

Д.М. Фреїк¹, В.В. Прокопів¹, І.В. Горічок¹, У.М. Писклинець²

Термодинамічний розрахунок констант рівноваги квазіхімічних реакцій утворення власних точкових дефектів у CdTe

¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, e-mail: goritchok@rambler.ru

²Івано-Франківський державний медичний університет, вул. Галицька, 2, Івано-Франківськ, 76000, Україна

Проведено теоретичний розрахунок констант рівноваги квазіхімічних реакцій утворення точкових дефектів у CdTe, за допомогою яких знайдені залежності концентрацій електронів, дірок і точкових дефектів у нелегованому кадмій телуриді від параметрів двотемпературного відпалу в парі кадмію. Встановлено технологічні умови, при яких відбувається зміна домінуючого типу вільних носіїв заряду в матеріалі. Проаналізовано моделі структури точкових дефектів.

Ключові слова: константи рівноваги, точкові дефекти, кадмій телурид.

Стаття поступила до редакції 11.02.2008; прийнята до друку 15.06.2008.

Вступ

Вивчення природи точкових дефектів, керування їх типом і концентрацією, дослідження впливу дефектів на зміну типу провідності, їх зв'язку з технологічними факторами є основним напрямком матеріалознавства кадмій телуриду.

Кристали CdTe, вирощені методом Бріджмена, як правило, мають дірковий тип провідності. Для одержання n-CdTe проводять двотемпературний відпал у парі кадмію або легування донорною домішкою. При цьому, важливою проблемою є встановлення технологічних умов (парціального тиску пари компонентів, температури відпалу), при яких змінюється тип провідності матеріалу, оскільки оптимальними електричними властивостями володіють кристали, одержані саме в області інверсії типу провідності. Проведення високотемпературних вимірювань електричних параметрів CdTe при значеннях парціального тиску пари кадмію, що відповідають термодинамічному p-n-переходу, зумовлено значними труднощами внаслідок інтенсивної сублимації матеріалу. Тому важливим є проведення комп'ютерного моделювання дефектної підсистеми кадмій телуриду для дослідження області одержання високоомного нелегованого матеріалу.

На даний час використовують три основні підходи розрахунку параметрів точкових дефектів матеріалу. Один із них полягає у розв'язку квантово-механічної задачі, об'єктом розгляду якої є гратка з точковим дефектом. Розраховують енергетичні характеристики, які характеризують утворення цього дефекту, зокрема енергію утворення. Точні

обчислення вдається провести тільки для найпростіших молекул, а для складних систем необхідно проводити додаткові спрощення, вибір яких суттєво впливає на остаточний результат розрахунку. Для практичного використання розроблені напівемпіричні методи, в яких ряд параметрів системи не розраховують, а використовують відомі емпіричні величини та залежності. Одним з таких методів є розширений метод Хюкеля, який використовують для розрахунку ентальпії утворення вакансій у елементарних напівпровідниках IV групи [1], напівпровідникових сполуках $A^{III}B^V$ [2] та $A^{II}B^{VI}$ [3].

Два інших підходи базуються на використанні феноменологічних параметрів, які визначаються шляхом зіставлення теоретичних виразів з експериментом. Перший з них ґрунтується на мінімізації вільної енергії дефектного кристала, а другий – на застосуванні закону діючих мас до квазіхімічних реакцій дефектоутворення у твердому тілі.

Метод мінімізації вільної енергії кристалу [4] застосовується для аналізу дефектної системи кристала, що не взаємодіє із зовнішнім середовищем. Це робить неможливим його застосування для опису процесів дефектоутворення у системі кристал-газ, зокрема при двотемпературному відпалі.

Для прогнозування електрофізичних властивостей матеріалу здебільшого використовують метод квазіхімічних реакцій дефектоутворення [5]. Основною перешкодою на шляху такого моделювання спектра дефектів є неточність емпірично визначених констант рівноваги

квазіхімічних реакцій дефектоутворення, що призводить до неоднозначностей при інтерпретації експериментальних даних. Крім того, метод квазіхімічних реакцій дефектоутворення має і інші недоліки, зокрема, при введенні в систему додаткового дефекту, необхідно збільшити кількість рівнянь і задачу фактично розв'язати заново. Опираючись на закон діючих мас цей метод практично використовує тільки кулонівську взаємодію, що дещо обмежує його застосування при аналізі асоціативних центрів.

Різними авторами наводяться результати розрахунку дефектної підсистеми кадмій телуриду, які доповнюють, інколи й суперечать, або навіть взаємовиключають один одного.

У даній роботі досліджено природу точкових дефектів в області р-п-переходу методом квазіхімічних реакцій дефектоутворення з використанням не емпірично визначених, а теоретично розрахованих констант рівноваги реакцій дефектоутворення. Проведено порівняльний аналіз отриманих результатів із літературними даними.

I. Термодинамічний потенціал кристала

Ефективне формування дефектного стану матеріалу відбувається в умовах високотемпературного відпалу. Рівноважний стан дефектів у CdTe при їх відпалі в парі кадмію описано квазіхімічними реакціями (табл.).

Для визначення констант рівноваги утворення точкових дефектів із газової фази виходили з умови рівноваги у гетерогенній системі при заданих тиску P і температурі T. Такою умовою є рівність хімічних потенціалів кожного компоненту в всіх фазах системи:

$$\mu_i^s = \mu_i^g, \quad (1)$$

або

$$dG_i^s / dN_i^s = dG_i^g / dN_i^g, \quad (2)$$

де G^s , N^s , G^g , N^g – термодинамічні потенціали Гібса і концентрації частинок у кристалі та газі відповідно, і – Cd, Te.

Енергія Гібса кристала

$$G = G_0 + \sum E_i [D] + nE_C - pE_V - T(S_n + S_p + S_k), \quad (3)$$

де G_0 – частина потенціалу, що не залежить від концентрації дефектів, E_i – енергія утворення дефекту, $[D]$ – концентрації дефекту D, n та p – концентрації електронів та дірок, E_C , E_V – енергії дна зони провідності та верху валентної зони, S_k – конфігураційна ентропія, S_n та S_p – ентропії електронів у зоні провідності та дірок у валентній зоні відповідно.

Сумування ведеться по всіх підгратках і всіх дефектах у підгратці. Енергії однократно та двократно йонізованих дефектів визначаються за формулами:

$$E_1 = E - \frac{Z}{|Z|} \epsilon_1 + F_{vib}; \quad E_2 = E - \frac{Z}{|Z|} (\epsilon_1 + \epsilon_2) + F_{vib}, \quad (4)$$

де E – енергія утворення нейтрального дефекту, Z – зарядовий стан дефекту, ϵ_1 , ϵ_2 – перший та другий рівні йонізації утвореного дефекту, F_{vib} – вільна коливна енергія дефекту.

Ентропію визначали за законом Больцмана:

$$S_k = k \ln(\prod W_j) = \sum k \ln(W_j) = \sum S_j, \quad (5)$$

де W_j – термодинамічна ймовірність j-ї підгратки. Для підгратки з кількома різними видами дефектів:

$$W_j = \frac{J!}{(J - \sum [D])! \prod [D]!}, \quad (6)$$

де J – концентрація вузлів у яких може утворитися дефект.

Для електронів та дірок термодинамічні ймовірності дорівнюють:

$$W_n = \frac{N_C!}{(N_C - n)! n!}, \quad W_p = \frac{N_V!}{(N_V - p)! p!}, \quad (7)$$

де

$$n = N_C e^{\frac{\mu}{kT}}, \quad p = N_V e^{\frac{\mu + E_g}{kT}}, \quad (8)$$

N_C , N_V – густини станів у зоні провідності та у валентній зоні відповідно, E_g – ширина забороненої зони, μ – хімічний потенціал електронів, який відраховували від дна зони провідності, і визначали з рівняння електронейтральності:

$$N_C e^{\frac{\mu}{kT}} - N_V e^{\frac{\mu + E_g}{kT}} = \sum Z \cdot [D^Z], \quad (9)$$

Сумування ведеться тільки по йонізованих дефектах. Тоді:

$$\mu = kT \times \ln \left[\frac{\sum Z [D] + \sqrt{(\sum Z [D])^2 + 4 N_C N_V \exp(-\frac{E_g}{kT})}}{2 N_C} \right] \quad (10)$$

Хімічний потенціал дефекту, що дорівнює хімічному потенціалу компоненту взятому з знаком «+» або «-» в залежності від типу дефекту, визначали шляхом диференціювання енергії Гібса по концентрації дефектів.

$$\begin{aligned} \mu_{D_i}^s = & E_i - kT \ln \left(\frac{J - \sum [D]}{[D_i]} \right) + \\ & + \left[n \left(\frac{E_C}{kT} - \ln \left(\frac{N_C - n}{n} \right) \right) + p \left(\frac{E_V}{kT} + \ln \left(\frac{N_V - p}{p} \right) \right) \right] \times \\ & \times \frac{kT \cdot Z_i}{\sqrt{(\sum Z [D])^2 + 4 N_C N_V \exp(-E_g / kT)}} \end{aligned} \quad (11)$$

Хімічний потенціал газу [7]:

$$\mu^g = kT \ln P + \mu_0. \quad (12)$$

Для одноатомного газу Cd:

$$\mu_0^{Cd} = kT (-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^{3/2})). \quad (13)$$

Квазіхімічні реакції дефектоутворення, константи рівноваги реакцій та концентрації точкових дефектів у CdTe

Рівняння реакції	Константа рівноваги	Числове значення константи рівноваги $K=K_0 \exp(-H/kT)$		Концентрація дефекту
		K_0	H, eВ	
$0 \Leftrightarrow e^- + h^+$	$K_i = np = N_c N_v \exp(-E_g/kT)$	$8,5 T^3 \cdot 10^{31}$ $3 \cdot 10^{40}$ [6] $2,52 \cdot 10^{42}$ [10]	1,6 1,6[6] 1,96[10]	
$Cd^V \Leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^+ + e^-$	$K'_{Cd,V} = [V_{Te}^+] n P_{Cd}^{-1} = J N_c \exp((\mu_0^{Cd} - E_i - \Delta G)/kT)$	$0,60 T^{0,75} \cdot 10^{31}$ $8,04 \cdot 10^{40}$ [10]	0,13 1,73[10]	$[V_{Te}^+] = K'_{Cd,V} P_{Cd} n^{-1} = (J N_c P_{Cd} \exp((\mu_0^{Cd} - E_i - \Delta G)/kT))^{1/2}$
$Cd^V \Leftrightarrow Cd_{Cd}^0 + V_{Te}^{2+} + 2e^-$	$K''_{Cd,V} = [V_{Te}^{2+}] n^2 P_{Cd}^{-1} = J N_c^2 \exp((\mu_0^{Cd} - E_i - \Delta G)/kT)$	$0,38 T^{2,25} \cdot 10^{46}$ $3 \cdot 10^{57}$ [6] $9,36 \cdot 10^{59}$ [10]	0,48 1,30[6] 2,35[10]	$[V_{Te}^{2+}] = K''_{Cd,V} P_{Cd} n^{-2} = (1/4 J N_c^2 P_{Cd} \exp((\mu_0^{Cd} - E_i - \Delta G)/kT))^{1/3}$
$Cd^V \Leftrightarrow Cd_i^+ + e^-$	$K'_{Cd,i} = [Cd_i^+] n P_{Cd}^{-1} = J N_c \exp((\mu_0^{Cd} - E_i)/kT)$	$0,29 T^2 \cdot 10^{38}$ $8,22 \cdot 10^{42}$ [10]	2,10 1,89[10]	$[Cd_i^+] = K'_{Cd,i} P_{Cd} n^{-1} = (J N_c P_{Cd} \exp((\mu_0^{Cd} - E_i)/kT))^{1/2}$
$Cd^V \Leftrightarrow Cd_i^{2+} + 2e^-$	$K''_{Cd,i} = [Cd_i^{2+}] n^2 P_{Cd}^{-1} = J N_c^2 \exp((\mu_0^{Cd} - E_i)/kT)$	$0,99 T^{3,5} \cdot 10^{52}$ $7 \cdot 10^{63}$ [6] $9,57 \cdot 10^{61}$ [10]	2,24 2,5[6] 2,21[10]	$[Cd_i^{2+}] = K''_{Cd,i} P_{Cd} n^{-2} = (1/4 J N_c^2 P_{Cd} \exp((\mu_0^{Cd} - E_i)/kT))^{1/3}$
$Cd_{Cd}^0 + e^- \Leftrightarrow V_{Cd}^- + Cd^V$	$K'_{Cd} = [V_{Cd}^-] n^{-1} P_{Cd} = J N_v K_i^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i)/kT)$	$0,36 T^{-2} \cdot 10^7$ $8 \cdot 10^5$ [6] $1,07 \cdot 10^9$ [10]	1,08 2,08[6] 2,34[10]	$[V_{Cd}^-] = K'_{Cd} n P_{Cd}^{-1} = (J N_v P_{Cd}^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i)/kT))^{1/2}$
$Cd_{Cd}^0 + 2e^- \Leftrightarrow V_{Cd}^{2-} + Cd^V$	$K''_{Cd} = [V_{Cd}^{2-}] n^{-2} P_{Cd} = J N_v^2 K_i^{-2} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i)/kT)$	$0,66 T^{-3,5} \cdot 10^{-9}$ $2 \cdot 10^{-15}$ [6] $3,44 \cdot 10^{-14}$ [10]	0,26 1,28[6] 0,893[10]	$[V_{Cd}^{2-}] = K''_{Cd} n^2 P_{Cd}^{-1} = (1/4 J N_v^2 P_{Cd}^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i)/kT))^{1/3}$
$CdTe + e^- \Leftrightarrow Te_i^- + Cd^V$	$K'_{Te,i} = [Te_i^-] n^{-1} P_{Cd} = J N_v K_i^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i + \Delta G)/kT)$	$0,13 T^{-0,75} \cdot 10^{22}$ $9,17 \cdot 10^{-3}$ [10]	5,04 0,427[10]	$[Te_i^-] = K'_{Te,i} n P_{Cd}^{-1} = (J N_v P_{Cd}^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i + \Delta G)/kT))^{1/2}$
$CdTe + 2e^- \Leftrightarrow Te_i^{2-} + Cd^V$	$K''_{Te,i} = [Te_i^{2-}] n^{-2} P_{Cd} = J N_v^2 K_i^{-2} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i + \Delta G)/kT)$	$0,1 T^{-2,25} \cdot 10^6$ $2,93 \cdot 10^{-25}$ [10]	4,00 0,815[10]	$[Te_i^{2-}] = K''_{Te,i} n^2 P_{Cd}^{-1} = (1/4 J N_v^2 P_{Cd}^{-1} \exp((- \mu_0^{Cd} - E_i + \Delta G)/kT))^{1/3}$

Тут індекс V – пара; Cd_{Cd} – атоми кадмію у вузлі; Cd_i, Te_i – міжвузлові атоми кадмію і телуру; V_{Cd}, V_{Te} – вакансії в обох підгратках відповідно; e⁻ – електрони; h⁺ – дірки; -, + – знаки заряду.

Для двоатомного газу Te_2

$$\mu_0^{Te} = kT(-\ln(kT) + \ln(h^3 / (2\pi mkT)^2)) + \ln(h^2 / 8\pi^2 IkT) + \ln(hv / kT) \quad (14)$$

m – маса атома або молекули, $I = ml^2$ – момент інерції молекули, l – відстань між ядрами молекули, ν – внутрішня частота коливань молекули.

Таким чином, ми отримали систему рівнянь для знаходження рівноважної концентрації дефектів:

$$\pm \mu_{D_i}^s = \mu_i^g \quad (15)$$

$$n + [V_{Cd}^-] + 2[V_{Cd}^{2-}] + [Te_i^-] + 2[Te_i^{2-}] = p + [Cd_i^+] + 2[Cd_i^{2+}] + [V_{Te}^+] + 2[V_{Te}^{2+}], \quad (17)$$

отримано рівняння для визначення концентрації носіїв n через константи рівноваги квазіхімічних реакцій та парціальний тиск пари кадмію P_{Cd} :

$$2 \cdot (K_{Cd}'' + K_{Te_i}'') \cdot n^4 + (K_{Cd}' + K_{Te_i}' + P_{Cd}) \cdot n^3 - P_{Cd} \cdot (K_i + K_{Cd,v}' P_{Cd} + K_{Cd_i}' P_{Cd}) \cdot n - 2 \cdot P_{Cd}^2 \cdot (K_{Cd,v}'' + K_{Cd_i}'') = 0 \quad (18)$$

II. Обговорення результатів

Числові значення констант рівноваги квазіхімічних реакцій дефектоутворення розраховані за виведеними формулами наведено у таблиці. На рис. 1, 2. представлено обчислені на основі уточнених значень констант концентрації електронів, дірок і точкових дефектів у CdTe. Спостерігається

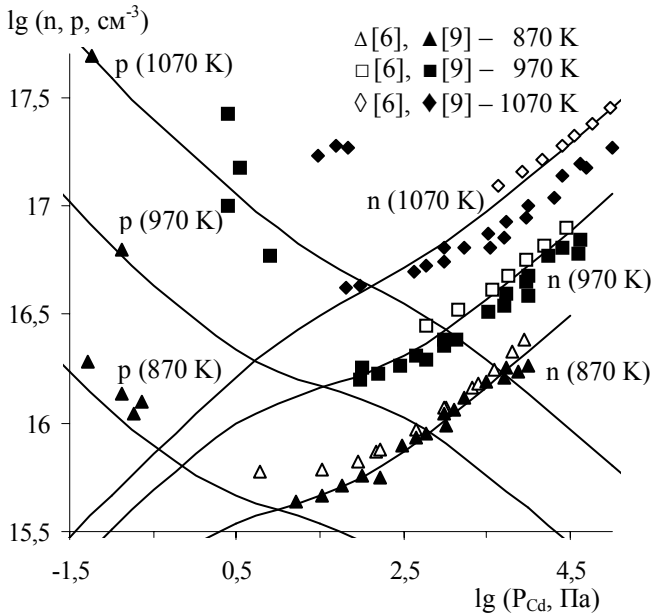


Рис.1 . Залежність концентрацій електронів n і дірок p від парціального тиску пари кадмію в CdTe при різних температурах відпалу.

Якщо власна концентрація носіїв заряду значно менша від концентрації носіїв, утворених в результаті йонізації дефектів

$$Z[D] \gg n_i, \quad (16)$$

та домінуючим є один тип дефектів, то умова рівноваги (15) спроститься і з неї можна вивести аналітичні вирази для концентрацій власних дефектів та констант рівноваги реакцій їх утворення (табл.).

Враховуючи умову електронейтральності

добра кореляція розрахункових кривих із експериментальними точками (рис. 1). При низьких значеннях парціального тиску пари кадмію P_{Cd} одержуємо матеріал p -типу провідності. Із збільшенням P_{Cd} спостерігається зменшення концентрації дірок p , інверсія провідності з p - на n -тип (термодинамічний p - n -перехід) і подальше зростання концентрації електронів n . Підвищення

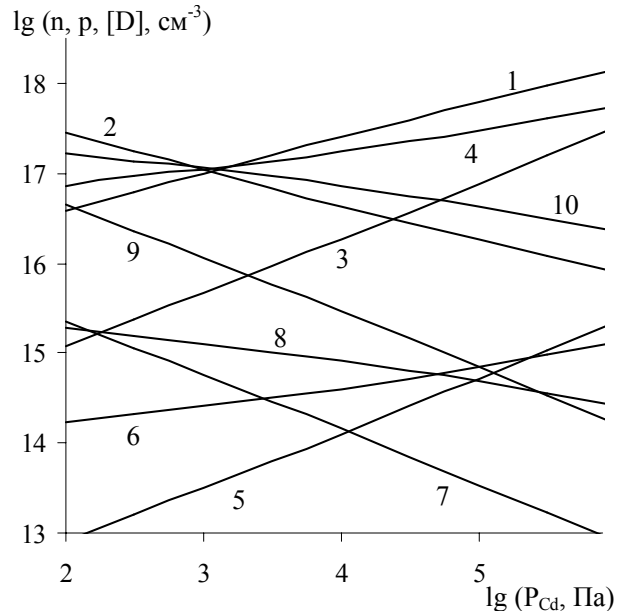


Рис.2 . Залежність концентрацій електронів, дірок і власних точкових дефектів від парціального тиску пари кадмію при температурі відпалу $T = 1170$ К в CdTe: 1 – n , 2 – p , 3 – Cd_i^+ , 4 – Cd_i^{2+} , 5 – V_{Te}^+ , 6 – V_{Te}^{2+} , 7 – V_{Cd}^- , 8 – V_{Cd}^{2-} , 9 – Te_i^- , 10 – Te_i^{2-} .

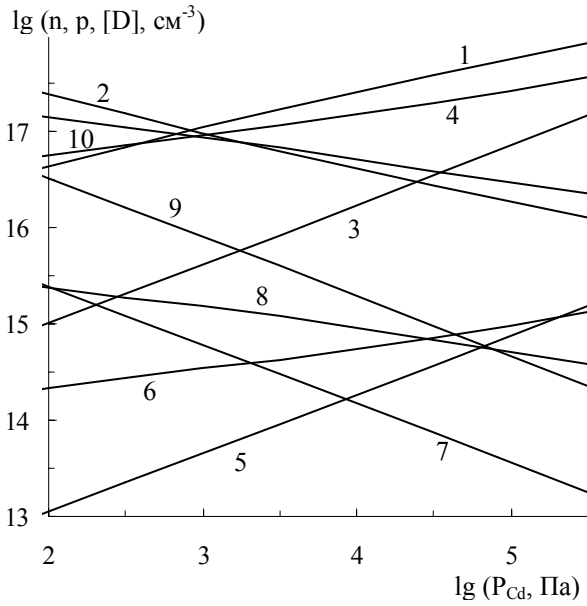


Рис. 3. Залежність концентрацій електронів, дірок і власних точкових дефектів від парціального тиску пари кадмію при температурі відпалу $T = 1170$ К в CdTe [8]: 1 – n , 2 – p , 3 – Cd_i^+ , 4 – Cd_i^{2+} , 5 – V_{Te}^+ , 6 – $\text{V}_{\text{Te}}^{2+}$, 7 – V_{Cd}^- , 8 – $\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}$, 9 – Te_i^- , 10 – Te_i^{2-} .

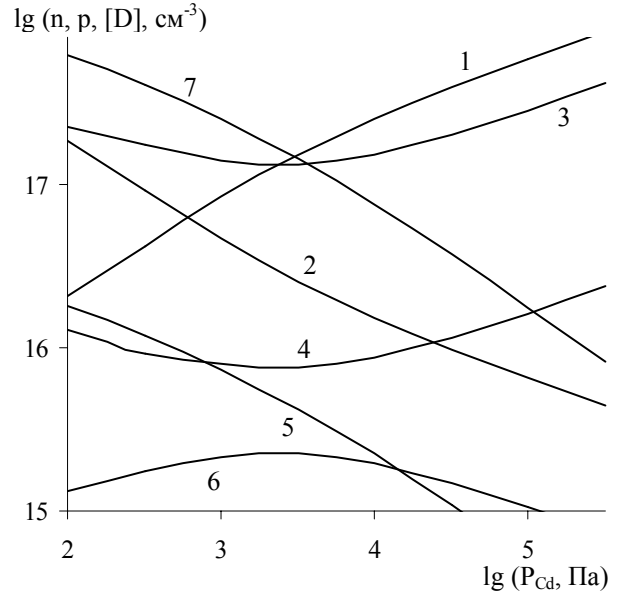


Рис. 4. Залежність концентрацій електронів, дірок і власних точкових дефектів від парціального тиску пари кадмію при температурі відпалу $T = 1170$ К в CdTe [11]: 1 – n , 2 – p , 3 – Cd_i^{2+} , 4 – $\text{V}_{\text{Te}}^{2+}$, 5 – V_{Cd}^- , 6 – $\text{V}_{\text{Cd}}^{2-}$, 7 – Te_i^- .

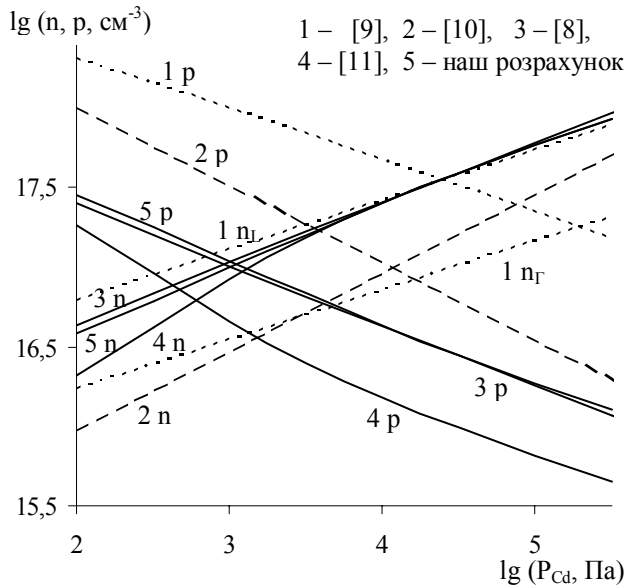


Рис. 5. Залежність концентрацій електронів і дірок від парціального тиску пари кадмію при температурі відпалу $T = 1170$ К в CdTe.

температури відпалу T зміщує значення парціального тиску пари кадмію, що відповідає термодинамічному р-п-переходу в сторону більш високих значень. Такий характер залежності концентрацій носіїв заряду від парціального тиску пари кадмію зумовлений некомпенсованими власними точковими дефектами кристалічної ґратки: вакансіями металу чи халькогену та міжвузловими атомами (рис. 2).

Домінуючим донорним дефектом у матеріалі п-типу, згідно з результатами наших розрахунків, є двократно заряджений міжвузловий атом кадмію

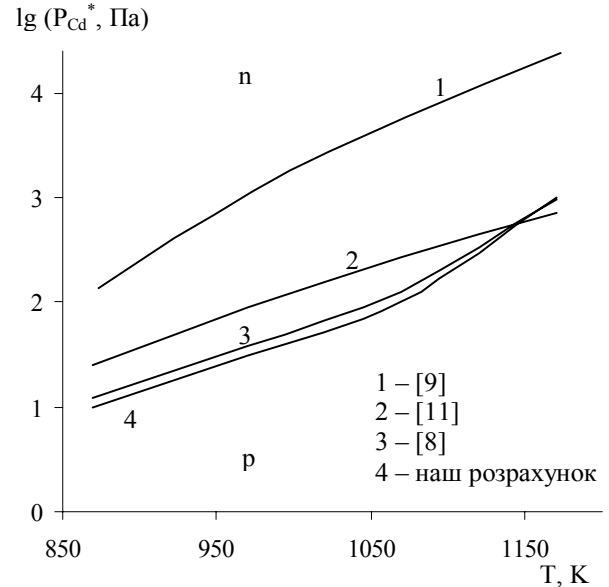


Рис. 6. Залежність тиску пари кадмію термодинамічного р-п переходу P_{Cd}^* від температури відпалу.

Cd_i^{2+} при температурах $T > 870$ К та двократно йонізована вакансія кадмію $\text{V}_{\text{Te}}^{2+}$ при $T < 870$ К, що співпадає з результатами отриманими при розрахунку методом термодинамічних потенціалів [8], та з використанням констант запропонованих в [6]. В матеріалі р-типу при високих температурах домінуючим акцепторним дефектом, згідно з нашими розрахунками, є Te_i^{2-} . Такий результат отримано у [8], та при моделюванні з використанням констант з [6] (рис. 2–4).

При певних відмінностях у структурі точкових

дефектів, розрахованій за визначеними нами константами (рис. 2) та емпіричними константами, запропонованими у [6] (рис. 4), концентрації носіїв в матеріалі n-типу в цих моделях однакові (рис. 5).

Близькість отриманих результатів у даній роботі з використанням методів квазіхімічних реакцій дефектоутворення та в [8] з використанням методу термодинамічних потенціалів (рис. 5) свідчить про те, що вибрані нами параметри точкових дефектів (енергії утворення та іонізації), а також зроблені деякі спрощення не є чисто модельними, а в дійсності відповідають характеристикам точкових дефектів.

Отримана нами залежність тиску пари кадмію термодинамічного p-n переходу P_{Cd}^* від температури відпалу T найкраще узгоджується з розрахунковою залежністю отриманою у [8]. Згідно з результатами наших розрахунків, зміна типу провідності матеріалу в розглянутому діапазоні температур відпалу відбувається при нижчих значеннях тисків пари кадмію, у порівнянні з результатами робіт [9] та [11]. Особливо великі відмінності між нашими розрахунками та [9].

Висновки

1. Методом термодинамічних потенціалів знайдено аналітичні вирази для визначення констант рівноваги квазіхімічних реакцій утворення 8 типів

точкових дефектів у CdTe: V_{Cd} , V_{Te} , Cd_i , Te_i , кожен з яких може знаходитись у однократно або двократно зарядженому стані.

2. На основі уточнених значень констант рівноваги побудовані баричні залежності концентрації електронів, дірок і точкових дефектів у CdTe.
3. Добра кореляція розрахункових кривих концентрації електронів і дірок із експериментальними точками підтверджує прийнятність вибраної моделі точкових дефектів та правильність методики розрахунку числових значень констант рівноваги.
4. Визначено технологічні умови, при яких відбувається зміна домінуючого типу вільних носіїв заряду в матеріалі.

Фреїк Д.М. – заслужений діяч науки і техніки України, академік АНВШ України, д. х. н., проф., директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Прокопів В.В. – к. ф.-м. н., доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Горічок І.В. – науковий співробітник Фізико-хімічного інституту;

Писклинець У.М. – к. х. н., старший викладач кафедри інформаційних технологій, медичної і біологічної фізики

- [1] Н.В. Ганина, В.А. Шмугуров, В.И. Фистуль. Квантово-химический метод определения энтальпии образования моновакансий в полупроводниках // *Фізика і хімія твердого тіла*, **5**(3), сс. 430-435 (2004).
- [2] Н.В. Ганина, В.А. Шмугуров, В.И. Фистуль. Квантово-химическое определение энтальпии образования моновакансий в полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(1), сс. 94-95 (2004).
- [3] В.В. Прокопів, І.В. Горічок. Энтальпия утворення моновакансий у сполуках $A^{II}B^{VI}$ // *Фізика і хімія твердого тіла*, **7**(4), сс. 717-719 (2006).
- [4] В.И. Кайданов, С.А. Немов, Ю.И. Равич. Самокомпенсация электрически активных примесей собственными дефектами в полупроводниках типа A^4B^6 . // *Фізика и техника полупроводников*, **2**(3), сс. 369-393 (1994).
- [5] Ф. Крегер. Химия несовершенных кристаллов, Мир, М. (1972).
- [6] P. Fochuk, R. Grill, O. Panchuk. The nature of point defects in CdTe // *J. Electron. Mater.*, **35**(6), pp.1354-1359 (2006).
- [7] Ю.Б. Румер, М.Ш.Рывкин. Термодинамика, статистическая физика и кинетика. Наука, М. (1972).
- [8] В.В. Прокопів, П.М. Фочук, І.В. Горічок, Є.В. Вержак. Опис процесів дефектоутворення у бездомішкових кристалах кадмій телуриду методом термодинамічних потенціалів // *Фізика і хімія твердого тіла*, **8**(2), сс. 380-387 (2007).
- [9] R. Grill, J. Franc, P. Höschl, I. Turkevych, E. Belas, and P. Moravec. Semi-insulating Te-saturated CdTe. // *IEEE transactions on nuclear science*, **52**(5), pp.1925-1931 (2005).
- [10] Li Yujie, Ma Guoli, Jie Wanqi. Point defects in CdTe. // *Journal of Crystal Growth*, **256** pp. 266-275 (2003).
- [11] У.М. Писклинець Іонізовані та електронейтральні дефекти у кристалах CdTe // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(2), сс. 275- 279 (2005).

D.M. Freik¹, V.V. Prokopiv¹, I.V. Gorichok¹, U.M. Pysklynets²

Constants of Equilibrium of the Quasichemical Reactions of Defects Creation in CdTe

¹*Vasyl Stefanyk Prekarpathian University, Shevchenko Str., 57, Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, E-mail: freik@pu.if.ua*

²*Ivano-Frankivsk State Medical Institute, Galitska Str., 2, Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine*

Constants of equilibrium of the quasichemical reactions of defects creation in CdTe are calculated. Dependences of concentrations of electrons, holes and point defects in undoped Cadmium Telluride from the parameters of twotemperature annealing in steam of cadmium are founded. Change of conduction type of material by the influence of technological factors is researched The structure of point defects in the area of n-p-transition is analyzed.