіїв струму від парціального тиску пари телуру. Характерним для P-T-діаграм (рис. 1.3,в) є те, що в області високих температур має місце різка залежність складу кристала від парціального тиску пари халькогену. При низьких температурах різниця між рівноважними тисками, які відповідають різним складам більш суттєва. Цей факт широко використовують для одержання кристалів із заданими властивостями шляхом ізотермічного відпалу при заданому тиску пари халькогену (металу).

Парціальні тиски P_{Pb} і P_{Te} , що відповідають конгруентній сублимації плюмбум телуриду, задаються рівняннями [25]

$$\lg(P_{Te}, \text{ Па})_{\min} = -\frac{10940 \pm 350}{T} + 10,26 \pm 0,38, \quad (1.5)$$

$$\lg(P_{Pb}, \text{ Па})_{\min} = -\frac{10940 \pm 350}{T} + 10,56 \pm 0,38. \quad (1.6)$$

Парціальний тиск P_{Te} , що відповідає стехіометричному складу плюмбум телуриду, описується рівнянням [25]

$$\lg(P_{Te}, \text{ Па}) = -\frac{11360 \pm 880}{T} + 10,61 \pm 0,9. \quad (1.7)$$

II. Квазіхімічні рівняння утворення точкових дефектів

2.1. Кадмій телурид. Рівноважний стан власних точкових дефектів кристалів CdTe при їх термічному відпалі у парі кадмію можна описати системою квазіхімічних рівнянь (табл. 2.1). Тут: індекс V – пара; Cd_{Cd} – атоми у вузлі; Cd_i , Te_i – міжвузлові атоми; V_{Cd} , V_{Te} – вакансії кадмію і телуру відповідно; e^- – електрони; h^+ – дірки; -, + – знаки заряду.

У вибраній моделі реакція I описує збудження власної провідності, реакція II – рівновагу “пара кадмію – вакансії телуру”; реакції III і VI – рівновагу “пара кадмію – міжвузлові атоми кадмію і телуру” відповідно; реакція IV-V – рівновагу “пара кадмію – вакансії кадмію”; VII – повне рівняння електронейтральності

Сумісний розв’язок системи рівнянь I-VI (табл. 2.1) дає можливість визначити концентрацію дефектів через константи рівноваги K, парціальний тиск пари кадмію P_{Cd} та концентрацію електронів n:

Таблиця 2.1.

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах кадмій телуриду та їх константи рівноваги $K = K^0 \exp(-\Delta H / kT)$ [27]

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K^0 , (см^{-3} , Па)	ΔH , еВ
I	$0 \Leftrightarrow e^- + h^+$	$K_i = np$	$5 \cdot 10^{39}$	1,50
II	$Cd^V \Leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K_8 = [V_{Te}^{2+}]P_{Cd}^{-1}n^2$	$3 \cdot 10^{57}$	1,47
III	$Cd^V \Leftrightarrow Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K_9 = [Cd_i^{2+}]n^2P_{Cd}^{-1}$	$8 \cdot 10^{60}$	2,09
IV	$Cd_{Cd}^0 + 2e^- \Leftrightarrow V_{Cd}^{2-} + Cd^V$	$K_{10} = [V_{Cd}^{2-}]P_{Cd}n^{-2}$	$1 \cdot 10^{-15}$	1,14
V	$Cd_{Cd}^0 + e^- \Leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd^V$	$K_{11} = [V_{Cd}^-]P_{Cd}n^{-1}$	$8 \cdot 10^6$	2,08
VI	$CdTe + e^- \Leftrightarrow Te_i^- + Cd^V$	$K_{12} = [Te_i^-]P_{Cd}n^{-1}$	395	1,19
VII	$n + [V_{Cd}^-] + 2[V_{Cd}^{2-}] + [Te_i^-] = p + 2[Cd_i^{2+}] + 2[V_{Te}^{2+}]$			

$$[V_{Cd}^-] = K_{11} \cdot n / P_{Cd}; \quad (2.1)$$

$$[V_{Cd}^{2-}] = K_{10} \cdot n^2 / P_{Cd}; \quad (2.2)$$

$$[Te_i^-] = K_{12} \cdot n / P_{Cd}; \quad (2.3)$$

$$[Cd_i^{2+}] = K_9 \cdot P_{Cd} / n^2; \quad (2.4)$$

$$[V_{Te}^{2+}] = K_8 \cdot P_{Cd} / n^2. \quad (2.5)$$

Маючи вирази для концентрації дефектів (2.1)-(2.5) і враховуючи умову повної електронейтральності VII (табл. 2.1), можна записати рівняння для визначення концентрації електронів n:

$$2 \cdot K_{10} \cdot n^4 + (K_{11} + K_{12} + P_{Cd}) \cdot n^3 - K_1 \cdot P_{Cd} \cdot n - 2 \cdot P_{Cd}^2 \cdot (K_8 + K_9) = 0. \quad (2.6)$$

Холлівську концентрацію носіїв струму n_X , що визначають на експерименті, знаходять з умови, що $n_X = n \cdot p$. Оскільки $p = K_i/n$ (табл. 2.1), тоді:

$$n_X = n \cdot K_i/n. \quad (2.7)$$

2.2. Станум телурид. Рівновагу «кристал – пара» при двотемпературному відпалі можна описати за допомогою системи квазіхімічних реакцій, що враховують утворення цілого спектра різних зарядових станів вакансій у катіонній підґратці $V_{Sn}^-, V_{Sn}^{2-}, V_{Sn}^{4-}$ (табл. 2.2)

Реакція (I) описує утворення нейтральних вакансій за механізмом Шоттки, а (II) – нейтральних вакансій стануму при взаємодії з парою халькогену; (III)-(IV) – реакції іонізації утворених вакансій; (V) – реакція збудження власної провідності. Рівняння (VI) – загальна умова електронейтральності кристала.

Рівняння (I)-(VI) дають можливість визначити концентрацію дірок p через константи квазіхімічних реакцій K і парціальний тиск пари телуру P_{Te_2} ($R = K_{Te_2, V} \cdot P_{Te_2}^{1/2}$).

$$Ap^6 + Bp^5 - Cp^3 - Dp^2 + Fp = 0. \quad (2.8)$$

Тут

$$\begin{aligned} A &= 2K'_a \cdot K_S \cdot (K_i \cdot R)^{-1}; \\ B &= 1; \\ C &= K_i + R \cdot K_b; \\ D &= 2K'_b \cdot R; \\ F &= 4K''_b \cdot R. \end{aligned} \quad (2.9)$$

При цьому холлівська концентрація дірок p_X , концентрація електронів n , вакансій стануму $[V_{Sn}^{2-}]$, $[V_{Sn}^{4-}]$ і телуру $[V_{Te}^{2+}]$ будуть рівні:

$$\begin{aligned} p_X &= p - K_i/p, \quad n = K_i/p; \\ [V_{Sn}^{2-}] &= R \cdot K'_b \cdot p^{-2}; \\ [V_{Sn}^{4-}] &= R \cdot K''_b \cdot p^{-4}; \\ [V_{Te}^{2+}] &= K'_a \cdot K_S \cdot p^2 \cdot (R \cdot K_i^2)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Таблиця 2.2.

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах станум телуриду та їх константи рівноваги [28].

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	K^0 , (см ⁻³ , Па)	ΔH , еВ
I	"0" = $V_{Te}^0 + V_{Sn}^0$	$K_S = [V_{Sn}^0] \cdot [V_{Te}^0]$	$1,1 \cdot 10^{48*}$	2,38*
II	$\frac{1}{2} Te_2^V = V_{Sn}^0 + Te_{Te}^0$	$K_{Te_2, V} = [V_{Sn}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$4,0 \cdot 10^{17*}$	-0,38*
III	$V_{Te}^0 = V_{Te}^+ + e^-$	$K_a = [V_{Te}^+] \cdot n / [V_{Te}^0]$	$1,21 \cdot 10^{16} \cdot T^{3/2}$	0,01
IIIa	$V_{Te}^0 = V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 / [V_{Te}^0]$	$1,46 \cdot 10^{32} \cdot T^3$	0,02
IV	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^- + h^+$	$K_b = [V_{Sn}^-] \cdot p / [V_{Sn}^0]$	$1,21 \cdot 10^{16} \cdot T^{3/2}$	0,01
IVa	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Sn}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Sn}^0]$	$1,46 \cdot 10^{32} \cdot T^3$	0,02
IVб	$V_{Sn}^0 = V_{Sn}^{4-} + 4h^+$	$K''_b = [V_{Sn}^{4-}] \cdot p^4 / [V_{Sn}^0]$	$2,14 \cdot 10^{64} \cdot T^6$	0,04
V	"0" = $e^- + h^+$	$K_i = n \cdot p$	$3,66 \cdot 10^{31} \cdot T^3$	0,18
VI	$4[V_{Sn}^{4-}] + 2[V_{Sn}^{2-}] + n = 2[V_{Te}^{2+}] + p$			

* – ефективні значення.

2.3. Плюмбум телурид. Стехіометричний склад плюмбум телуриду можна змінювати, задавши парціальний тиск складових компонентів (плюмбум, телур) над твердою фазою чи температуру в методі двотемпературного відпалу.

Рівновагу «кристал – пара» в цьому випадку можна описати за допомогою системи рівнянь

квазіхімічних реакцій, наведених у табл. 2.3. Тут P_{Te_2} – парціальний тиск пари телуру; e^- – електрони; h^+ – дірки; n і p – концентрації електронів і дірок відповідно; „V” – пара.

Реакція (I) описує утворення нейтральних вакансій та міжвузлових атомів плюмбуму за

механізмом Френкеля, а (V) – нейтральних вакансій плумбуму при взаємодії з парою телуру; (II)-(III) – реакції іонізації утворених дефектів; (IV) – реакція збудження власної провідності. Рівняння (VI) – загальна умова електронейтральності кристала.

Рівняння (I) – (VI) дають можливість визначити концентрацію електронів n через константи рівноваги K та парціальний тиск пари телуру P_{Te_2} .

Отримуємо рівняння 3-го степеня відносно n :

$$An^3 + Bn^2 - C = 0, \quad (2.11)$$

де:

$$A = 2K'_b \cdot R^2,$$

$$B = K_i \cdot R(K_b \cdot R + K_i),$$

$$C = K_i^2(K_a \cdot K_F + K_i \cdot R).$$

Знаючи концентрацію електронів, користуючись

співвідношеннями (1)-(V), можна знайти холлівську концентрацію носіїв заряду n_x , концентрацію дірок p , одно- та двозарядних вакансій плумбуму $[V_{Pb}^-]$, $[V_{Pb}^{2-}]$, одно- та двозарядних міжвузлових атомів плумбуму $[Pb_i^+]$, $[Pb_i^{2+}]$ відповідно:

$$n_x = n - K_i / n; p = K_i / n,$$

$$[V_{Pb}^-] = K_b \cdot R \cdot n \cdot K_i^{-1},$$

$$[Pb_i^+] = K_a K_F R^{-1} n^{-1}, \quad (2.12)$$

$$[Pb_i^{2+}] = K'_a K_F R^{-1} n^{-2},$$

$$[V_{Pb}^{2-}] = K'_b \cdot R \cdot n^2 \cdot K_i^{-2},$$

$$\text{де } R = K_{Te_2, V} P_{Te_2}^{1/2}.$$

Таблиця 2.3.

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах плумбум телуриду та їх константи рівноваги [29]

№ п/п	Рівняння реакцій	Константи рівноваги	K^0 , (см ⁻³ , Па)		ΔH , eB	
			[25]	[29]	[25]	[29]
I	$Pb_{Pb} = Pb_i^0 + V_{Pb}^0$	$K_F = [V_{Pb}^0] \cdot [Pb_i^0]$	$6,40 \cdot 10^{47}$	$4,8 \cdot 10^{48}$	3,07	2,96
II	$Pb_i^0 = Pb_i^+ + e^-$	$K_a = [Pb_i^+] \cdot n / [Pb_i^0]$	$1,10 \cdot 10^{20}$	$1,25 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,14	0,01
IIIa	$Pb_i^0 = Pb_i^{2+} + 2e^-$	$K'_a = [Pb_i^{2+}] \cdot n^2 / [Pb_i^0]$	$1,21 \cdot 10^{40}$	$1,56 \cdot 10^{30} \cdot T^3$	0,28	0,02
III	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^- + h^+$	$K_b = [V_{Pb}^-] \cdot p / [V_{Pb}^0]$	$1,10 \cdot 10^{20}$	$1,83 \cdot 10^{15} \cdot T^{3/2}$	0,14	0,01
IIIa	$V_{Pb}^0 = V_{Pb}^{2-} + 2h^+$	$K'_b = [V_{Pb}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Pb}^0]$	$1,21 \cdot 10^{40}$	$3,35 \cdot 10^{30} \cdot T^3$	0,28	0,02
IV	"0" = $e^- + h^+$	$K_i = n \cdot p$	$3,00 \cdot 10^{39}$	$7,42 \cdot 10^{29} \cdot T^3$	0,52	0,38
V	$\frac{1}{2} Te_2^V = V_{Pb}^0 + Te_{Te}^0$	$K_{Te_2, V} = [V_{Pb}^0] \cdot P_{Te_2}^{-1/2}$	$4,10 \cdot 10^{18}$	$4,0 \cdot 10^{17}$	0,19	0,28
VI	$[V_{Pb}^-] + 2[V_{Pb}^{2-}] + n = [Pb_i^+] + p$					

III. Розрахунок концентрації точкових дефектів

3.1. Кадмій телурид. Результати розрахунку, отримані на основі моделювання дефектоутворення квазіхімічними реакціями (табл. 2.1) і експериментальні дані, наведені на рис. 3.1-3.2. Із графіків видно, що при відпалі кристалів CdTe змінюються не тільки концентрація холлівських носіїв струму, але і тип провідності. При цьому збільшення парціального тиску пари кадмію P_{Cd} (рис. 3.1), як і зниження температури відпалу T (рис. 3.2), зумовлюють топологічно ідентичні зміни.

При низьких значеннях парціального тиску пари кадмію P_{Cd} одержуємо матеріал р-типу провідності. Із збільшенням P_{Cd} спостерігається зменшення концентрації дірок p , інверсія провідності з р- на n-тип (термодинамічний р-n-перехід) і подальше зростання концентрації електронів n (рис. 3.1). Протилежні закономірності характерні при підвищенні температури у методі двотемпературного відпалу (рис. 3.2): зменшення концентрації електронів, інверсію типу провідності з n- на р-тип і подальше зростання концентрації дірок.

3.2. Станум телурид. Встановлено, що у межах області гомогенності з підвищенням температури відпалу холлівська концентрація дірок зменшується (рис. 3.3, крива 1), а зростання парціального тиску

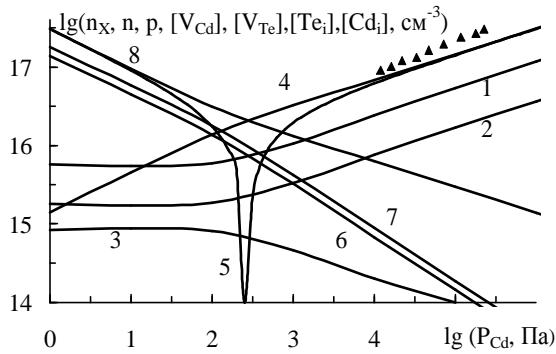


Рис. 3.1. Залежність концентрації носіїв струму і точкових дефектів в CdTe від тиску кадмію P_{Cd} при температурі відпалу $T = 1070$ К:

1 – Cd_i^{2+} ; 2 – V_{Te}^{2+} ; 3 – V_{Cd}^{2-} ; 4 – n; 5 – n_X ; 6 – Te_i^- ; 7 – V_{Cd}^- ; 8 – p, ▲ – експеримент [30] [27]

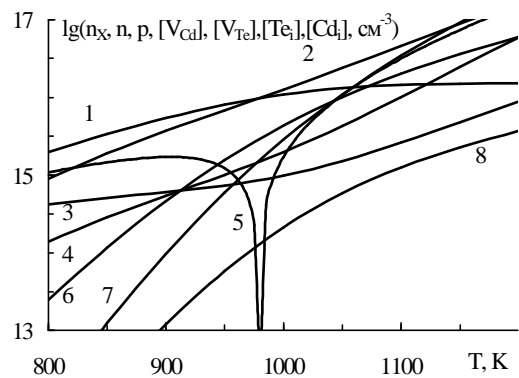


Рис. 3.2. Залежність концентрації носіїв струму і точкових дефектів в CdTe від температури відпалу при тиску кадмію $P_{Cd} = 10^2$ Па

1 – n; 2 – p; 3 – V_{Te}^{2+} ; 4 – Cd_i^{2+} ; 5 – n_X ; 6 – Te_i^- ; 7 – V_{Cd}^- ; 8 – V_{Cd}^{2-} [27].

пари телуру, при незмінній температурі відпалу призводить до зростання концентрації дірок (рис. 3.4, крива 1). При відпалі станум телуриду в умовах, коли матеріал насичується металом чи халькогеном, концентрація дірок визначається межами області гомогенності. Розрахунок концентрації дефектів показав, що у кристалах SnTe вакансії телуру $[V_{Te}^{2+}]$ утворюються у незначних кількостях і концентрація носіїв струму визначається в основному вакансіями стануму. Причому, концентрація $[V_{Sn}^{2-}]$ із збільшенням температури спадає (рис. 3.3, крива 2), а $[V_{Sn}^{4-}]$ зростає (рис. 3.3, крива 3) і при температурах близьких до температури плавлення значення

концентрацій обох типів дефектів вирівнюється. При нижчих температурах переважають двократно заряджені вакансії олова $[V_{Sn}^{2-}]$ (рис. 3.3, крива 2).

Підвищення парціального тиску пари телуру P_{Te_2} при незмінній температурі відпалу, призводить до зростання концентрації дірок (рис. 3.4, крива 1). При цьому зростає концентрація двократно іонізованих вакансій стануму, а концентрація чотирикратно іонізованих вакансій $[V_{Sn}^{4-}]$ спадає (рис. 3.4, крива 2,3).

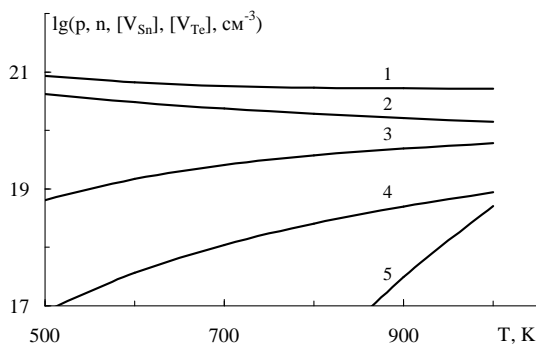


Рис. 3.3. Залежність концентрації дірок p (1), вакансій олова $[V_{Sn}^{2-}]$ (2), $[V_{Sn}^{4-}]$ (3), електронів n (4) та вакансій телуру $[V_{Te}^{2+}]$ (5), від температури відпалу T_B при парціальному тиску пари телуру $P_{Te_2} = 100$ Па [28].

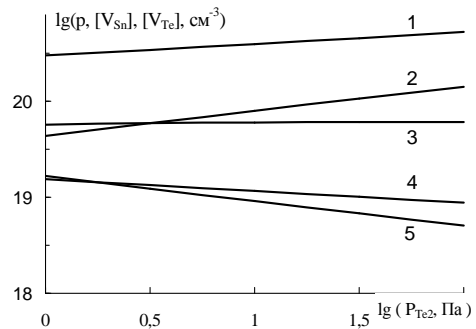


Рис. 3.4. Залежність концентрації дірок p (1), вакансій олова $[V_{Sn}^{2-}]$ (2), $[V_{Sn}^{4-}]$ (3), електронів n (4) та вакансій телуру $[V_{Te}^{2+}]$ (5) від парціального тиску пари телуру P_{Te_2} при температурі відпалу: $T_B = 600$ К [28].

3.3. Плюмбум телурид. Розрахунок концентрації вільних носіїв заряду та іонізованих дефектів показав, що при низьких температурах відпалу переважають двократно іонізовані вакансії плюмбуму V_{Pb}^{2-} (рис. 3.5 – крива 4). З ростом температури зростає концентрація всіх дефектів і найшвидше – Pb_i^+ , що і пояснює температурний хід холлівської концентрації n_H .

Підвищення парціального тиску пари телуру при

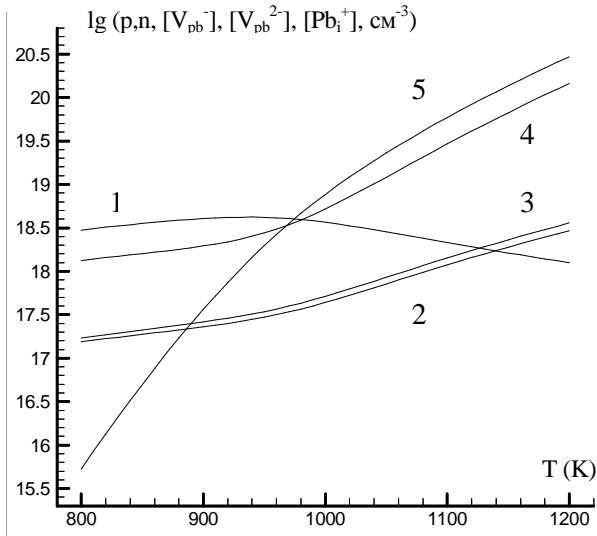


Рис. 3.5. Залежність концентрацій носіїв заряду та іонізованих дефектів для PbTe від температури відпалу при тиску пари телуру $P_{Te_2} = 0,086$ Па:

1 – p, 2 – n, 3 – $[V_{Pb}^-]$, 4 – $[V_{Pb}^{2-}]$, 5 – $[Pb_i^+]$ [29].

незмінній температурі відпалу призводить до росту концентрації дірок (рис. 3.6, крива 1), концентрація електронів в кристалі при цьому зменшується (рис. 3.6, крива 2). Це обумовлено зростанням концентрації одно- та двозарядних вакансій свинцю V_{Pb}^- , V_{Pb}^{2-} (рис. 3.6, криві 3, 4) і зменшенням концентрації міжвузлових атомів свинцю Pb_i^+ (рис. 3.6, крива 5) із збільшенням парціального тиску пари телуру.

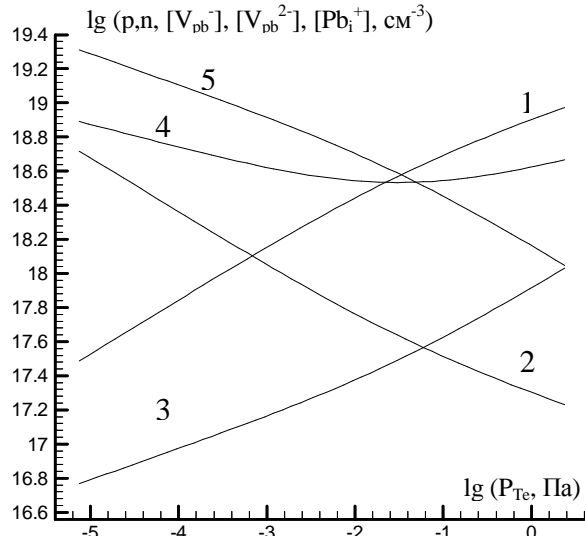


Рис. 3.6. Залежність концентрацій носіїв заряду та іонізованих дефектів для PbTe від тиску пари телуру розрахована теоретично при температурі відпалу T_B 970 К:

1 – p, 2 – n, 3 – $[V_{Pb}^-]$, 4 – $[V_{Pb}^{2-}]$, 5 – $[Pb_i^+]$ [29].

IV. Термодинамічний n-p-перехід

4.1. Кадмій телурид. Маючи на увазі, що термодинамічний n-p-перехід настає за умови $n = p$, з рівняння електронейтральності (табл. 2.1, VII) одержимо вираз для парціального тиску кадмію P_{Cd}^* , що відповідає термодинамічному p-n переходу:

$$P_{Cd}^* = \left(\frac{(K_1)^{3/2} \cdot (K_{11} + K_{12} + 2 \cdot K_{10} \cdot (K_1)^{3/2})}{2 \cdot (K_8 + K_9)} \right)^{1/2}. \quad (4.1)$$

Встановлено, що підвищення температури відпалу T зміщує величину парціального тиску кадмію P_{Cd}^* , що відповідає термодинамічному p-n переходу в бік більш високих значень (рис. 4.1). При цьому, змінити тип провідності матеріалу змінюючи лише температуру відпалу T можна для інтервалу тисків кадмію ($10 - 10^3$) Па. При тисках $P_{Cd} < 10$ Па одержуємо матеріал тільки p-типу, а при $P_{Cd} > 10^3$ Па – тільки n-типу провідності для всього інтервалу температур відпалу $T = (800-1200)$ К (рис. 4.1).

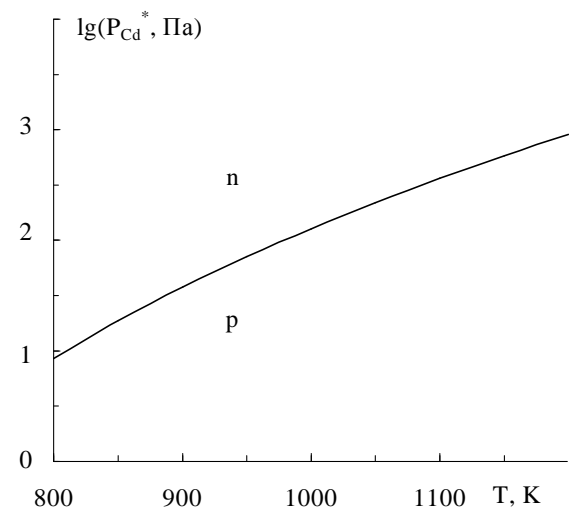


Рис. 4.1 Залежність тиску пари кадмію термодинамічного p-n переходу P_{Cd}^* для CdTe від температури відпалу [27].

4.2. Плибум телурид. Температуру $T_{(n-p)}$ термодинамічного n-p-переходу для PbTe можна знайти за умови, що $n = p$. Тоді, згідно з квазіхімічними рівняннями (табл. 2.3), маємо:

$$T_{(n-p)} = (2 \cdot \Delta H_{X_2, V} - \Delta H_F) / (k \cdot \ln((K_{X_2, V}^0)^2 \cdot P_{X_2} / K_F^0)). \quad (4.2)$$

Із залежності парціального тиску пари телуру P_{Te}^* , що відповідає термодинамічному n-p-переходу від температури відпалу T (рис. 4.2) видно, що матеріал n-типу формується в області $P_{Te}^* = (10^{-2} - 10^{-1})$ Па за умови зміни температури від $T = 670$ К до $T = 1250$ К відповідно. При P_{Te}^* , вищих за відзначені, в інтервалі цих же температур відпалу, кристали PbTe вже мають діркову провідність. Така зміна типу провідності пов'язана із особливостями дефектної підсистеми [4].

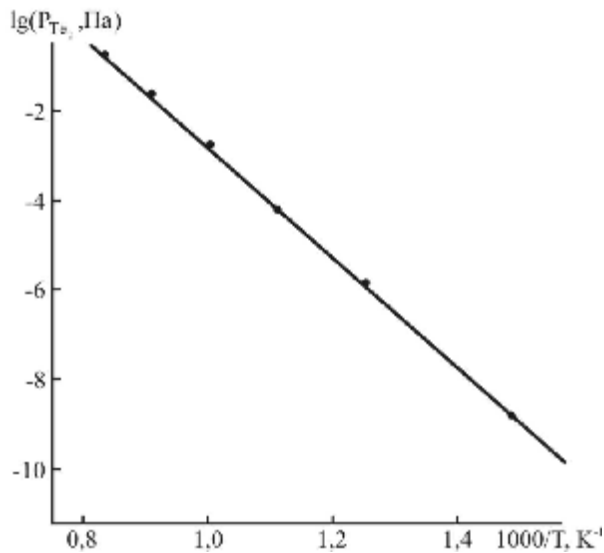


Рис. 4.2. Залежність парціального тиску пари телуру від оберненої температури при p-n-переході ($p = n$) у PbTe. Точки – експеримент [25], [29].

Що стосується стану телуриду, то існування гомогенної сполуки SnTe, повністю зміщеної на боці телуру, не дає можливості реалізувати p-n-перехід.

V. Розрахунок меж області гомогенності сполук

5.1. Кадмій телурид. Використовувані теоретичні моделі дефектної підсистеми дають можливість оцінити межі області існування CdTe при максимальному насиченні кадмієм (рис. 5.1). Величину відхилення від стехіометричного складу CdTe в області надлишку Cd визначали як

$$X_{Cd} = 10^5 \left(\frac{X_{Cd}}{X_{Cd} + X_{Te}} - 0,5 \right), \quad (5.1)$$

де $X_{Cd(Te)} = N + \delta_{Cd(Te)}$, $\delta_{Cd} = [Cd_i] - [V_{Cd}]$, $\delta_{Te} = [Te_i] - [V_{Te}]$, N – кількість вузлів у підгратці кадмію чи телуру в сполуці.

Розраховане відхилення від стехіометрії задовільно узгоджується із експериментально вимірюваним значенням (рис. 5.1). Зауважимо, що максимальне відхилення від стехіометрії становить $\approx 3,5 \cdot 10^5$ ($x_{Cd} = 0,5$) при $T \approx 1300$ К, тоді як експериментально спостережуване складає $\approx 5,5 \cdot 10^5$ ($x_{Cd} = 0,5$) при $T \approx 1100$ К (рис. 5.1). Таке неузгодження теоретичних розрахунків із експериментом пов'язане із неврахуванням у моделях певних типів дефектів, що можуть домінувати в CdTe: Cd, серед яких найбільш ймовірно, є нейтральні.

Моделі квазіхімічних реакцій дефектоутворення і термодинамічних потенціалів з однаковою вірогідністю описують хід температурної залежності концентрації носіїв заряду при максимальному парціальному тиску пари кадмію при відпалі. В той же час відхилення від стехіометрії, визначені за цими моделями, відрізняються. Відсутність у моделі квазіхімічних реакцій дефектоутворення реакцій утворення нейтральних точкових дефектів очевидно і зумовлює менше за величиною розраховане відхилення від стехіометричного складу матеріалу. T, K

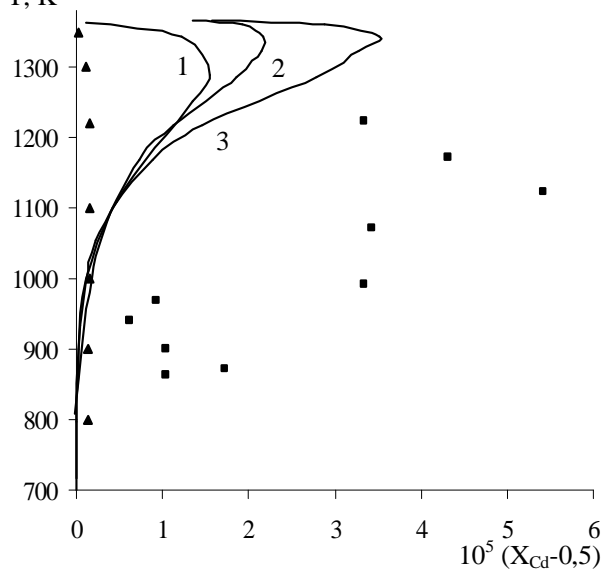


Рис. 5.1. T-x діаграма CdTe: 1 – [31], 2 – квазіхімічний розрахунок [32], 3 – термодинамічний розрахунок [32], ▲ – [33], ■ – [17].

5.2. Стану телурид. В основу розрахунку покладено підхід, який полягає у визначенні меж областей гомогенності як різниці граничних концентрацій термодинамічно рівноважних вакансій різноманітних компонентів сполуки, розрахованої для широкого інтервалу температур:

$$\delta \approx \frac{N_{V_{Te}} - N_{V_{Sn}}}{2} \quad (5.2)$$

де концентрації вакансій телуру і стану мають вигляд:

$$N_{V_{Te}} = \exp \left(\frac{\Delta S_{V_{Te}}}{R} \right) \exp \left(- \frac{\Delta H_{V_{Te}}}{RT} \right) a_{Sn}, \quad (5.3)$$

$$N_{V_{Sn}} = \exp \frac{\Delta S_{V_{Sn}}}{R} \exp \left(- \frac{\Delta H_{V_{Sn}}}{RT} \right) a_{Te}, \quad (5.4)$$

тут $\Delta H_{V_{Te}}$, $\Delta H_{V_{Sn}}$, $\Delta S_{V_{Te}}$, $\Delta S_{V_{Sn}}$ – зміна ентальпії й ентропії при утворенні відповідних вакансій.

За умови, що:

$$\begin{aligned} \Delta H_{V_{Te}} &= 50,3 \text{ кДж (0,52 eV)} \\ \Delta S_{V_{Te}} &= 23,9 \text{ Дж/К} \\ \Delta H_{V_{Sn}} &= 41,5 \text{ кДж (0,43 eV)} \\ \Delta S_{V_{Sn}} &= 23,0 \text{ Дж/К} \end{aligned} \quad (5.5)$$

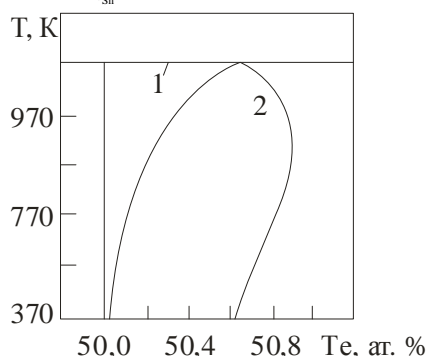


Рис. 5.2. Розраховані межі області гомогенності станум телуриду: 1 – ліквідус, 2 – солідус [34].

Розрахована температурна залежність граничної концентрації вакансій компонент у станум телуриді показана на рис. 5.2, що добре узгоджується експериментом (рис. 1.2, б)

Висновки

1. Зроблено аналіз особливостей фазових діаграм рівноваги бінарних систем Cd(Sn,Pb)-Te, а також областей гомогенності сполук CdTe, SnTe, PbTe.

2. На основі закону діючих мас і квазіхімічних реакцій встановлено залежності концентрації власних точкових дефектів, основних носіїв та холлівської концентрації носіїв струму від температури відпалу та парціального тиску парів компонентів.

3. Встановлено умови реалізації термодинамічних n-p-переходів у кристалах CdTe і PbTe при двотемпературному відпалі.

4. Розраховано межі областей гомогенності сполук CdTe SnTe.

Робота виконується в рамках проєктів МОН України (державні реєстраційні номери 0109U007537, 0107U006768, 0110U000144).

Фреїк Д.М. – заслужений діяч науки і техніки України, доктор хімічних наук, професор, директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;
Прокопів В.В. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла

- [1] С.А. Медведєв. *Фізика і хімія соєдинєний A^{IV}B^{VI}*. Мир, М. 624 с. (1970).
- [2] Ю.И. Равич, В.А. Ефимова, В.А. Смирнова. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS*. Наука, М. 384 с. (1968).
- [3] Н.Х. Абрикосов, Л.Е. Шелимова. *Полупроводниковые материалы на основе соєдинєний A^{IV}B^{VI}*. Наука, М. 196 с. (1975).
- [4] Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, М.О. Галуццак, М.В. Пиц, Г.Д. Матеїк. *Кристалохімія і термодинаміка дефектів у сполуках A^{IV}B^{VI}*. Плай, Івано-Франківськ 164 с. (1999).
- [5] В.М. Шперун, Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів. *Телурид олова. Фізико-хімічні властивості*. Плай, Івано-Франківськ 250 с. (2000).
- [6] В.М. Шперун, Д.М. Фреїк, Р.І. Запужляк. *Термоелектрика телуриду свинцю та його аналогів*. Плай, Івано-Франківськ. 250 с. (2000).
- [7] Ю.М. Иванов, В.А. Лейбов, А.В. Ванюков. Область гомогенности теллурида кадмия // *Рефераты, доклады и сообщения XII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии*. Наука, М. 1. сс. 50–51 (1981).
- [8] Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук, Є.В. Корбут, М.М. Борисик. *Телурид кадмію і домішково-дефектні стани та детекторні властивості*. Іван Федоров, К. 198 с. (2000).
- [9] Д.М. Фреїк, М.О. Галуццак, В.В. Прокопів, І.В. Горічок, Н.Д. Фреїк. *Фізико-хімічні проблеми напівпровідникового матеріалознавства. Том III. Сполуки A^{IV}B^{VI}. Частина I. Кадмій телурид: монографічний збірник*. Видав. Ів.-Франк. нац. техн. ун-ту нафти і газу, Івано-Франківськ. 394 с. (2010).
- [10] Р.Р. Сизов. Твердые растворы халькогенидов свинца и олова и фотоприемники на их основе // *Зарубежная электронная техника*, 2, сс. 31–38 (1977).
- [11] Д.М. Фреїк, В.Ф. Пасічняк, В.В. Бोरйк, Б.С. Дхундза, О.Л. Соколов. *Фізико-хімічні проблеми напівпровідникового матеріалознавства. Том I. Кристали A^{IV}B^{VI}*. Видав.-дизайнерський відділ ЦІТ Прикарпатського національного університету ім. Василя Стефаника, Івано-Франківськ 338 с (2007).
- [12] Н.Н. Берченко, К.И. Гейман, А.В. Матвєенко. Методы получения p-n переходов и барьеров Шоттки в халькогенидах свинца и твердых растворов на их основе // *Зарубежная электронная техника*, 14, сс. 3–70 (1977).
- [13] D. Nobel Phase equilibria and semiconducting properties of cadmium telluride // *Phil. Res. Repts*, 14, pp. 361–399, 4340–432 (1959).

- [14] R. Grill. Point defects and diffusion in cadmium telluride // *Progress in crystal growth and characterization of materials*, **48/49**, pp. 209–244 (2004).
- [15] R. Fang. CdTe I: solidus curve and composition-temperature-tellurium partial pressure data for Te-rich CdTe(s) from optical density measurement // *J. Phys. Chem Solids*, **57**(4), pp. 440–450 (1996).
- [16] J.H. Greenberg Vapor pressure scanning implications of CdTe crystal growth // *Journal of Crystal Growth*, **197**, pp. 406–412 (1999).
- [17] J.H. Greenberg. P-T-X phase equilibrium and vapor pressure scanning of non-stoichiometry in the CdZnTe system. // *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, **47** pp. 196–238 (2003).
- [18] Su Ching-Hua, Yi-Gao Sha, S.L. Lehoczky, Hao-Chieh Liu, R. Fang, R.F. Brebrick Vapor-phase stoichiometry and heat treatment of CdTe starting material for physical vapor transport // *Journal of Crystal Growth*. **183**, pp. 519–524 (1998).
- [19] П.М. Фочук. *Природа точкових дефектів легованого кадмій телуриду: дис... д-ра хім. наук: 02.00.21 / НАН України; Ін-т пробл. матеріалознавства ім. І.М.Францевича. К., (2006).*
- [20] О.О. Коров'яно. *Квазіхімічні реакції між дефектами в CdTe, легованому металами III-A підгрупи: дис... канд. хім. наук: 02.00.21 / НАН України. Ін-т пробл. матеріалознавства ім. І.М. Францевича. К., (2003).*
- [21] У.М. Писклинець. *Механізми дефектоутворення і термодинамічний n-p-перехід у бездомішковому та легованому кадмій телуриді при двотемпературному відпалі: дис... канд. хім. наук: 02.00.21 / Прикарпатський національний ун-т ім. Василя Стефаника. Івано-Франківськ, (2005).*
- [22] І.В. Горічок. *Термодинаміка і кристалохімія точкових дефектів у бездомішкових та легованих галогенами (Cl, Br, I) кристалах кадмій телуриду: дис... канд. хім. наук: 02.00.21 / Прикарпатський національний ун-т ім. Василя Стефаника. Івано-Франківськ, (2010).*
- [23] Хансен М., Андерко К. *Структури двойных сплавов*. М.: Металлургиздат, (1962).
- [24] Brebrick R. F., Strauss A. J. // *J. Chem. Phys*, **41**(1), p. 197 (1964).
- [25] В.П. Зломанов, А.В. Новоселова. *P-T-x-диаграммы состояния системы металл-халькоген*. Наука, М. 207 с. (1987).
- [26] R.P. Elliott. *Constitution of Binary Alloys. First Supplement*. N. Y.: McGraw-Hill Book Co, (1965).
- [27] Фреїк Д.М., Прокопів В.В., Писклинець У.М. Термодинамічний n-p перехід у кристалах телуриду кадмію // *Фізика і хімія твердого тіла*. **3**(1), сс. 58–61 (2002).
- [28] Д.М. Фреїк, В.В. Прокопів, В.В. Борик, Я.І. Дроняк. Кристалохімія власних атомних дефектів у кристалах телуриду олова. *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(4) сс. 543–548 (2001).
- [29] В.В. Прокопів, Л.Й. Межиловська., В.Б. Ваньчук, В.В. Прокопів (мол.) Константи рівноваги квазіхімічних реакцій утворення власних точкових дефектів різного зарядового стану в телуриді свинцю // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(4) сс. 622–627 (2005).
- [30] П.М. Фочук, О.О. Коров'яно, О.Е. Панчук. Розрахунок констант впровадження легуючих елементів в CdTe // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(3), сс. 475–480 (2001).
- [31] R. Grill, A. Zappettini. Point defects and diffusion in cadmium telluride // *Progress in crystal growth and characterization of materials*, **48/49**, pp. 209–244 (2004).
- [32] В.В. Прокопів, І.В. Горічок, У.М. Писклинець. *Собственные точечные дефекты в теллуриде кадмия с избытком кадмия* // *Неорганические материалы*, **45**(10), сс. 1177–1181 (2009).
- [33] Su-Huai Wei and S. B. Zhang. Chemical trends of defect formation and doping limit in II-VI semiconductors: The case of CdTe. // *Phys. Rev. B.*, **66**, pp. 155211-1–155211-10 (2002).
- [34] Акчурин Р.Х., Уфимцев В.Б. Расчет границ области гомогенности теллуридов свинца и олова // *Журн. физ. химии*, **53** (6), сс. 1441–1445 (1979).

D.M. Freik, V.V. Prokopiv (Jr)

Phase Diagrams of Equilibrium and Quazychemistry of Own Point Defects of Cadmium, Tin and Lead Telluride CdTe, SnTe, PbTe (Review)

Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University,
Shevchenko Str., 57, Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua

The analysis of features of phase diagrams of equilibrium of the binary systems of Cd(Sn,Pb)–Te and areas of homogeneity of connections of CdTe, SnTe, PbTe is done. On the basis of law of operating the masses and квазіхімічних reactions certainly kind and concentration of own point defects at different deviations from стехіометрії, the terms of realization of thermodynamics n-p-переходів are set in the crystals of CdTe and PbTe at двотемпературному falling off.

Key words: Cadmium Telluride, Tin Telluride, Lead Telluride, phase diagrams, area of homogeneity, point defects, Quazychemistry.