

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2013

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 22-27 квітня 2013 року)

Суми
Сумський державний університет
2013

Новий підхід до моделювання процесів дефектоутворення у монокристалах сульфїду цинку

Бересток Т.О., *асп.*; Опанасюк А.С., *доц.*; Єлісеєва А.Р., *школяр*
Сумський державний університет, м. Суми

Практичне застосування приладових структур на основі монокристалів і плівок сульфїду цинку визначається експлуатаційними характеристиками та властивостями матеріалу, які у значній мірі обумовлюються структурою його точкових дефектів. Тому здатність отримувати матеріали з контрольованим ансамблем точкових дефектів за рахунок варіювання умов їх отримання та післяростової термообробки, визначає можливість використання матеріалу. Нажаль, на сьогоднішній час ансамбль точкових дефектів у монокристалах сульфїду цинку вивчений недостатньо.

Метою роботи є удосконалення існуючих підходів до опису ансамблю точкових дефектів та розрахунок їх концентрацій у монокристалах ZnS в залежності від умов отримання.

У роботі було запропоновано новий підхід до моделювання процесів дефектоутворення у двокомпонентних сполуках, який поєднує метод квазіхімічних реакцій та розрахунки енергії утворення дефектів у матеріалах з перших принципів. Отримані рівняння які дозволяють більш адекватно розраховувати концентрацію дефектів різних видів у сполуках при зміні зовнішньої температури та тиску компонентів матеріалу за значеннями термодинамічних потенціалів процесу дефектоутворення. На основі цих співвідношень визначені трансляційна, оберտальна та вібраційна компоненти енергії та зроблена оцінка хімічних потенціалів атомів цинку та сірки. Це дозволило провести розрахунок концентрацій нейтральних точкових дефектів в матеріалі в залежності від фізико-технологічних умов вирощування монокристалів сульфїду цинку. Концентрації вільних носіїв струму та заряджених точкових дефектів розраховані з використанням статистики Фермі-Дірака.

Проведено порівняння результатів моделювання ансамблю дефектів у монокристалах сульфїді цинку, отриманих з використанням запропонованої та традиційної методик розрахунків.