

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
Фізико-хімічний інститут

НОЦ «Наноматеріали в пристроях генерування та накопичення енергії»
АКАДЕМІЯ НАУК ВИЩОЇ ШКОЛИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНЕ АГЕНТСТВО З ПИТАНЬ НАУКИ, ІННОВАЦІЇ ТА ІНФОРМАЦІЇ
УКРАЇНИ

Державний фонд фундаментальних досліджень
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова
Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка
Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова
Інститут загальної і неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського

Українське фізичне товариство
Івано-Франківський ЦНТІ
Інститут інноваційних досліджень
Інститут загальної фізики РАН (Російська Федерація)
Інститут фізики ім. Б.І. Степанова НАН Білорусі (Республіка Білорусь)
Університет Газі (Туреччина)

ФІЗИКА І ТЕХНОЛОГІЯ

ТОНКИХ ПЛІВОК ТА НАНОСИСТЕМ

Матеріали XIV Міжнародної конференції

МКФТТПН-XIV

20-25 травня 2013 р.

Івано-Франківськ
Україна

Quasi-Chemical Description of Own Point Defects of Zinc Telluride

Prokopiv V.V.

Vasyl Stefanyk Prekarpathian University, Ivano-Frankivsk, Ukraine, e-mail: prkvv@i.ua

Zinc Telluride is a promising material of light-emitting diodes with high brightness. It is needed reliable information about their defective condition for developing the science-based technology ZnTe material.

| | |
|---|---|
| $=0 \rightleftharpoons V_{Te}^0 + V_{Zn}^0$ | $K_S = [V_{Te}^0] \cdot [V_{Zn}^0]$ |
| $Zn^v = V_{Te}^0 + Zn_{Zn}^0$ | $K_{Zn,v} = [V_{Te}^0] p_{Zn}^{-1}$ |
| $\frac{1}{2} Te_2^v = V_{Zn}^0 + Te$ | $K_{Te,v} = [V_{Zn}^0] p_{Te_2}^{-1/2}$ |
| $V_{Zn}^0 = V_{Zn}^{2-} + 2h^+$ | $K'_a = [V_{Zn}^{2-}] \cdot p^2 / [V_{Zn}^0]$ |
| $V_{Te}^0 = V_{Te}^{2+} + 2e^-$ | $K'_b = [V_{Te}^{2+}] \cdot n^2 / [V_{Te}^0]$ |
| $= 0 \rightleftharpoons h^+ + e^-$ | $K_s = np$ |
| $2[V_{Zn}^{2-}] + n = 2[V_{Te}^{2+}] + p$ | |

Stoichiometric Zinc Telluride can be changed by setting the partial pressure of the components (Zinc, Tellurium) on the solid phase or the temperature in the method of two-temperature annealing. Equilibrium of "crystal-vapor" can be described by quasichemical reactions equations which are listed in the table.

If you are calculated the equations system you can determine the concentration of holes p through the constant

quasichemical reactions K and the partial vapor pressure of Zinc P_{Zn} (1) or Tellurium P_{Te_2} (2):

$$2 \frac{K'_b K_{Zn,v} P_{Zn}}{K_i^2} p^4 + p^3 - K_i p - 2 \frac{K'_a K_S}{K_{Zn,v} P_{Zn}} = 0 \tag{1}$$

$$2 \frac{K'_a K_S}{K_i^2 K_{Te,v} P_{Te_2}^{1/2}} p^4 + p^3 - K_i p - 2 K'_b K_{Te,v} P_{Te_2}^{1/2} = 0 \tag{2}$$

The calculation of defects concentration are showed that in crystals ZnTe vacancies of Tellurium $[V_{Te}^{2+}]$ are formed in small quantities and concentration of charge carriers which is determined by the mainly vacancies of Zinc $[V_{Zn}^{2-}]$.

The increased of the Zinc vapor partial pressure P_{Zn} as the decrease vapor pressure Tellurium P_{Te_2} thus a constant annealing temperature T it reduces the hole concentration p, which is caused by a decrease in the concentration of Zinc vacancies $[V_{Zn}^{2-}]$.

With the decrease of annealing temperature T by the constant partial pressure of Zinc vapor P_{Zn} (Tellurium P_{Te_2}) the concentration of Zinc vacancies have been decreased $[V_{Zn}^{2-}]$, which reduces the hole concentration p.

The work supported by project of MES of Ukraine (N 0107U006768)