

УДК 535.3, 535.5

ISSN 1729-4428

А.М. Дмитрів

Точкові дефекти та їх компенсація у меркурій телурид

*Фізико-хімічний інститут при Прикарпатському національному університеті імені Василя Стефаника,
вул. Галицька, 201, Івано-Франківськ, 76000, Україна*

На основі кристалоквазіхімічних рівнянь для HgTe розраховані концентрації точкових дефектів і носіїв струму у граничних межах області гомогенності. Проведено теоретичний розрахунок ізотерм та ізобар концентрації точкових дефектів V_{Hg}^- , V_{Hg}^{2-} , Hg_i^+ , Hg_i^{2+} і запропоновано механізми процесів дефектоутворення у кристалах HgTe при відпалі у широкому діапазоні зміни тисків парів меркурію 10^2 - 10^5 Па при температурах відпалу 523, 673 К. Проаналізовано процеси самокомпенсації дефектів.

Ключові слова: меркурій телурид, кристалоквазіхімія, квазіхімія, дефекти, компенсація.

Стаття постуила до редакції 07.12.2004; прийнята до друку 23.05.2005

I. Вступ

Електричні властивості HgTe у значній мірі визначаються точковими дефектами, пов'язаними із відхиленням від стехіометрії [1, 2]. Відомо [3], що меркурій телурид має провідність n-типу при надлишку меркурію і провідність p-типу при надлишку телуру. Область стабільної гомогенної фази достатньо вузька, але їй відповідає значний діапазон концентрації носіїв струму [3-5]. Максимальна розчинність меркурію спостерігається при температурі 900 К і складає $8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Максимальна розчинність телуру складає $3 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при 850 К. Із зменшенням температури розчинність телуру спадає повільніше ніж розчинність меркурію [3].

Природа точкових дефектів у HgTe носить спірний характер. Зокрема, одержані у роботах [6, 7] результати дозволили зробити висновок, що у меркурій телурид, так як і в кадмій телурид у значній кількості присутні нейтральні точкові дефекти. У роботі [3] визначено, що в області гомогенності меркурій телуриду домінують дефекти Шоттки і поряд з нейтральними вакансіями меркурію вагому роль відіграють і його двократно заряджені вакансії, концентрація яких в області надлишку телуру навіть перевищує концентрацію нейтральних вакансій.

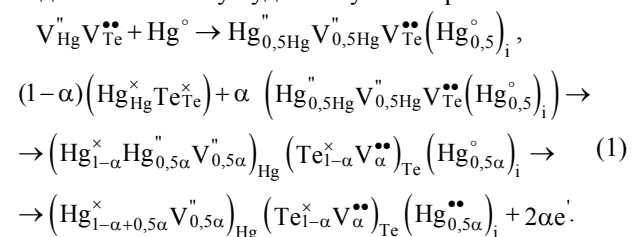
Нами проведено детальний теоретичний розрахунок зміни рівноважної концентрації дефектів і носіїв струму у кристалах HgTe від технологічних факторів при відпалі у парах меркурію. Запропонована методика визначення коефіцієнтів компенсації власних точкових дефектів. На основі аналізу і порівняння результатів експерименту і

розрахунку зроблені висновки про особливості дефектної підсистеми у кристалах HgTe.

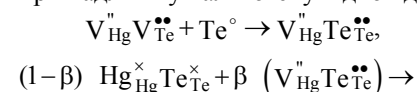
II. Кристалоквазіхімічні рівняння

В основу методу кристалоквазіхімії [8] покладена суперпозиція кристалоквазіхімічної формули досліджуваної матриці $\text{Hg}_{\text{Cd}}^x \text{Te}_{\text{Te}}^x$ із кристалоквазіхімічним складом (кластером). Кристалоквазіхімічний кластер формується шляхом накладання антиструктури меркурій телуриду $V_{\text{Hg}}^+ V_{\text{Te}}^{2-}$, яку утворюють двократно іонізовані негативні та позитивні вакансії меркурію і телуру з кристалохімічним складом доданої речовини. Заряди дефектів у кристалоквазіхімії позначають таким чином: x – нейтральні, \bullet – позитивні, $'$ – негативні, кількість цих знаків відповідає кратності іонізації, e' – концентрація електронів, h^{\bullet} – концентрація дірок.

Тоді нестехіометричний меркурій телурид з надлишком металу буде описуватися рівнянням 1.



При надлишку халькогену відповідно:



$$\begin{aligned} &\rightarrow \left(\text{Hg}_{1-\beta}^{\times} \text{V}_{\beta}^{\prime\prime} \right)_{\text{Hg}} \left(\text{Te}_{1-\beta}^{\times} \text{Te}_{\beta}^{\prime\prime} \right)_{\text{Te}} \rightarrow \\ &\rightarrow \left(\text{Hg}_{1-\beta}^{\times} \text{V}_{\beta}^{\prime\prime} \right)_{\text{Hg}} \text{Te}_{\text{Te}}^{\times} + 2\beta h^{\bullet} \leftrightarrow \quad (2) \\ &\leftrightarrow \left(\text{Hg}_{1-\beta}^{\times} \text{V}_{0,5\beta}^{\prime\prime} \text{V}_{0,5\beta}^{\prime\prime} \right)_{\text{Hg}} \text{Te}_{\text{Te}}^{\times} + 1,5\beta h^{\bullet}. \end{aligned}$$

Де, α і β – відхилення від стехіометрії. При аналізі рівнянь (1), (2) видно, що електронний тип провідності меркурій телуриду пов'язаний із дефектами: $\text{V}_{\text{Te}}^{\bullet\bullet}$ і $\text{Hg}_i^{\bullet\bullet}$, які утворюються за рахунок надлишкового меркурію, а дірковий – із дефектами: $\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime}$, $\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime\prime}$, при надлишку телуру.

Одержані кристалоквазіхімічні рівняння нестехіометричного HgTe (1), (2) дають можливість

Рівняння електронейтральності для p-HgTe згідно рівняння (2):

$$0,5\beta \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime} \right] + 0,5\beta \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime\prime} \right] = p, \quad (5)$$

де $p = 1,5\beta h^{\bullet}$, $n = 0$.

Тоді $n_n = 0,5\beta \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime} \right] + 0,5\beta \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime\prime} \right]$.

Видно (табл. 1), що із зростанням надстехіометричного меркурію має місце значне збільшення вакансій телуру, які і є відповідальними за значення концентрації носіїв струму (n_n). Двозарядний міжвузловий меркурій повністю компенсується вакансіями $\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime\prime}$ (табл. 1). У p-HgTe домінують двозарядні вакансії меркурію (табл. 2).

Таблиця 1

Розраховані концентрації дефектів та носіїв струму у n-HgTe

α , ат. част.	a , нм	$\text{V}_{\text{Te}}^{\bullet\bullet}$, см^{-3}	$\text{Hg}_i^{\bullet\bullet}$, см^{-3}	$\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime}$, см^{-3}	n , см^{-3}	n_n , см^{-3}
0,00007	0,646	$2,07 \cdot 10^{18}$	$1,04 \cdot 10^{18}$	$1,04 \cdot 10^{18}$	$2,07 \cdot 10^{18}$	$2,07 \cdot 10^{18}$
0,003	0,646	$8,90 \cdot 10^{19}$	$4,45 \cdot 10^{19}$	$4,45 \cdot 10^{19}$	$8,90 \cdot 10^{19}$	$8,90 \cdot 10^{19}$

Таблиця 2

Розраховані концентрації дефектів та носіїв струму у p-HgTe

β , ат. част.	a , нм	$\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime}$, см^{-3}	$\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime\prime}$, см^{-3}	p , см^{-3}	n_n , см^{-3}
0,0004	0,646	$2,96 \cdot 10^{18}$	$5,93 \cdot 10^{18}$	$8,90 \cdot 10^{18}$	$8,90 \cdot 10^{18}$
0,005	0,646	$3,71 \cdot 10^{19}$	$7,42 \cdot 10^{19}$	$11,1 \cdot 10^{19}$	$11,1 \cdot 10^{19}$

розрахувати як концентрацію точкових дефектів у катіонній і аніонних підгратках так і вільних носіїв заряду (n , p).

Для визначення концентрації дефектів і носіїв струму у n- і p-HgTe використовували методику запропоновану нами у роботі [9]. Для розрахунку брали граничні значення відхилення від стехіометрії в сторону меркурію: $7 \cdot 10^{-5} \div 3 \cdot 10^{-3}$ ат. част. В температурному інтервалі 700÷900 К з відхиленням в бік телуру: $4 \cdot 10^{-4} \div 5 \cdot 10^{-3}$ ат. част. при температурах 940 ÷ 850 К [3]. Результати розрахунків наведено в табл. 1, 2.

Холлівська концентрація носіїв струму (n_n) визначається різницею концентрацій вільних носіїв – електронів (n) і дірок (p)

$$n_n = n - p. \quad (3)$$

При утворенні n-HgTe рівняння електронейтральності згідно (1) має вигляд:

$$\alpha \left[\text{V}_{\text{Te}}^{\bullet\bullet} \right] + 0,5\alpha \left[\text{Hg}_i^{\bullet\bullet} \right] = 0,5\alpha \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime} \right] + n, \quad (4)$$

де $n = 2\alpha e^{\prime}$, $p = 0$.

Тоді $n_n = \alpha \left[\text{V}_{\text{Te}}^{\bullet\bullet} \right] + 0,5\alpha \left[\text{Hg}_i^{\bullet\bullet} \right] - 0,5\alpha(1-x) \left[\text{V}_{\text{Hg}}^{\prime} \right]$.

III. Кристалохімія і термодинаміка дефектної підсистеми

3.1. Експеримент

Експериментальні залежності концентрації носіїв струму у відпалених кристалах HgTe від парціального тиску меркурію при різних температурах відпалу T показано на рис. 1. Відпал проводили при температурах 523 К і 673 К. Концентрацію носіїв струму визначали при 77 К. Із рис. 1 видно, що в області низьких тисків пари меркурію кристали володіють р-типом провідності. Підвищення парціального тиску пари меркурію P_{Hg} приводить до конверсії типу провідності з р-типу на n-тип і наступного зростання концентрації електронів (рис. 1, праві вітки кривих 1, 2). При підвищенні температури відпалу має місце зростання парціального тиску пари меркурію P_{Hg}^* при якому настає конверсія типу провідності.

3.2. Квазіхімічні рівняння

Рівноважний стан дефектної підсистеми у

Таблиця 3

Квазіхімічні реакції утворення власних точкових дефектів у кристалах меркурій телуриду та їх константи рівноваги $K = K^0 \exp(-\Delta H/kT)$ [3, 10-12]

№ п/п	Рівняння реакції	Константа рівноваги	S/k	K^0 ,	ΔH , eV
I	$0 \Leftrightarrow e^- + h^+$	$K_i = np$	-9,45	$1,7 \cdot 10^{40}$, см^{-6}	0,27
II	$0 \Leftrightarrow V_{\text{Hg}} + V_{\text{Te}}$	$K_S = [V_{\text{Hg}}][V_{\text{Te}}]$	5,69	$6,48 \cdot 10^{46}$, см^{-6}	1,55
III	$V_{\text{Hg}} + \text{Hg}^V \Leftrightarrow \text{Hg}_{\text{Hg}}$	$K_{\text{Hg}} = p_{\text{Hg}}^{-1} [V_{\text{Hg}}]^{-1}$	-15,19	$0,17 \cdot 10^{-28}$, $\text{см}^3 \cdot \text{Па}^{-1}$	-1,57
IV	$\text{Hg}_{\text{Hg}} \Leftrightarrow \text{Hg}^V + V_{\text{Hg}}^{2-} + 2h^+$	$K_{V_{\text{Hg}}}'' = p_{\text{Hg}} [V_{\text{Hg}}^{2-}] p^2$	7,93	$9 \cdot 10^{69}$, $\text{см}^9 \cdot \text{Па}$	2,20
V	$0 \Leftrightarrow \text{Hg}_i^{2+} + V_{\text{Hg}}^{2-}$	$K_S'' = [\text{Hg}_i^{2+}][V_{\text{Hg}}^{2-}]$	-11,04	$3,5 \cdot 10^{33}$, см^{-6}	0,85
VI	$\text{Hg}_{\text{Hg}} \Leftrightarrow \text{Hg}^V + V_{\text{Hg}}^- + h^+$	$K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} = p_{\text{Hg}} [V_{\text{Hg}}^-] p$	-5,14	$1,28 \cdot 10^{52}$, $\text{см}^{-6} \cdot \text{Па}$	1,50
VII	$0 \Leftrightarrow \text{Hg}_i^+ + V_{\text{Hg}}^-$	$K_S^{\prime} = [\text{Hg}_i^+][V_{\text{Hg}}^-]$	-12,52	$8,00 \cdot 10^{38}$, см^{-6}	0,74
VIII	$n + 2[V_{\text{Hg}}^-] + 4[V_{\text{Hg}}^{2-}] = p + [\text{Hg}_i^+] + 2[\text{Hg}_i^{2+}]$				

* – наші дані

кристалах HgTe при їх термічному відпалі у парі меркурію можна описати системою квазіхімічних рівнянь (див. табл. 3). З рівнянь I-VII концентрації точкових дефектів можна виразити через константи рівноваги квазіхімічних реакцій, парціальний тиск пари меркурію та концентрацію електронів:

$$[V_{\text{Te}}] = K_S K_{\text{Hg}} p_{\text{Hg}} \quad (6)$$

$$[V_{\text{Hg}}] = 1/K_{\text{Hg}} p_{\text{Hg}} \quad (7)$$

$$[V_{\text{Hg}}^{2-}] = K_{V_{\text{Hg}}}'' n^2 / p_{\text{Hg}} K_i^2 \quad (8)$$

$$[\text{Hg}_i^{2+}] = K_S'' p_{\text{Hg}} K_i^2 / K_{V_{\text{Hg}}}'' n^2 \quad (9)$$

$$[V_{\text{Hg}}^-] = K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} n / p_{\text{Hg}} K_i \quad (10)$$

$$[\text{Hg}_i^+] = K_S^{\prime} p_{\text{Hg}} K_i / K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} n \quad (11)$$

Через вирази для концентрації дефектів (8)-(11) з врахуванням умови електронейтральності (VIII, табл. 3) концентрація електронів n визначається:

$$An^4 + Fn^3 - Cn - F = 0 \quad (12)$$

Тут

$$A = 4K_{V_{\text{Hg}}}''^2 K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} K_i^2; \quad (13)$$

$$F = K_i K_{V_{\text{Hg}}}'' K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} (K p_{\text{Hg}} + 2K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime});$$

$$C = K_i^3 K_{V_{\text{Hg}}}'' p_{\text{Hg}} (K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} + K_S^{\prime} p_{\text{Hg}});$$

$$N = 2K_i^4 K_S'' p_{\text{Hg}} K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime}.$$

Холлівську концентрацію носіїв струму n_H , яку визначають на експерименті, знаходимо з умови (3).

Маючи на увазі, що $p = K_i / n$. Тоді

$$n_H = n - K_i / n.$$

Тиск пари меркурію p_{Hg}^* , що відповідає термодинамічному p-n переходу можна визначити за умови рівноваги концентрації дірок і електронів ($p = n$):

$$p_{\text{Hg}}^* = \left(\frac{4K_{V_{\text{Hg}}}''^2 K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime} K_i^2 + K_i^{5/2} K_{V_{\text{Hg}}}'' 2K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime 2}}{K_i^{7/2} K_{V_{\text{Hg}}}'' K_S^{\prime} + 2K_i^4 K_S'' K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime}} \right)^{1/2} \quad (14)$$

Використані константи рівноваги відповідають за процеси:

K_i – власної провідності;

K_S – утворення нейтральних дефектів Шоттки;

K_{Hg} – взаємодії нейтральних вакансій меркурію із парою меркурію;

$K_{V_{\text{Hg}}}^{\prime}$, $K_{V_{\text{Hg}}}''$ – однократно- і двократної іонізації вакансій меркурію;

K_S^{\prime} , K_S'' – однократно і двократної іонізації дефектів Френкеля.

3.3. Результати модельних розрахунків

Результати розрахунків, проведені із використанням відомих констант рівноваги і ентальпій утворення дефектів (таблиця 3), наведені на рис. 1-4. Видно, що модель складної дефектної підсистеми добре якісно, а в ряді випадків кількісно описує

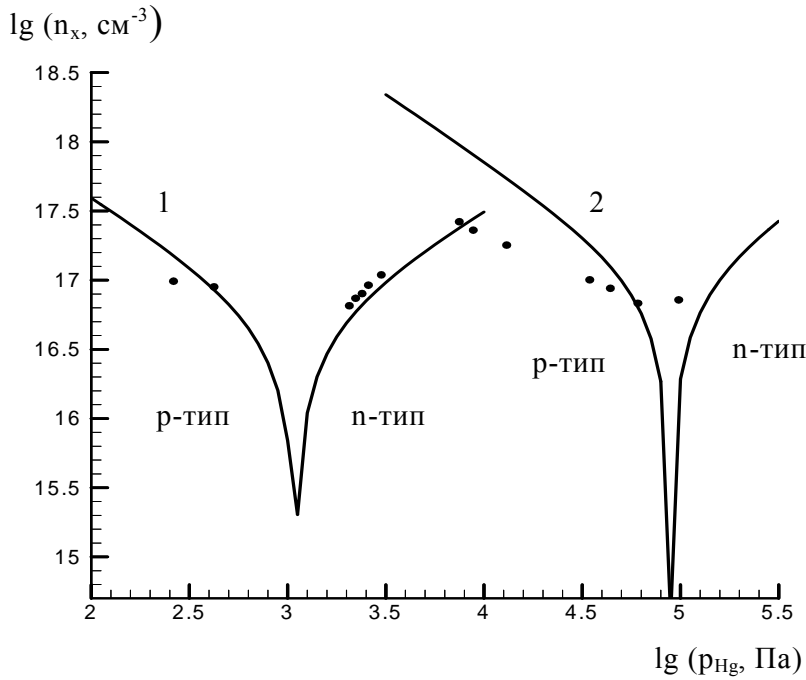


Рис. 1. Залежність холлівської концентрації носіїв струму для HgTe від тиску пари ртуті при температурі відпалу: 1 – 523 К, 2 – 673 К, суцільні лінії – розрахунок, • – експеримент.

баричні залежності концентрації носіїв струму (рис. 1). При збільшенні P_{Hg} має місце зменшення концентрації дірок, конверсія провідності з р- на n-тип і наступне зростання концентрації електронів (рис. 1). Результати теоретичного аналізу вказують на те, що збільшення парціального тиску пари ртуті P_{Hg} (рис. 1, 2, 3), як і зниження температури відпалу T (рис. 3), обумовлюють топологічно ідентичні зміни. При низьких значеннях температури відпалу T одержуємо матеріал n-типу провідності; із підвищенням T спочатку відбувається спадання концентрації електронів n аж до моменту настання p-n-переходу, а потім зростання концентрації дірок p (рис. 3). Враховуючи зарядовий стан власних точкових дефектів (табл. 3), можна стверджувати, що малі парціальні тиски ртуті чи високі температури відпалу сприяють утворенню переважаючих дефектів, пов'язаних із однократно зарядженими вакансіями ртуті V_{Hg}^- і дірок h^+ . Це й зумовлює діркову провідність матеріалу (рис. 2, 3). Значні парціальні тиски ртуті та низькі температури відпалу призводять до інтенсифікації процесів генерації двократно заряджених міжвузлових атомів ртуті Hg_i^{2+} і електронів e^- (рис. 2, 3).

Зауважимо, що температура $T_{(p-n)}$ – термодинамічного p-n-переходу кристалів визначається величиною парціального тиску ртуті P_{Hg} . Вона зростає із збільшенням P_{Hg} (рис. 4). За умов, що визначаються координатами кривої $T_{(p-n)} = T(P_{Hg})$, генеруються в однакових концентраціях як однократно заряджені вакансії

ртуті V_{Hg}^- , так і двократно заряджені атоми ртуті у міжвузлях. При значеннях $T > T_{(p-n)}$ і заданих $P_{Hg} = const$ переважає генерування вакансій ртуті V_{Hg}^- і формування матеріалу р-типу, а при $T < T_{(p-n)}$ – міжвузлових атомів ртуті Hg_i^{2+} і матеріалу n-типу.

IV. Самокомпенсація дефектів

Необхідно відзначити, що при формуванні матеріалу із визначеним типом провідності вагому роль відіграє компенсація власних точкових дефектів кристалічної ґратки. На рис. 5 показано залежність інтегрального коефіцієнта компенсації як відношення сум всіх акцепторних і донорних дефектів у кристалах HgTe при температурі відпалу 523 К, 673 К. Видно, що відносна частка акцепторних дефектів із збільшенням тиску парів ртуті зменшується. При цьому підвищення температури відпалу T обумовлює зміщення границі цього спадання на бік більш високих значень P_{Hg} .

При температурі відпалу $T = 523$ К для низьких тисків пари ртуті $P_{Hg} = 10^2 - 10^{2.5}$ Па переважаючими дефектами є однократно іонізовані вакансії ртуті V_{Hg}^- (рис. 6 – крива 1), а при $P_{Hg} = 10^{3.5} - 10^4$ Па домінуюча роль належить двократно іонізованим міжвузловим атомам ртуті Hg_i^{2+} (рис. 6 – крива 2). Аналогічні залежності коефіцієнтів компенсації власних дефектів у ртутій телуриді

спостерігаються при температурі відпалу 673 К (рис. 7). Однозарядні міжвузлові атоми меркурію Hg_i^+ відіграють менш помітну роль у порівнянні із

іншими точковими дефектами (рис. 6, 7)

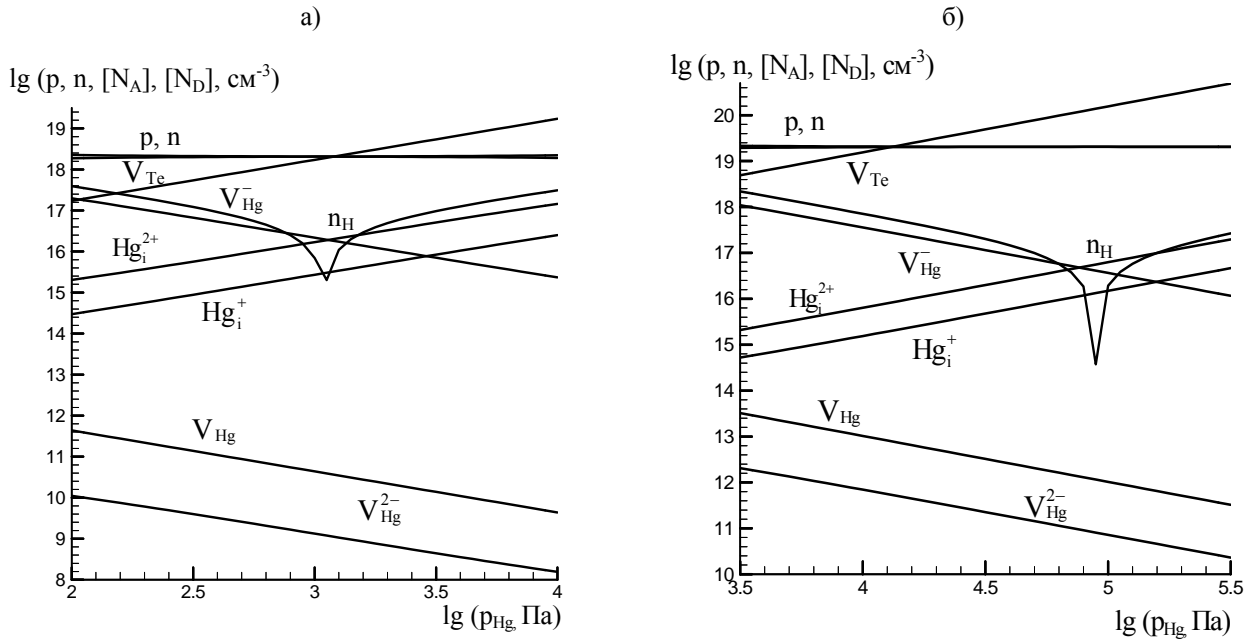


Рис. 2. Залежності концентрації носіїв струму (n_H) і точкових дефектів ($[N_A], [N_D]$) у HgTe від тиску пари меркурію p_{Hg} при температурі відпалу T, K : а – 523, б – 673.

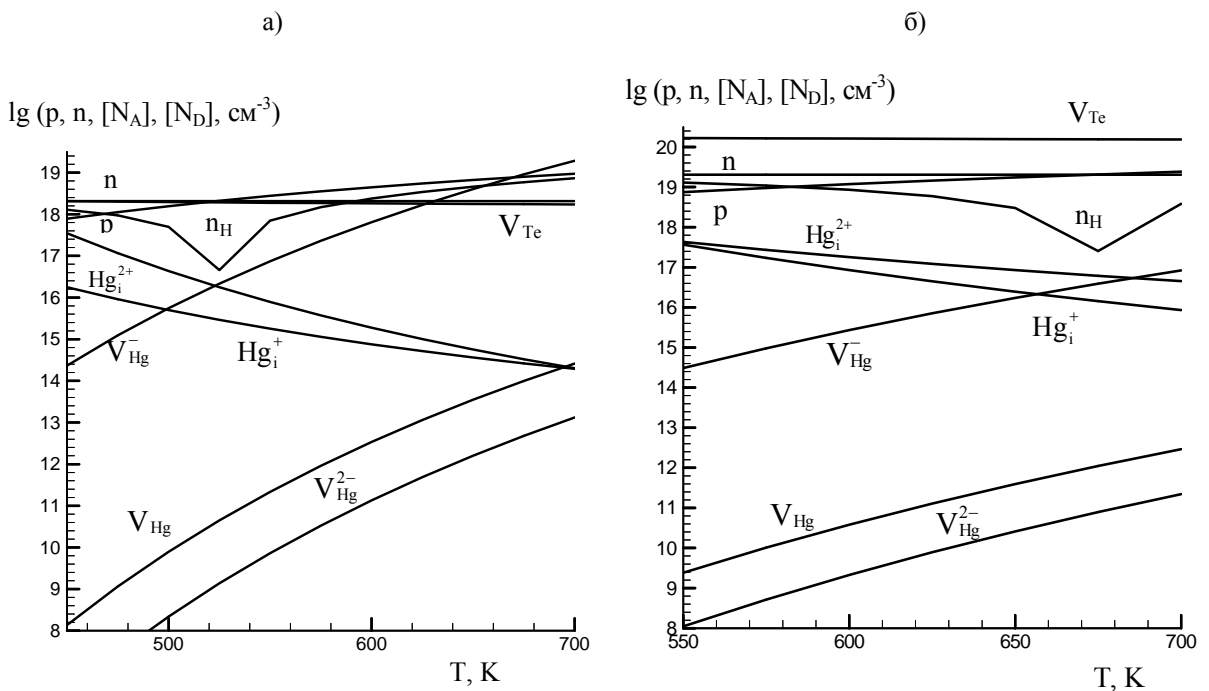


Рис. 3. Залежності концентрації носіїв струму (n_H) і точкових дефектів ($[N_A], [N_D]$) у HgTe від температури відпалу при тиску пари меркурію $p_{Hg}, \text{Па}$: а – 10^3 , б – 10^5 .

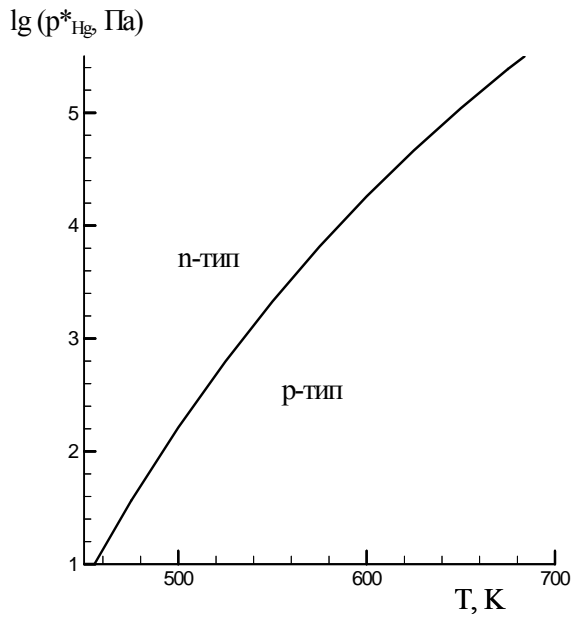


Рис. 4. Залежність тиску пари ртуті від температури відпалу. Термодинамічний р-п-перехід p_{Hg}^* .

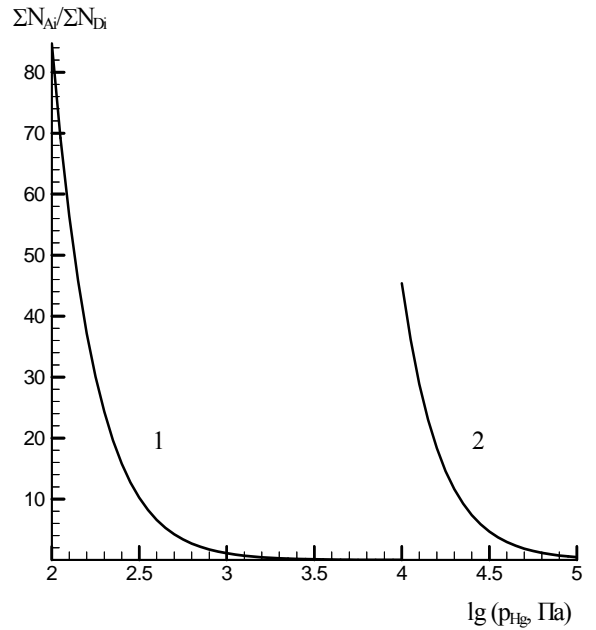


Рис. 5. Залежність інтегрального коефіцієнта компенсації власних дефектів у кристалах HgTe від тиску пари ртуті при температурі відпалу T, К: 1 – 523 К, 2 – 673.

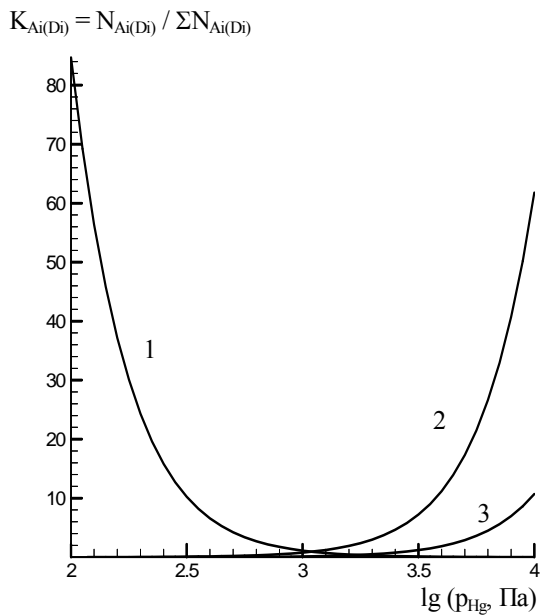


Рис. 6. Залежність парціальних коефіцієнтів компенсації дефектів у кристалах HgTe від тиску пари ртуті при температурі відпалу T = 523 К: 1 – V_{Hg}^- , 2 – Hg_i^{2+} , 3 – Hg_i^+ .

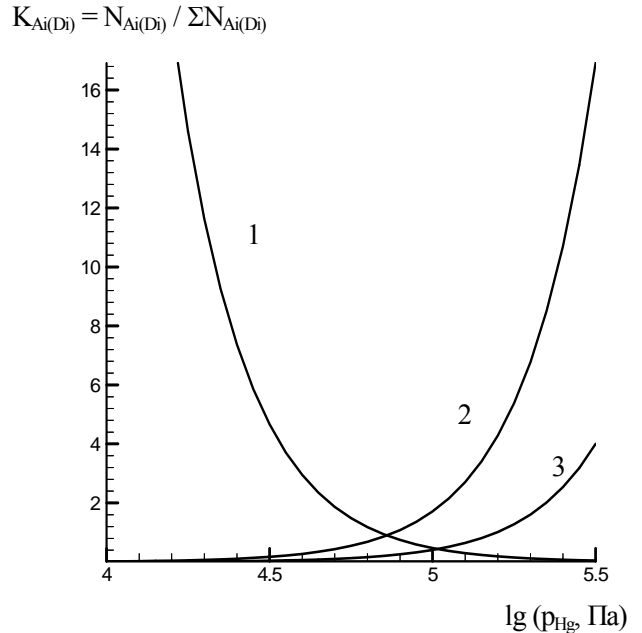


Рис. 7. Залежність парціальних коефіцієнтів компенсації дефектів у кристалах HgTe від тиску пари ртуті при температурі відпалу T = 673 К: 1 – V_{Hg}^- , 2 – Hg_i^{2+} , 3 – Hg_i^+ .

V. Висновки

1. На основі запропонованих кристалоквазіхімічних рівнянь утворення дефектів у n- і р- HgTe встановлено що в межах області гомогенності привелюючими дефектами є вакансії телуру $V_{Te}^{\bullet\bullet}$ і міжвузлові атоми меркурію $Hg_i^{\bullet\bullet}$ – для матеріалу n-типу, та вакансії меркурію V_{Hg}' , V_{Hg}'' – для матеріалу р-типу.
2. Показано, що експериментальні залежності концентрації носіїв струму кристалів HgTe від парціального тиску пари меркурію і температури відпалу у методі двотемпературного відпалу можна пояснити складною дефектною підсистемою із одно- і двозарядною іонізацією дефектів Френкеля у металевій підґратці.
3. На основі теоретичних розрахунків ізотерм та ізобар концентрації носіїв струму і дефектів V_{Hg}^- , V_{Hg}^{2-} , Hg_i^+ , Hg_i^{2+} зроблено висновки про механізм процесів дефектоутворення у кристалах HgTe.
4. Знайдено аналітичний вираз для обчислення парціального тиску пари меркурію при термодинамічному р-n-переході P_{Hg}^* .
5. Для визначення переважаючих дефектів при реалізації їх значного спектру запропоновано використовувати інтегральні, парціальні коефіцієнти компенсації.
6. Показано, що для кристалів HgTe при температурі відпалу $T = 523$ К для тисків $P_{Hg} = 10^2$ - 10^3 Па домінують однократно іонізовані вакансії меркурію V_{Hg}' , а при $P_{Hg} = 10^3$ - 10^4 Па – двократно іонізовані міжвузлові атоми меркурію $Hg_i^{\bullet\bullet}$. Аналогічні залежності характерні для кристалів відпалених при температурі 673 К.

Автор висловлює свою вдячність науковому керівнику проф. Фреїку Д.М., за постановку задач дослідження, значну допомогу при виконанні роботи, написанні статті та надані консультації.

Дмитрів А.М. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] *Физика и химия соединений A²B⁶* / Перев. Под ред. С.А. Медведева. Мир, М. (1970).
- [2] *Полупроводниковые соединения, их получение и свойства*. Наука, М., 176 с. (1967).
- [3] В.М. Глазов, Л.М. Павлова. Границы насыщения твердых растворов компонентов в теллуриде ртути // *Неорганические материалы*, **30**(5), сс. 635-638 (1994).
- [4] H. Widemeier, C.L. Chang. The Pressure-Temperature Phase Diagram of the HgTe System from Dynamic Mass Loss Measurement // *J. Less-Common Met.*, **137**(1/2), pp. 375-378 (1988).
- [5] R.F. Brebrick, A.J. Strauss. Vapor-Crystal Equilibrium and Deviation from Stoichiometry in HgTe System // *J. Phys. Chem. Solids*, **26**(10), pp. 989-996 (1965).
- [6] H. Widemeier, C.L. Chang. The Pressure-Temperature Phase Diagram of the HgTe System from Dynamic Mass Loss Measurement // *J. Less-Common Met.*, **137**(1/2), pp. 375-378 (1988).
- [7] R.F. Brebrick, A.J. Strauss. Vapor-Crystal Equilibrium and Deviation from Stoichiometry in HgTe System // *J. Phys. Chem. Solids*, **26**(10), pp. 989-996 (1965).
- [8] С.С. Лисняк. Кристаллоквазіхіміческая модель исследований в химии твердого тела // *Изв. АН СССР. Неорганические материалы*, **29**(9), сс. 1913-1917 (1992).
- [9] Л.Й. Межиловська, А.М. Дмитрів, Д.М. Фреїк, П.В. Жуковскі. Точкові дефекти твердого розчину $Cd_xHg_{1-x}Te$ // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(4), сс. 792-798 (2004).
- [10] Ю. Родо. *Исследование фазового равновесия в теллуриде ртути* // Полупроводники с узкой запрещенной зоной и их применение. Мир, М., 19-33 с. (1969).
- [11] Ю. Родо. *Исследование термодинамического равновесия в теллуриде ртути* // Полупроводники с узкой запрещенной зоной и их применение. Мир, М., 34-42 с. (1969).
- [12] H.R. Vydynath. Lattice Defects in Semiconducting HgCdTe Alloys // *J. Electrochem. Soc.*, **128**(12), pp. 2609-2618 (1981).

А.М. Дмитрів

A. Dmytriv

Point defects and their compensation in mercury telluride

*'Vasyl Stefanyk' Prekarpathian University,
201, Galytska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua*

On the basis of crystal-quasi-chemical equalizations for HgTe the expected concentrations of point defects and transmitters of current in the maximum scopes of region of homogeneity. The theoretical calculation of isotherms and isobars of concentration of point defects is conducted V_{Hg}^{2-} , Hg_i^+ , Hg_i^{2+} and the mechanisms of processes of defect formed are offered in crystals HgTe at annealing in the wide range of change of mercury presser vapour 10^2 - 10^5 Pa at the temperatures of annealing 523, 673 K. Analyses processes of self-compensation of defects