

$$\text{плотность } \rho_{кр} = 8 / \left\{ \sum_i^k \sum_j^k r_i \cdot r_j \cdot (\rho_{кри}^{-1/3} + \rho_{крj}^{-1/3})^3 \right\}; \quad (6)$$

температура

$$T_{кр} = \frac{\rho_{кр}}{8} \cdot \sum_i^k \sum_j^k r_i \cdot r_j \cdot (\rho_{кри}^{-1/3} + \rho_{крj}^{-1/3}) \cdot (T_{кри} \cdot T_{крj})^{1/2}; \quad (7)$$

$$\text{давление } P_{кр} = (0,2905 - 0,085 \cdot \omega) \cdot \rho_{кр} \cdot R \cdot T_{кр}. \quad (8)$$

В уравнениях (6),(7) и (8) критическая плотность j -го компонента

$$\rho_{крj} = P_{крj} / [(0,2905 - 0,085 \cdot \omega_j) \cdot R_j \cdot T_{крj}]. \quad (9)$$

Для выполнения расчетов разработана программа на языке программирования Object Pascal в среде разработки Delphi, в которой реализован представленный выше метод расчета. База данных включает сведения более, чем для 400 веществ [1].

Литература:

1. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.:Химия, 1982.-582с.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДЕФЕКТОУТВОРЕННЯ У МОНОКРИСТАЛАХ ТЕЛУРИДУ КАДМІЮ ЛЕГОВАНОГО ХЛОРОМ

Косяк В.В., Опанасюк А.С., Тиркусова Н.В.

Одним із перспективних матеріалів для виготовлення високочутливих неохолоджувальних детекторів іонізуючого випромінювання є телурид кадмію легований хлором. Використання хлору як легуючого елемента дозволяє отримувати низьку провідність монокристалів $CdTe$, завдяки ефекту самокомпенсації заряджених атомних дефектів, що забезпечує високу ефективність детектування рентгенівського та гама випромінювання.

За допомогою метода квазіхімічних реакцій проведено моделювання процесів дефектоутворення у монокристалах $CdTe:Cl$ в залежності від тиску пари кадмію та концентрації домішкових атомів. При цьому основним механізмом

дефектоутворення обрано взаємодію заряджених дефектів з утворенням асоціатів [1]. Моделювання проведено у наближенні повної рівноваги дефектів з використанням моделі запропонованої в [2]. Система квазіхімічних рівнянь, що використовувалась для розрахунків має вигляд:

$$Cd_{Cd} = V_{Cd}^- + Cd_i^+, \quad [V_{Cd}^-] \cdot [Cd_i^+] = K_F, \quad (1.1)$$

$$Cd^G + V_i^0 \leftrightarrow Cd_i^+ + e^-, \quad n \cdot [Cd_i^+] = K_r \cdot P_{Cd}, \quad (1.2)$$

$$V_{Cd}^{2-} + Cl_{Te}^+ = (V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-, \quad \frac{[(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-]}{[V_{Cd}^{2-}] \cdot [Cl_{Te}^+]} = K_P, \quad (1.3)$$

$$Cl_{Te}^+ + (V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^- = (V_{Cd}^{2-} 2Cl_{Te}^+)^0, \quad \frac{[(V_{Cd}^{2-} 2Cl_{Te}^+)^0]}{[(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-] \cdot [Cl_{Te}^+]} = K_{DP}, \quad (1.4)$$

$$Cd_i^0 \leftrightarrow Cd_i^+ + e^-, \quad \frac{n \cdot [Cd_i^+]}{[Cd_i^0]} = K_1, \quad (1.5)$$

$$Cd_i^+ \leftrightarrow Cd_i^{2+} + e^-, \quad \frac{n \cdot [Cd_i^{2+}]}{[Cd_i^+]} = K_2, \quad (1.6)$$

$$V_{Cd}^- \leftrightarrow V_{Cd}^0 + e^-, \quad \frac{n \cdot [V_{Cd}^0]}{[V_{Cd}^-]} = K_3, \quad (1.7)$$

$$V_{Cd}^{2-} \leftrightarrow V_{Cd}^- + e^-, \quad \frac{n \cdot [V_{Cd}^-]}{[V_{Cd}^{2-}]} = K_4, \quad (1.8)$$

$$(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^0 = (V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^- + e^-, \quad \frac{[(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-] \cdot n}{[(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^0]} = K_5, \quad (1.9)$$

$$Cl_{Te}^0 = Cl_{Te}^+ + e^-, \quad \frac{n \cdot [Cl_{Te}^+]}{[Cl_{Te}^0]} = K_3, \quad (1.10)$$

$$0 \leftrightarrow e^- + h^+, \quad n \cdot p = K_i, \quad (1.11)$$

$$n + [V_{Cd}^-] + 2 \cdot [V_{Cd}^{2-}] + [(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-] = p + [Cd_i^+] + 2 \cdot [Cd_i^{2+}] + [Cl_{Te}^+], \quad (1.12)$$

$$[(Cl)_{tot}] = [(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^0] + [(V_{Cd}^{2-} Cl_{Te}^+)^-] + [Cl_{Te}^0] + [Cl_{Te}^+] + 2 \cdot [(V_{Cd}^{2-} 2Cl_{Te}^+)^0]. \quad (1.13)$$

В результаті моделювання отримані залежності концентрації точкових дефектів та концентрації вільних носіїв заряду від технологічних параметрів отримання і відпалу монокристалів.

Література

1. Saraie J., Kitagava M. Effect of Component Element during LPE on Electrical Properties of *CdTe* // J. Solid State Chem.-1979.-V.126, № 12.-P. 2225-2231.

2. Косяк В.В., Опанасюк А.С., Опанасюк Н.М., Проценко І.Ю. Квазіхімічний опис дефектів у телуриді кадмію// Вісник СумДУ. Серія "Фізика, математика, механіка".-2004.-№10 (69).-С. 5-15.

АНСАМБЛЬ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ПЛІВКАХ *CdTe* ОДЕРЖАНИХ ПРИ РЕГУЛЬОВАНОМУ ТИСКУ КАДМІЮ

Косяк В.В., Опанасюк А.С.

З використанням методу квазіхімічних реакцій проведено моделювання процесів дефектоутворення у плівках *CdTe*, для випадку конденсації шарів при контрольованому тиску пари кадмію P_{Cd} .

Розрахунки здійснювались для двох моделей дефектної структури телуриду кадмію запропонованих у роботах [1,2] При цьому використовувались різні данні про енергії іонізації точкових дефектів в матеріалі. Моделювання проведено для двох крайніх випадків рівноваги точкових дефектів, повної рівноваги і закалки [3].

Встановлено, що при використанні високотемпературного наближення (повна рівновага) в області тисків $P_{Cd} > 1 \text{ Па}$ обидві моделі дають близькі значення концентрації носіїв струму в області високих тисків кадмію, та передбачають зміну провідності матеріала з p на n -тип при підвищені P_{Cd} . Разом з цим розбіжності між результатами одержаними в рамках різних моделей суттєво збільшуються при тисках кадмію $P_{Cd} < 1 \text{ Па}$. При цьому модель [2] передбачає додаткову зміну типу провідності *CdTe* з p на n у області $P_{Cd} < 10^2 \text{ Па}$.