

Т.П. Цимбалюк

## Інженерія точкових дефектів та механізми утворення твердих розчинів системи PbTe–CdTe

ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»,  
вул. Шевченка 57, м. Івано-Франківськ, e-mail: [tetyanatsymbaliuk@gmail.com](mailto:tetyanatsymbaliuk@gmail.com)

Запропоновано кристалоквазіхімічні формули, визначено домінуючі точкові дефекти твердих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  на основі вихідних бінарних сполук PbTe і CdTe n- та p-типу провідності Розраховано залежність концентрації дефектів, вільних носіїв струму та холлівської концентрації від складу твердих розчинів.

**Ключові слова:** тверді розчини, плюмбум та кадмій телуриди, точкові дефекти, кристалоквазіхімічні формули.

Стаття поступила до редакції 11.08.2016; прийнята до друку 30.08.2016.

### Вступ

Телурид свинцю служить основною матрицею для створення великої групи напівпровідникових матеріалів, які використовуються для ІЧ-оптоелектронних приладів і термогенераторів, що функціонують в інтервалі температур від кімнатної до 900 К [1]. Одним із можливих шляхів покращення параметрів на його основі є введення гетеровалентних атомів заміщення при утворенні твердих розчинів [2]. Це призводить до генерації вакансій в підгратці свинцю або телуру.

Точкові дефекти, які визначають основні фізико-хімічні властивості матеріалу, залежать від їх термодинамічних параметрів, величини відхилення від стехіометрії, порогової енергії зміщення атомів і подальших процесів анігіляції дефектів при їх відпалі, а також від інших зовнішніх впливів [3, 4]. Природа точкових дефектів у кристалах  $Pb_xCd_{1-x}Te$  носить спірний характер, зокрема, до цього часу немає єдиної думки про види і зарядові стани власних і домішкових точкових дефектів та їх компенсацію.

У роботі запропоновано кристалоквазіхімічний підхід, що стосується аналізу механізмів утворення домінуючих точкових дефектів у зазначених твердих розчинах. Інтерес до твердих розчинів обумовлений прагненням отримувати матеріал визначеного типу провідності з точно заданими властивостями. Плюмбум та кадмій халькогеніди можна отримувати як діркового, так і електронного типу провідності. Контролюючи склад твердих розчинів на основі даних сполук, очевидно, можна отримувати обидва

типи провідності одночасно.

Метою даної роботи є дослідження точкових дефектів у твердих розчинах на основі плюмбум та кадмій телуридів, зокрема зроблено наголос на твердих розчинах із малим вмістом CdTe, за допомогою кристалоквазіхімічних формул, а також розрахунок концентрації переважаючих дефектів, основних носіїв та холлівської концентрації носіїв струму щодо відхилення від стехіометрії та складу твердих розчинів.

### I. Фізико-хімічні властивості твердих розчинів $Pb_{1-x}Cd_xTe$

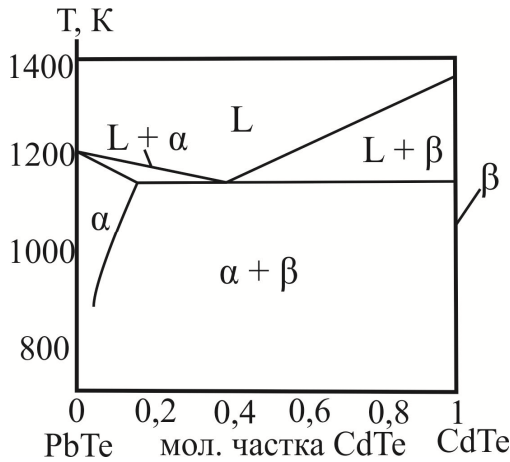
Максимальна протяжність області гомогенності відмічена при 1048 К від 49,994 до 50,013 % атомного вмісту Te [2]. Область гомогенності CdTe дуже вузька, розчинність у цій сполуці кадмію та телуру складає по  $1 \cdot 10^{-3}$  ат. % [5]. За даними [6], при 727 °С вона простягається на  $2 \cdot 10^{-4}$  ат. % як у сторону надлишку Cd, так і в сторону надлишку Te.

Фазова діаграма PbTe–CdTe належить до типу евтектики (рис. 1). Евтектичних склад і температура складають 35 мол. % CdTe і 1143 К відповідно (36 мол. % CdTe і 1157 К; 40 мол. % CdTe і 1113 К; 1139 К). Розчинність CdTe у PbTe при 523, 903, 993 і 1073 К дорівнює 3, 4,6, 10 та 17 мол. % відповідно (при 723, 823 і 923 К дорівнює 2, 3 та 4 мол. % відповідно) [7].

Розчинність кадмію в PbTe значно перевершує розчинність багатьох гетеровалентних елементів [8-11]. Так звідси [12], при  $T = 1139$  К вона

максимальна, і дорівнює 20 мол. %, а при зниженні температури до 870 К, розчинність кадмію знижується до 3 мол. %. Можна зробити висновок, що розглядувані у роботі склади твердих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$ , відповідно до правила Юма – Розарі, відносяться до розчинів заміщення, де домішка кадмію займає регулярні вузли свинцю.

Граничний вміст кадмію в твердих розчинах  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  (тобто його розчинність при 670 °С в  $PbTe$ ) відповідає  $x = 0,08$  (4 мол. % Cd), що досить добре відповідає літературним даним [12].



**Fig. 1.** The equilibrium phase diagram of the quasi-binary system CdTe-PbTe, where  $\alpha$  -  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  ( $x < 0,17$ ),  $\beta$  -  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  ( $x > 0,98$ ) [7].

Кадмій як елемент ІІВ групи формально є гетеровалентною домішкою по відношенню до  $PbTe$ . Однак в  $CdTe$  він проявляє ступінь окиснення такий же, як і свинець в  $PbTe$ . Крім того,  $CdTe$  володіє, як і  $PbTe$ , кубичною ґраткою з дуже близьким параметром:  $a_{PbTe} = 0,6462$  нм (тип NaCl),  $a_{CdTe} = 0,6481$  нм (тип сфалерит - ZnS) [13]. Автори [14] вказують на фазовий перехід у  $CdTe$  до ґратки типу NaCl з параметром 0,582 нм при високому тиску 3,6 ГПа.

Авторами [15] експериментально визначена залежність параметра ґратки  $a_0$  від вмісту Cd, яка відповідає закону Вегарда. Параметр ґратки монокристалів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  зменшується з  $x$  відповідно до рівняння:

$$a_0 [\text{Å}] = 6.462 - 0.433 x \text{ для } x \leq 0.11.$$

До цих пір тільки полікристалічні об'ємні зразки  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  були отримані шляхом швидкого гартування і методом відпалу [16-18] або методом Бріджмена [19]. Для гартованих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$ , зміна параметра ґратки і ширини забороненої зони з  $x$ , а також межа розчинності вивчалися Розенбергом і

ін. [16], Ніколічем [17] та Шмідтом [18]. У роботі [15] повідомляється про успішний ріст нанокристалів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  з вмістом Cd до 0,11 методом фізичного перенесення пари (ФПП) [20]. Для всіх досліджених зразків  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  вимірювання ефекту Холла і електропровідності, що виконувалися в діапазоні температур від 4 до 300 К, показали р-тип провідності. Концентрація носіїв зменшується від  $p \approx 3,5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  для зразків, що містять 1% Cd до зниження дірок  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  для 11% зразка. У той же час, концентрація носіїв показує слабку залежність від температури, наприклад, для зразка з 4% Cd змінюється від  $p \approx 2,4 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при 300 К до  $p \approx 3 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при 4,2 К. Рухливість зразків монотонно зростає зі зменшенням температури, від  $\mu \approx 60 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  до  $\mu \approx 1300 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$  [15]. Монокристали  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  показали сильну фотолюмінесценцію в середній інфрачервоній області виявляючи збільшення ширини забороненої зони зі збільшенням  $x$ .

Автори [21] стверджують, що в межах ОГ  $PbTe$  можна виділити, принаймні, три підобласті з різним характером концентраційних залежностей. Поблизу ~ 0,15 мол. % CdTe спостерігається перехід від  $p$ - до  $n$ -типу провідності, після чого  $n_x$  росте. В інтервалі складів 0,4 - 0,6 мол. % CdTe хід електрофізичних параметрів змінюється на протилежний. При подальшому збільшенні концентрації CdTe холлівська концентрація  $n_x$  залишається постійною.

## II. Кристалоквазіхімічний метод аналізу механізмів утворення твердих розчинів $Pb_xCd_{1-x}Te$

Метод кристалоквазіхімії детально описаний у [22]. Кристалоквазіхімічні формули твердих розчинів відображають характер взаємодії точкових дефектів або їх комплексів базового матеріалу (телуриду свинцю) і легуючої сполуки CdTe.

Кристалоквазіхімічні формули і дефектна підсистема нестехіометричних  $PbTe$  і  $CdTe$   $n$ - та  $p$ -типу провідності були представлені у роботах [23], [24] відповідно.

Оскільки  $PbTe$  та  $CdTe$  можуть бути отримані як  $n$ -, так і  $p$ -типу провідності, можна виділити можливі чотири варіанти утворення твердих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$ :  $n$ - $PbTe$ - $n$ - $CdTe$  (I),  $n$ - $PbTe$ - $p$ - $CdTe$  (II),  $p$ - $PbTe$ - $n$ - $CdTe$  (III),  $p$ - $PbTe$ - $p$ - $CdTe$  (IV).

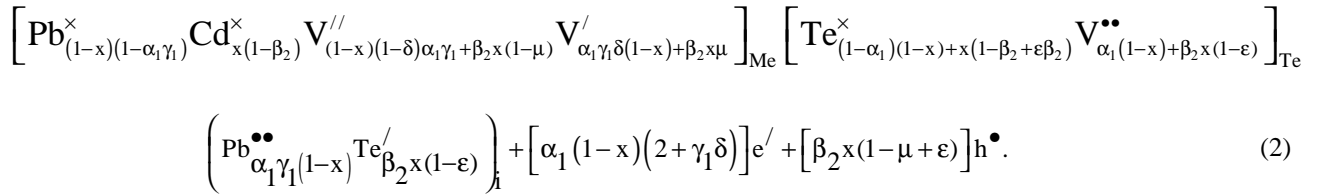
Кристалоквазіхімічна формула твердого розчину  $n$ - $PbTe$ - $n$ - $CdTe$  (Варіант I):

$$\left[ Pb_{(1-x)(1-\alpha_1\gamma_1)}^{x(1-\alpha_2+\gamma_2\alpha_2)} V_{\alpha_1\gamma_1(1-x)(1-\delta)+\alpha_2x(1-\gamma_2)}^{//} V_{\alpha_1\gamma_1\delta(1-x)}^{/} \right]_{Me} \left[ Te_{(1-x)(1-\alpha_1)+x(1-\alpha_2)}^{x(1-\alpha_2+\gamma_2\alpha_2)} V_{\alpha_1(1-x)+\alpha_2(1-\xi)}^{**} V_{x\alpha_2\xi}^{\bullet} \right]_{Te} \left( Pb_{\alpha_1\gamma_1(1-x)}^{**} Cd_{\alpha_2x(1-\gamma_2)}^{**} \right)_i + [\alpha_1(1-x)(2+\gamma_1\delta) + \alpha_2x(2-\xi)] e' \quad (1)$$

Тут  $\alpha_1 = (0,0 - 0,6 \cdot 10^{-4})$  – атомна частка плумбуму, визначена із області гомогенності сполуки PbTe при температурі  $T = 1048 \text{ K}$  [2],  $\gamma_1$  – частина атомів плумбуму у власних вузлах PbTe ( $\text{Pb}_{\text{Pb}}^{\times}$ ) ( $0 \leq \gamma_1 \leq 1$ ),  $\delta$  – диспропорціювання зарядового стану вакансій плумбуму у PbTe ( $0 \leq \delta \leq 1$ ),  $\alpha_2 = (0,0 - 10^{-3})$  атомна частка Cd, визначена з області гомогенності сполуки CdTe,  $\gamma_2$  – частина атомів кадмію у власних вузлах CdTe ( $\text{Cd}_{\text{Cd}}^{\times}$ ) ( $0 \leq \gamma_2 \leq 1$ ),  $\xi$  – диспропорціювання зарядового стану вакансій телуру у CdTe ( $0 \leq \xi \leq 1$ ),  $x$  – склад твердого розчину,  $e'$  – електрони.

У хімії вигідно використовувати кількість дефектів, які припадають на один моль речовини, а у зонній моделі концентрацію природно виражати числом частинок в одиниці об'єму. Враховуючи цю обставину, виразимо концентрацію переважаючих точкових дефектів ( $N_D$ ) та основних носіїв через їхні мольні долі  $\alpha$  ( $\beta$ ):

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] = A(\alpha_1 \gamma_1 (1-x)(1-\delta) + \alpha_2 x(1-\gamma_2)),$$



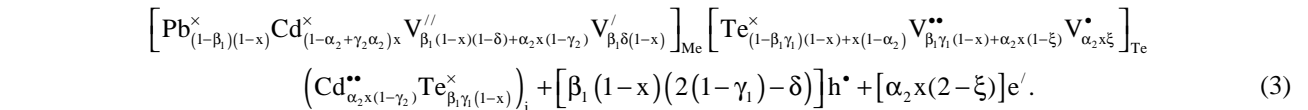
Тут  $\beta_2 = (0,0 - 10^{-3})$  атомна частка телуру, визначена із області гомогенності сполуки CdTe,  $\epsilon$  – частка атомів телуру у власних вузлах  $\text{Te}_{\text{Te}}^{\times}$  ( $0 \leq \epsilon \leq 1$ ),  $\mu$  – диспропорціювання зарядового стану вакансій кадмію ( $0 \leq \mu \leq 1$ ).

Концентрації дефектів виражаються залежностями:

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] = A((1-x)(1-\delta)\alpha_1 \gamma_1 + \beta_2 x(1-\mu)),$$

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{-}] = A(\alpha_1 \gamma_1 \delta(1-x) + \beta_2 x \mu),$$

$$[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] = A(\alpha_1 (1-x) + \beta_2 x(1-\epsilon)), \quad [\text{Pb}_i^{2+}] = A\alpha_1 \gamma_1 (1-x),$$



Тут  $\beta_1 = (0,0 - 1,3 \cdot 10^{-4})$  атомна частка телуру, визначена із області гомогенності сполуки PbTe при температурі  $T = 1048 \text{ K}$  [2],  $\delta$  – диспропорціювання зарядового стану вакансій плумбуму ( $0 \leq \delta \leq 1$ ).

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{-}] = A\alpha_1 \gamma_1 \delta(1-x),$$

$$[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] = A(\alpha_1 (1-x) + x\alpha_2 (1-\xi)), \quad [\text{V}_{\text{Te}}^{+}] = A x \alpha_2 \xi,$$

$$[\text{Cd}_i^{2+}] = A\alpha_2 x(1-\gamma_2), \quad [\text{Pb}_i^{2+}] = A\alpha_1 \gamma_1 (1-x),$$

$$n = A(\alpha_1 (1-x)(2 + \gamma_1 \delta) + \alpha_2 x(2 - \xi)).$$

Тут  $A = \frac{2Z}{a^3}$ ,  $Z$  – число структурних одиниць

(молекул) в елементарній комірниці ( $Z=4$ ).

Рівняння електронейтральності:

$$2[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] + [\text{V}_{\text{Me}}^{-}] + n = 2[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] + [\text{V}_{\text{Te}}^{+}] + 2[\text{Cd}_i^{2+}] + 2[\text{Pb}_i^{2+}].$$

Холлівську концентрацію носіїв струму знаходили із рівняння електронейтральності за умови

$n_H = |n - p|$ , і отримали формулу:

$$n_H = |2[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] + [\text{V}_{\text{Te}}^{+}] + 2[\text{Cd}_i^{2+}] + 2[\text{Pb}_i^{2+}] - 2[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] - [\text{V}_{\text{Me}}^{-}]|.$$

У випадку Варіанту II кристалоквазіхімічна формула утворення твердого розчину n-PbTe-p-CdTe буде:

$$[\text{Te}_i^{-}] = A\beta_2 x(1-\epsilon),$$

$$n = A\alpha_1 (1-x)(2 + \gamma_1 \delta),$$

$$p = A\beta_2 x(1-\mu + \epsilon).$$

Рівняння електронейтральності:

$$2[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] + [\text{V}_{\text{Me}}^{-}] + [\text{Te}_i^{-}] + n = 2[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] + 2[\text{Pb}_i^{2+}] + p,$$

а холлівська концентрація:

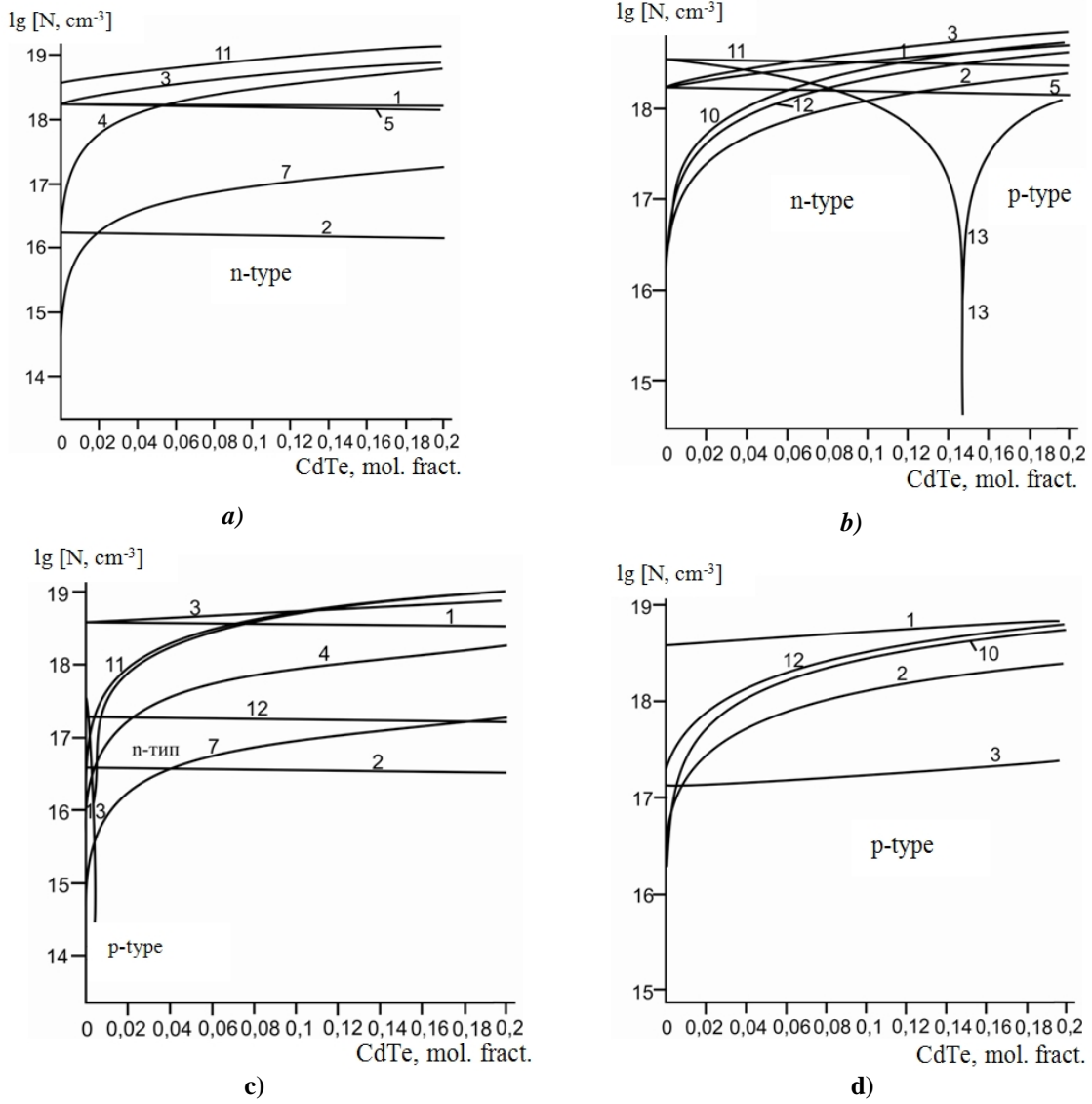
$$n_H = |2[\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] + 2[\text{Pb}_i^{2+}] - 2[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] - [\text{V}_{\text{Me}}^{-}] - [\text{Te}_i^{-}]|.$$

Аналогічно для Варіанту III (p-PbTe-n-CdTe) кристалоквазіхімічна формула буде мати вигляд:

Концентрації дефектів:

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{2-}] = A(\beta_1 (1-x)(1-\delta) + \alpha_2 x(1-\gamma_2)),$$

$$[\text{V}_{\text{Me}}^{-}] = A\beta_1 \delta(1-x), \quad [\text{V}_{\text{Te}}^{2+}] = A(\beta_1 \gamma_1 (1-x) + \alpha_2 x(1-\xi)),$$



**Fig. 2.** The dependence of the prevailing concentration of point defects (N): 1 –  $[V_{Me}^{2-}]$ , 2 –  $[V_{Me}^-]$ , 3 –  $[V_{Te}^{2+}]$ , 4 –  $[V_{Te}^+]$ , 5 –  $[Pb_i^{2+}]$ , 6 –  $[Pb_i^+]$ , 7 –  $[Cd_i^{2+}]$ , 8 –  $[Cd_i^+]$ , 9 –  $[Te_i^{2-}]$ , 10 –  $[Te_i^-]$ , basic carriers n (11), p (12), and Hall concentration  $n_H$  (13) due content of solid solution (x) n-PbTe–n-CdTe (a), n-PbTe–p-CdTe (b), p-PbTe–n-CdTe (c), p-PbTe–p-CdTe (d) ( $\alpha_1 = 0,6 \cdot 10^{-4}$  at. fract.,  $\alpha_2 = 10^{-3}$  at. fract.,  $\beta_1 = 0,13 \cdot 10^{-3}$  at. fract.,  $\beta_2 = 10^{-3}$  at. fract.,  $\gamma_1 = 0,9$ ,  $\gamma_2 = 0,9$ ,  $\delta = 0,05$ ,  $\mu = 0,4$ ,  $\varepsilon = 0,1$ ).

$$[V_{Te}^+] = A\alpha_2 x \xi, \quad [Te_i^0] = A\beta_1 \gamma_1 (1-x),$$

$$[Cd_i^{2+}] = A\alpha_2 x (1-\gamma_2), \quad p = A\beta_1 (1-x)(2(1-\gamma_1) - \delta),$$

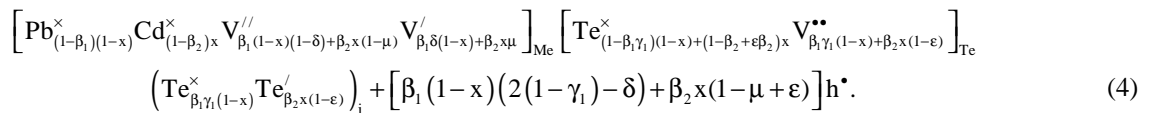
$$n = A\alpha_2 x (2-\xi).$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:  
 $2[V_{Me}^{2-}] + [V_{Me}^-] + n = 2[V_{Te}^{2+}] + [V_{Te}^+] + 2[Cd_i^{2+}] + p,$

а холлівська концентрація:

$$n_H = |2[V_{Te}^{2+}] + [V_{Te}^+] + 2[Cd_i^{2+}] - 2[V_{Me}^{2-}] - [V_{Me}^-]|.$$

Кристалоквазіхімічна формула для Варіанту IV (p-PbTe–p-CdTe):



Концентрації переважаючих дефектів:

$$[V_{Me}^{2-}] = A(\beta_1(1-x)(1-\delta) + \beta_2x(1-\mu)),$$

$$[V_{Me}^-] = A(\beta_1\delta(1-x) + \beta_2x\mu),$$

$$[V_{Te}^{2+}] = A(\beta_1\gamma_1(1-x) + \beta_2x(1-\varepsilon)), \quad [Te_i^0] = A\beta_1\gamma_1(1-x),$$

$$[Te_i^-] = A\beta_2x(1-\varepsilon),$$

$$p = A(\beta_1(1-x)(2(1-\gamma_1) - \delta) + \beta_2x(1-\mu + \varepsilon)).$$

Рівняння електронейтральності матиме вигляд:

$$2[V_{Me}^{2-}] + [V_{Me}^-] + [Te_i^-] = 2[V_{Te}^{2+}] + p,$$

а холлівська концентрація:

$$n_H = \left| 2[V_{Te}^{2+}] - 2[V_{Me}^{2-}] - [V_{Me}^-] - [Te_i^-] \right|.$$

#### IV. Аналіз результатів розрахунків

Результати проведених розрахунків концентрації точкових дефектів (N), вільних носіїв (n, p) та холлівської концентрації ( $n_H$ ) на основі кристалоквазіхімічних формул (1) – (4) наведено на рис. 2. Переважаючими дефектами у твердому розчині n-PbTe–n-CdTe є одно- та двозарядні вакансії телуру ( $V_{Te}^+$ ), ( $V_{Te}^{2+}$ ) (рис. 2, а, крива 4, 3). Як видно з рис. 2, а, при малих значеннях (x) переважають дефекти, притаманні плюмбум телуриду, концентрація яких спадає із збільшенням вмісту Cd у твердому розчині. Концентрація ж інших дефектів при цьому збільшується і при значеннях (x) близьких до 0,2, переважаючими є дефекти, властиві CdTe. Для кристалів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  в області складів  $0,04 < x < 0,16$  спостерігаються дефекти, які типові як для PbTe, так і для CdTe.

У твердих розчинах n-PbTe–p-CdTe переважаючими дефектами, в залежності від складу, є двозарядні вакансії телуру ( $V_{Te}^{2+}$ ), однозарядні міжвузлові атоми телуру ( $Te_i^-$ ) і двозарядні вакансії у підгратці металу ( $V_{Me}^{2-}$ ). Для складів  $0 < x < 0,06$  домінують такі ж дефекти як у PbTe, а для складів  $0,16 < x < 0,2$  переважають дефекти, притаманні CdTe. Для кристалів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  в області складів  $0,06 < x < 0,16$  спостерігаються дефекти, які типові як для PbTe, так і для CdTe. Як видно з рис. 1, б, при малих значеннях x ( $0 - 0,15$ ) є значною концентрація електронів (рис. 2, б, крива 11), тобто кристали володіють n-типом провідності. Із збільшенням (x) відбувається зменшення концентрації електронів, конверсія провідності з n- на p-тип ( $x = 0,15$ ) і подальше зростання концентрації дірок (рис. 2, б, крива 12), відповідальними за які є двозарядні вакансії телуру ( $V_{Te}^{2+}$ ) (рис. 2, б, крива 3).

У твердих розчинах p-PbTe–n-CdTe переважаючими дефектами, в залежності від складу, є одно- та двозарядні вакансії у підгратці металу ( $V_{Me}^-$ ), ( $V_{Me}^{2-}$ ) та двозарядні вакансії телуру ( $V_{Te}^{2+}$ ). Як видно з рис. 1, в, при малих значеннях (x) переважають дефекти, притаманні плюмбум телуриду, концентрація яких спадає із збільшенням

вмісту Cd у твердому розчині. Концентрація ж інших дефектів при цьому зростає і при значеннях (x) близьких до 0,2, переважаючими є дефекти, властиві CdTe. Для кристалів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  в області серединних складів спостерігаються дефекти, які типові як для PbTe, так і для CdTe. При значеннях x ( $0 - 0,0015$ ) основними носіями струму є дірки (рис. 2, в крива 12), тобто матеріал володіє p-типом провідності. Із збільшенням (x) спостерігається зменшення концентрації дірок, конверсія провідності з p- на n-тип ( $x = 0,0015$  мол. долі) і подальше зростання концентрації електронів (рис. 2, в крива 11), відповідальними за які є дво- та однозарядні вакансії телуру ( $V_{Te}^{2+}$ ), ( $V_{Te}^+$ ) (рис. 2, в криві 3, 4).

Для твердого розчину p-PbTe–p-CdTe переважаючими є одно- та двозарядні вакансії металу ( $V_{Me}^-$ ), ( $V_{Me}^{2-}$ ), а також міжвузлові атоми телуру ( $Te_i^-$ ) (рис. 2, г, криві 2, 1, 10). При значеннях  $x \leq 0,04$  концентрація основних дефектів відповідає їх концентрації у PbTe, при значеннях  $x > 0,16$  концентрація дефектів прямує до їх концентрації у CdTe.

#### Висновки

1. Проаналізовано дефектну підсистему твердих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$ , визначено переважаючі точкові дефекти та встановлено характер зміни їх концентрацій від вмісту кадмію, визначено умови формування матеріалів із наперед заданим типом провідності та концентрацією носіїв струму.

2. Вперше розроблені кристалоквазіхімічні формули та рівняння електронейтральності твердих розчинів n-PbTe–n-CdTe, n-PbTe–p-CdTe, p-PbTe–n-CdTe та p-PbTe–p-CdTe із різним початковим відхиленням від стехіометричного складу у базових сполуках (n- і p-типу провідності), які добре узгоджуються із результатами вимірювання холлівської концентрації.

3. Встановлено існування p-n-переходу у твердих розчинах типу n-PbTe–p-CdTe та p-PbTe–n-CdTe. Зокрема, для n-PbTe–p-CdTe спостерігається p-n-перехід при 0,15 мол. частки Cd, а для p-PbTe–n-CdTe p-n-перехід спостерігається при 0,0015 мол. частки Cd.

4. Побудовано двовимірні технологічні діаграми, що визначають хімічні склади твердих розчинів  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  із наперед заданим типом провідності та холлівською концентрацією носіїв струму.

*«Робота виконана за підтримки відділу громадської дипломатії НАТО програми «Наука заради миру» (NUKR, SEPP 984536)»*

**Цимбалюк Т.П.** – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла

- [1] V.M. Shperun, D.M. Freik, R.I. Zapukhliak, Termoelektryka telurydu svytsiu ta yoho analogiv (Plai, Ivano-Frankivsk, 2000).
- [2] D.M. Freik, V.V. Prokopiv, M.O. Halushchak, M.V. Pyts, H.D. Mateik. Krystalokhimiia i termodynamika defektiv u spolukakh AIVBVI (Plai, Ivano-Frankivsk, 2000).
- [3] J. Smith, J. Phys. Chem. Solids. Pergamon Press 32, 2201 (1971).
- [4] D.V. Korbutjak, S.V. Mel'nichuk, P.M. Tkachuk, UFZh 44(6), 730 (1999).
- [5] Ju.Zh. Tuleushev, V.N. Volodin, A.A. Migunova, V.N. Lisicyn, Zhurnal tehnichejskoj fiziki 85(8), 67 (2015).
- [6] N.H. Abrikosov, V.F. Bankina, L.V. Poreckaja i dr., Poluprovodnikovye hal'kogenidy i splavy na ih osnove (Nauka, Moskva, 1975).
- [7] V. Tomashik, P. Feychuk, L. Shcherbak. Ternary Alloys Based on II-VI Semiconductor Compounds (Books-XXI, Chernivtsi, 2010).
- [8] Ja.A. Ugaj, A.M. Samojlov, M.K. Sharov, A.V. Arsenov, S.A. Buchnev, Poverhnost', rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovanija 3, 28 (2002).
- [9] Ja.A. Ugaj, M.K. Sharov, O.B. Jacenko, Neorganicheskie materialy 40(8), 925 (2004).
- [10] M.K. Sharov, O.B. Jacenko, Ja.A. Ugaj, Neorganicheskie materialy 43(2), 172 (2007).
- [11] A.M. Samojlov, S.A. Buchnev, N.N. Dement'ev, Je.A. Olgoplova, A.V. Kuznecov, Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye, nejtronnye issledovanija 10, 73 (2003).
- [12] A.J. Rosenberg, R. Grierson, J.C. Woolley, P. Nicolich, Trans. Met. Soc. AIME 230(2), 342 (1964).
- [13] M.K. Sharov, Vestnik VGU 1, 65 (2011).
- [14] D.M. Chizhikov, V.P. Schastlivyj, Tellur i telluridy (Nauka, Moskva, 1966).
- [15] M. Szot, A. Szczerbakow, K. Dybko, L. Kowalczyk, E. Smajek, V. Domukhovski, E. Łusakowska, P. Dziawa, A. Mycielski, T. Story, M. Bułak, M. Galicka, P. Sankowski, R. Buczko and P. Kacman, ACTA PHYSICA POLONICA A 116(5), 959 (2009).
- [16] A.J. Rosenberg, R. Grierson, J.C. Woolley, P.M. Nikolich, Trans. Metall. Soc. A.I.M.E. 230, 342 (1964).
- [17] P.M. Nikolich, Brit. J. Appl. Phys. 17, 341 (1966).
- [18] V. Leute, R. Schmidt, Z. Phys. Chem. 172, 81 (1991).
- [19] T. Schmidt, E.G. Rower, H.M. von Bergmann, E. Saucedo, E. Dieguez, L. Fornaro, H. Stafast, J. Appl. Phys. 97, 103104 (2005).
- [20] A. Szczerbakow, K. Durose, Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. 51, 81 (2005).
- [21] E.I. Rogacheva, N.K. Zhigareva, A.B. Ivanova, Tverdye rastvory na osnove PbTe v sisteme PbTe–CdTe, Neorganicheskie materialy, 24(10), (1988).
- [22] S. S. Lisnjak, Neorganicheskie materialy, 32(2), 1913 (1992).
- [23] V.M. Boichuk, O.V. Tkachyk, L.V. Turovska, N.I. Dykun, Krystalokvazikhimichni formuly nestekhiometrychnoho plumbum telurydu iz skladnym spektrom tochkovykh defektiv i protsesy samolehuvannia, Fyzyka i khimiia tverdoho tila, 8(2), 366 (2007).
- [24] H.Ya. Hurhula, T.P. Vintoniak, N.D. Freik, Fyzyka i khimiia tverdoho tila 15(2), 763 (2014).

T.P. Tsymbalyuk

## Engineering of Point Defects and Formation Mechanisms of PbTe–CdTe Solid Solutions

*Vasyl Stefanyk' Precarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine*

The crystal-quasichemical formulas were proposed in paper. There were obtain the dominant point defects of  $Pb_{1-x}Cd_xTe$  solid solutions on the base of initial binary solutions PbTe and CdTe of the n- and p-type of conductivity. The dependence of defect concentrations, such as charge carriers and Hall's concentration due composition of solid solutions were calculated.