

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
 Декан хімічного ф-ту
 __Лявинець О.С.____

(підпис прізвище,
 ініціали)

“ 15. ____”
 __квітня__ 2009 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА

3 спецкурсу **“Дефекти в напівпровідниках”**
 (назва навчального предмету)

Для спеціальності 7.070301, 8.070301 - хімія
 (номер та назва спеціальності або спеціальностей)

Факультет хімічний

Кафедра неорганічної хімії

(підрозділ неорганічної хімії)

Нормативні дані Форма навчання	Курс	Семестри	Лекції (год)	Практичних (семінарських) (год)	Лабораторних (год)	Всього годин	Само-стійна робота (год)	Заліки (се-местр)	Екзам-ен (се-местр)
Денна	V	IX	18	18	-	36	72	-	IX

Робоча програма складена на основі власної розробки

(назва типової програми, дата затвердження)

Індекс

Робоча програма складена Панчуком Олегом Ельпидефоровичем
(прізвище, ім'я по батькові викладача, який відповідає за складання)

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри **неорганічної імїї,**
протокол № 8 « 27 » _____ 04 _____ 2009 р.

Зав. кафедрою _____ (Фочук П.М.)

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

протокол №1 _____

(якою)

« 28 » _____ 04 _____ 2009 р. Голова _____

(Волощук А.Г.)

Загальне про магістратуру

Присвоєння випускникові кваліфікації "магістр" означає, що він підготовлений:

1. До самостійного виконання професійної діяльності, у тому числі:

до науково-дослідної діяльності за напрямом;

до самостійного вирішення завдань, визначених програмою спеціалізованої підготовки;

до проведення педагогічної діяльності, в тому числі у вищих навчальних закладах;

до інших видів діяльності, визначених конкретною освітньою програмою.

2. До продовження навчання в аспірантурі.

Магістр хімії має бути широко ерудований в області сучасних теоретичних концепцій різних розділів хімії, володіти методами синтезу і аналізу структури і властивостей речовини у вибраній галузі хімічної науки, володіти фундаментальними навиками науково-дослідної роботи, володіти сучасними інформаційними технологіями, методологією наукової творчості, бути підготовленим до науково-дослідної і педагогічної діяльності.

Крім того, магістр хімії повинен:

- мати уявлення про основні категорії, закони, прийоми і форми наукового пізнання, теорії і методології досліджень;

- мати основні уявлення про філософські питання природознавства і сучасні філософські проблеми природних наук;

- вільно володіти однією з іноземних мов;

- мати уявлення про моделювання властивостей речовин і реакцій на основі знання основних розділів вищої математики та законів фізики; уміти аналізувати результати математичної обробки наукових даних з метою визначення їх достовірності й області використання; мати уявлення про можливості використання сучасних інформаційних комп'ютерних технологій у хімії; знати системи збору, обробки і зберігання хімічної інформації; уміти створювати авторські і користуватися стандартними банками комп'ютерних програм і банками даних;

- мати уявлення про найбільш актуальні проблеми сучасної теоретичної і експериментальної хімії; знати принципи побудови і методологію хімічних досліджень; мати уявлення про історичні етапи розвитку хімії, найважливіші відкриття вітчизняних учених, об'єктивну необхідність виникнення нових напрямів в хімічній науці; володіти принципами побудови викладання хімії в середній і вищій школі, мати уявлення про теоретичні і педагогічні основи управління процесом навчання.

Вимоги, обумовлені спеціалізованою підготовкою магістра.

Магістр хімії повинен:

- уміти вибрати самостійно або кваліфіковано сприймати представлену тему дослідження;

- уміти аналізувати наукову літературу з метою вибору напрямку дослідження за обраною темою з використанням сучасних інформаційних технологій;

- уміти моделювати основні процеси майбутнього дослідження з метою вибору методів дослідження, наявного апаратурного забезпечення або створення нових методик;

- уміти обробляти отримані результати і аналізувати їх з врахуванням наявних літературних даних;

- представляти підсумки виконаної роботи у вигляді звітів, доповідей на конференціях, наукових публікацій з використанням сучасних можливостей інформатики.

спецкурсу „Дефекти в напівпровідниках”

Метою курсу є ознайомлення студентів, що спеціалізуються на кафедрі неорганічної хімії, з хімічними та фізичними основами теорії точкових та лінійних дефектів в напівпровідниках. Глибоко розглядається типи точкових та лінійних дефектів, статистика точкових дефектів з виведенням констант рівноваги утворення дефектів і розрахунком їх концентрації. Детально обґрунтовується зв'язок між концентрацією атомних ТД та вміст електронних ТД як в умовах високотемпературної рівноваги дефектів, так і при експлуатаційних температурах. Особливе значення надається розгляду практичних створень моделей дефектних структур у вигляді апроксимаційних діаграм в координатах: концентрація точкових дефектів як функція температури в елементарних напівпровідниках, як функція тиску пари домішкового компонента при сталій T . Або ж для випадку бінарного напівпровідника: концентрація точкових дефектів як функція відхилення від стехіометрії тобто тиску пари одного з компонентів тощо.

Завданням курсу є навчити студентів вільно орієнтуватись в складних питаннях теорії дефектоутворення в напівпровідниках і набуттю ними (студентами) вмінь будувати вищезгадані апроксимаційні діаграми, що відіграє ключову роль при виконанні студентами курсових та дипломних робіт. Це також важливо з точки зору підготовки майбутньої виробничої діяльності студентів на напівпровідникових підприємствах.

Додатково для магістрів завданням є оволодіння студентами методикою обслуговування комп'ютерних програм, призначених для обчислення концентрації точкових дефектів в напівпровідниках як функцію температури чи відхилення від стехіометрії в CdTe.

ПРОГРАМА

Спецкурсу "Дефекти в напівпровідниках"
для студентів У курсу хімічного факультету
(спеціалізація - неорганічна хімія)
Спеціальність 01.08 –Хімія,
Спеціалісти та магістри

Чернівці, 2009

ЗМІСТ ПРОГРАМИ (ДЛЯ СПЕЦІАЛІСТІВ)

1. Вступ. Кристалічні та аморфні тіла. Ідеальні та реальні кристали. Дефекти в кристалах: точкові (нульмірні), лінійні (одномірні), поверхневі двомірні), об'ємні (трьохмірні).

2. Точкові дефекти. Електронні та атомні дефекти. Вакансії та міжвузлові атоми. Дефекти за Шотткі та Френкелем, механізм їх утворення. Тетраедричні та октаедричні пустоти в щільно-упакованих ГЦК. Антиструктурні дефекти в бінарних сполуках на прикладі CdTe.

3. Статистика точкових дефектів. Вільна енергія кристала. Ентропія термічна (коливна) та конфігураційна. Статистичний розгляд утворення дефекту за Шотткі в елементарному кристалі. Конфігурація вакансій як функція коливної та конфігураційної ентропії, а також ентропії утворення вакансій. Способи обчислення цих величин. Утворення дефектів за Френкелем в елементарному кристалі. Концентрація цих дефектів як функція термодинамічних параметрів процесу. Термічні дефекти в бінарних кристалах.

4. Теорія квазіхімічних реакцій між точковими дефектами в твердих тілах Крегера. Структурні елементи кристалу. Заряди вакансій Cd, Te в ґратці CdTe.

5. Дефекти в кристалах простих чистих речовин. Власні атомні і електронні дефекти. Повна рівновага дефектів. Власні дефекти в елементарному напівпровіднику „M”. Повне рівняння електронейтральності (РЕН). Метод Брокера апроксимації РЕН.

Апроксимоване рівняння електронейтральності (АРЕН). Діаграми "концентрація дефектів - зворотна температура".

6. Дефекти в кристалах простих речовин, що містять домішки. Механізм впровадження атомів домішки. Дефекти в кристалах чистих бінарних сполук. Типи дефектів в них. Уявлення про способи розрахунку констант рівноваги. Ізотерми концентрації дефектів при високотемпературній рівновазі. Розгляд системи рівнянь для CdTe. Дефекти в CdTe, що містять домішки одного типу. Значення теорії Крегера для синтезу кристалів заданими властивостями.

7. Ознайомлення з комп'ютерним моделюванням структури ТД в CdTe за допомогою пакета констант КХРД СН-5.

8. Лінійні дефекти - дислокації. Їх роль у поясненні механічних властивостей кристалів. Краєві дислокації. Механізм їх утворення. Екстраплощина та ядро дислокації. Вектор Бюргерса і контур Бюргерса. Ковзання краєвих дислокацій. Переповзання краєвих дислокацій. Роль точкових дефектів кристалу в переміщенні краєвих дислокацій. Гвинтова дислокація, її переміщення.

9. Вплив дислокацій на електричні властивості Ge, Si, CdTe. Введення та усунення дислокацій. Способи визначення густини дислокацій, роль ямок травлення в цьому.

ДОДАТКОВІ ПИТАННЯ (ДЛЯ МАГІСТРІВ)

10. Побудова апроксимаційних діаграм залежності концентрацій точкових дефектів від тиску пари Кадмію (у всьому інтервалі від мінімального до максимального значення), в CdTe, легovanому фіксованими кількостями ($1 \cdot 10^{17}$ ат/см³) акцептора (Купрум) або простого донора (Індій), при 700, 800 та 900⁰ С.

11. Побудова діаграм (з повним розв'язком рівняння електронейтральності) залежності точкових дефектів від тиску пари

Кадмію (у всьому інтервалі від мінімального до максимального значення), в CdTe, легovanому фіксованими кількостями ($1 \cdot 10^{17}$, $1 \cdot 10^{18}$, $1 \cdot 10^{19}$ ат/см³) домішки Індію з врахуванням утворення асоціатів А⁻. Використати набір констант КХРД СН-5, програму розрахунків „Marle”. Побудувати графік та таблицю цифрових результатів.

12. Побудова діаграм (з повним розв’язком рівняння електро-нейтральності) залежності точкових дефектів від температури (600-900⁰С) при концентрації Індію $1 \cdot 10^{19}$ ат/см³ та значеннях P_{Cd} 10^{-3} та 10^{-2} атм. Побудувати графік та таблицю цифрових результатів.

ЛІТЕРАТУРА.

1. Панчук Л. „Дефекти в напівпровідниках”, Конспект лекцій (електронна форма), Чернівці, ЧНУ, 2009,
2. Креггер Ф. Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир, 1968, 654
3. Болтакс Б.И.. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. М.:Наука, 1972, 384 с.

ДОДАТКОВО ДЛЯ МАГІСТРІВ

4. К. Бургуэн, М. Ланно. Точечные дефекты в полупроводниках. М.; Мир, 1985.
5. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высшая школа, 1983.
6. P.Fochuk, O.Korovyanko, O.Panchuk. High-temperature point defect equilibrium in CdTe modeling. J.Cryst. Growth, v.197, 1999, p.603-6
7. P.Fochuk, O.Korovyanko, I.Turkevych a.o. Defect chemistry in CdTe<In> crystals. J.Cryst. Growth, 1999, v.207, p. 273-277.

РЕЦЕНЗІЯ

на робочу програму спецкурсу "Дефекти в напівпровідниках" для студентів-неорганіків ІУ курсу хімічного факультету/

На спецкурс виділено небагато часу - всього 23 год. лекцій та 10 годин практичних робіт. Тематика та зміст спецкурсу тісно пов'язані з тематикою кафедри (неорганічної хімії), яка розробляється вже на протязі 30-и років. Детально розглядаються питання утворення точкових дефектів, їх типи, відповідні теорії. Значна увага приділена математичним основам статистики ТД та способам їх обрахунку, в першу чергу, побудові апроксимаційних діаграм за методом Броуера. Такі діаграми заплановано побудувати як для чистих та легованих кристалів елементарних напівпровідників, так і для (головним чином) телуриду кадмію, який є головним об'єктом дослідження на кафедрі. Основою викладу є теорія квазіхімічних реакцій між дефектами в твердих тілах, яка розроблена Креггером ще в 60-х роках, але не загубила своєї актуальності досі, отримавши багаторазове підтвердження.

Невелика частина програми присвячена розгляду лінійних дефектів. Тут викладені основні поняття питання, типи дислокацій, їх пересування. Включення цього питання в програму виправдане, оскільки такі дефекти відіграють істотну роль у визначенні ряду властивостей напівпровідників, і студентам варто про це мати уявлення. Вважаю, що програма складена зважено і послужить належній фаховій підготовці студентів-неорганіків.

Рецензент

(доц. Фейчук П.)

Рецензія
на програму курсу
"ДЕФЕКТИ В НАПІВПРОВІДНИКАХ"
(спецкурс для студентів 4-5 курсів хімфаку,
що спеціалізуються з неорганічної хімії)

Точкові та лінійні дефекти відіграють домінуючу роль у визначенні електричних та оптичних властивостей напівпровідників, тому їх вивчення має велике значення. Саме на це й спрямована наукова роботи відділу неорганічної хімії. І логічно, що для повноцінного виконання курсових чи дипломних робіт студенти повинні бути теоретично підготовленими в цьому питанні. В програмі передбачено розгляд як основних положень теорії квазіхімічної взаємодії Крегера, так і аналіз механізму утворення дислокацій, їх ковзання, переповзання тощо. Введено поняття про вектор Бюргера та інші ключові поняття. Багато уваги приділено (особливо на практичних заняттях) навчання студентів вмінню самостійно будувати діаграми "концентрація дефектів - термодинамічний параметр (температура, концентрація домішки, тиск пари компонента)". Доцільно введено ілюстрацію відповідних залежностей на конкретному прикладі телуриду кадмію, бо саме з цим матеріалом студенти повинні бути готові працювати, займаючись науковою роботою. Залишається побажати, щоби при дальшій розробці курсу лектор не практиці якимось чином ознайомив студентів зі сучасними методами розрахунку концентрації дефектів, тобто саме комп'ютерними, які якраз і розроблені на кафедрі на заміну більш неточним, що ґрунтуються на методі апроксимації рівняння електронейтральності.

РЕЦЕНЗЕНТ

(проф. Фочук П.)

СПЕЦКУРС “ ДЕФЕКТИ В НАПІВПРОВІДНИКАХ”
Перелік знань та умінь

Студент повинен знати: типи дефектів за їх X-мірністю, види точкових дефектів, основні положення статистики точкових дефектів в напівпровідниках, вирази констант рівноваги, що визначають концентрацію дефектів за Шотткі та Френкелем, номенклатуру дефектів згідно теорії квазіхімічних реакцій між дефектами, суть методу апроксимації рівняння електронейтральності кристалу, способи побудови апроксимаційних діаграм, мати поняття про типи дислокацій та їх властивості, а також вплив точкових дефектів та дислокацій на електричні властивості напівпровідників. Способи визначення густини лінійних дислокацій в кристалах напівпровідників методом ямок травлення.

Студент повинен вміти: записувати систему рівнянь квазіхімічних реакцій утворення власних та введення домішкових точкових дефектів в кристал, відповідні константи рівноваги та рівняння електронейтральності та провести апроксимацію останнього для відповідних умов, побудувати апроксимаційну діаграму залежності концентрації точкових дефектів в елементарному чи бінарному напівпровіднику від температури, активності домішки або тиску пари компонента для заданих вихідних умов (на прикладі CdTe).

Змістово-діяльнісна структура модулів
навчальної дисципліни "Дефекти в напівпровідниках"

№№ НЕ	Назва модуля (М) або навчаль ного елементу	Зміст навчально го елементу	Вид Заняття та число балів		Види діяльност і та поточног о контрол ю	Кількість балів за роб ІНДЗ	Кількість балів за ІНДЗ	Всього балів за НЕ
			Лекц	Практ				
	Модуль 1. Дефекти в кристалах, їх статистика		12	6				
НЕ 1.1	Кристали та дефекти в них	Ідеальні та реальні кристали, типи дефектів	4	2	Лекції, Практ. заняття Контр. роб. 1	12	-	12
НЕ 1.2	Точкові дефекти	Електронні та атомні точкові дефекти, за	4	2	Лекції, Практ. заняття Контр. роб. 1	15	-	15
НЕ 1.3	Статистика точкових дефектів по Шотткі та	Види ентропії, ентальпія і вільна енергія кристалу розрахунок	4	2	Лекції, Практ. заняття Контр. роб. 1	16	Рефе -рат	23
	Всього за модуль 1 (разом з ІНДЗ)							50
	Модуль 2. Квазіхімічні рівняння, апроксимаційні діаграми, дислокації.		6	12				
НЕ 2.1	Квазіхімічна теорія та її використання	Апроксимаційні діаграми дефектів в простих	2	6	Лекції, Практ. заняття Контр. роб. 2	20	-	20
НЕ 2.2	Лінійні дефекти та	АД в CdTe, вплив дислокацій на	4	6	Лекції, Практ. заняття Контр. роб №2	20	Складан ня задач на побуд. АД	30
	Всього за модуль 2							50
	Всього годин за семестр		18	18	Всього за семестр, бал			100

Г Р А Ф І К
модульного контролю з курсу
Дефекти в напівпровідниках

Модуль №	Зміст	Дата КР	Оголошення	Число балів	ІНДЗ	Бали	Всього за модуль
1	Теорія п.1-3, КР-1	До 13.12	15.12.	40	Реферат	До 10	50
2	Теорія п.4-9, КР-2	До 27.12	30.12.	40	Складання задач АД	До 10	50
Іспит	Теорія п.1-9	Січень	В день склад.	100	-		(100)

Всього за модулі 1-2 100 балів

Питання на іспит “Дефекти в напівпровідниках”

1. Краєва дислокація. Механізм її утворення при зсуві. Ядро дислокації. Додатні та від'ємні дислокації. Контур і вектор Бюргерса.*
2. Теорія квазіхімічних реакцій дефектоутворення Крегера. Позначення дефектів в кристалі АВ в системі структурних елементів і складових одиниць.
3. Статистика точкових дефектів. Вільна енергія кристалу. Термічна, коливна і конфігураційна ентропія.
4. Лінійні дефекти (дислокації). Пружна і пластична деформації. Критична напруга зсуву. Пояснення властивостей реальних кристалів на підставі уявлень про наявність дислокацій.
5. Типи дислокацій в ґратках з алмазоподібною структурою. Вплив дислокацій на електричні властивості германію і силіцію.
6. Точкові дефекти: атомні та електронні. Типи атомних дефектів: за Шоткі та за Френкелем. Міжвузлові атоми в ГЦК структурах, тетраедричні та октаедричні пустоти. Антиструктурні дефекти в бінарних сполуках.
7. **Гвинтова дислокація, її вектор Бюргерса. Праві і ліві гвинтові дислокації. Переміщення гвинтових дислокацій.**
8. Статистичний аналіз процесу утворення вакансії в елементарному кристалі. Залежність вільної енергії від концентрації вакансій. Зв'язок останньої з ентропією та ентальпією дефектоутворення.
9. **Переповзання краєвої дислокації як неконсервативний рух. Пороги на екстраплощинах і залежність їх числа від енергії порогуутворення та температури. Енергія активації переповзання.**
10. **Статистичний аналіз процесу утворення дефектів за Френкелем в елементарному кристалі. Залежність концентрації дефектів від термодинамічних параметрів дефектоутворення.**
11. Кристалічні та аморфні тіла. Ідеальні та реальні кристали: досконалі та дефектні. Типи дефектів в кристалах: нуль-, одно-, двох- і трьохмірні.
12. **Ковзання краєвої дислокації як консервативний рух. Пояснення низьких критичних напруг зсуву ковзанням краєвої дислокації.**
13. **Визначення з температурної залежності концентрації дефектів, ентальпії та ентропії дефектоутворення. Термічні дефекти в бінарному кристалі.**
14. Реакції утворення вакансій в підґратках бінарного напівпровідника на прикладі телуриду кадмію. Іонізація цих вакансій і обґрунтування на основі схеми зв'язків в кристалі, енергетичне положення відповідних рівнів в забороненій зоні. Загальні правила поведінки дефектів при іонізації.

ПЕРЕЛІК ЗАДАЧ НА СКЛАДАННЯ АПРОКСИМАЦІЙНИХ ДІАГРАМ

(практичні заняття зі спецкурсу
„Дефекти в напівпровідниках”)

А. Температурна залежність концентрації точкових дефектів в кристалі М

№	lg (початк. [] дефектів) в I обл., см ⁻³						Ентальпія (Н) або енергія (Е) утворення ТД (eВ)
	e ⁻	h ⁺	V _M ⁰	V _M ⁻	M _i ⁰	M _i ⁺	
1	16	16	12	15	-	-	E ₁ =1.0, H ₂ =2.0, E ₄ =0.1
2	13.5	15	12	15	13	14	E ₁ =0.8, H ₂ =1.0, H ₃ =2.2, E ₄ =0.3, E ₅ =0.1
3	15	15	10	-	13	14	E ₁ =0.6, H ₂ =1.0, H ₃ =1.9, E ₅ =0.1
4	15.5	14	11.5	-	13	15.5	E ₁ =1.0, H ₂ =1.6, H ₃ =2.2, E ₅ =0.3
5	15	14	12	-	13	15	E ₁ =1.5, H ₂ =1.5, H ₃ =2.0, E ₅ =0.1
6	14	14	11	13	10	12	E ₁ =0.6, H ₂ =0.4, H ₃ =0.5, E ₄ =1.2, E ₅ =0.8

Б. Залежність концентрації ТД в кристалі М від lg тиску пари домішки (P_D, P_A)

№	lg (початк. [] дефектів) в I обл., см ⁻³										Домішка
	e ⁻	h ⁺	V _M ⁰	V _M ⁻	M _i ⁰	M _i ⁺	D _M ⁰	D _M ⁺	A _M ⁰	A _M ⁻	
1	16	16	12	15	-	-	13	14	-	-	D _M -донор
2	15	14	13	-	12.5	15	-	-	12	13.5	A _M -акц.
3	13	15	11	15	12	14	12.5	13.5	-	-	
4	14	14	12	13	11	12.5	-	-	10	11.5	
5											
6											

Б. Залежність концентрації ТД в кристалі CdTe від lg тиску пари Кадмію (P_{Cd})

№	lg (початк. [] дефектів) в I обл., см ⁻³										Прим.
	e ⁻	h ⁺	V _{Cd} ⁰	V _{Cd} ⁻	V _{Cd} ²⁻	Cd _i ⁰	Cd _i ⁺	Cd _i ²⁺	Cu _{Cd} ⁻	In _{Cd} ⁺	
1	14	17.5	17	17.5	-	10	15	-	-	-	
2	15	17.5	16.5	17.5	-	10	11	-	-	-	
3	14	17.5	16.5	17.5	-	11	12	15	-	-	
4	15.5	17.5	16	17.5	15.5	12	-	15	-	-	
5	15	17.5	16	16.5	17.2	12	13.5	-	-	-	
6	15	17.5	16	16.5	17.2	12	14	-	-	-	
7	13	17.5	16	17.2	12	14	15	-	-	-	
8	14	17	16	17	14	11	12	12	-	-	
9	14	17.5	16	17.5	14.5	11	-	15	-	-	
10	14	17	16	17	15	-	-	13	16	-	Акц.
11	14	17	16	17	15	-	-	13	-	16.5	Дон.
12	13	17	15	17	16	10	14	13.5	-	-	

ДОДАТКОВО

СПИСОК ЗАДАЧ ДЛЯ СПЕЦКУРСУ “ДЕФЕКТИ В Н/П”

1. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки P_A, приймаючи для початку інтервалу такі величини концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e⁻ - 14; h⁺ - 13; V_M⁻ - 10; V_M⁻ - 12,5; M_i^x - 11; M_i⁺ - 14; A_M^x - 9; A_M⁺ - 12. Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.
2. Побудувати для кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрацій дефектів від оберненої Т, приймаючи для початкової Т такі значення логарифмів концентрацій дефектів (ат/см.куб.) e⁻ - 15; h⁺ - 15; V_M^x - 11; M_i^x - 12; M_i⁺ - 13. Величини E_i(H_i) використати : E₁=0,8 eV, H₂=1,0 eV, H₃=2,0 eV, E₅=0,1 eV
3. Побудувати для кристалу телуриду кадмію апроксимаційну діаграму ВТРД: логарифмічну залежність концентрації дефектів від тиску пари кадмію, приймаючи такі вихідні логарифми концентрації дефектів (ат/см.куб.): e⁻ - 15; h⁺ - 17,5; V_{Cd}^x - 16,5; V_{Cd}⁻ - 17,5; Cd_i^x - 12; Cd_i⁺ - 14 ; Cd_i²⁺ - 13.
4. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки А (P_A), приймаючи такі вихідні логарифми концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e⁻ - 14; h⁺ - 15; V_M^x - 11; V_M⁻ - 15; M_i^x - 12; M_i⁺ - 13,5; A_M^x - 10; A_M⁺ - 13. Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.
5. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД : залежності логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки P_B для кристалу М, легованого домішкою В при таких вихідних логарифмах концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e⁻ - 16; h⁺ - 13,5; V_M^x - 12; V_M⁻ - 14; M_i^x - 15; M_i⁺ - 16; V_M^x - 10; V_M⁻ - 13.

Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.

6. Побудувати для кристалу телуриду кадмію апроксимаційну діаграму ВТРД : залежність логарифмів концентрацій дефектів від тиску пари кадмію P_{Cd} приймаючи такі вихідні логарифми концентрації дефектів (ат/см.куб.): e^- -15; h^+ -17; V_{Cd}^x -12 ; V_{Cd}^- -17; V_{Cd}^{2-} - 14; Cd_i^x -11; Cd_i^+ - 16; Cd_i^{2+} - 13.

7. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки P_B для кристалу М, легованого домішкою В при таких вихідних логарифмах концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e^- - 13; h^+ - 15; V_M^x - 11; V_M^- - 15; M_i^x -10; M_i^+ -14; B_M^x - 10,5; B_M^- - 12. Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.

8. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки P_A приймаючи для початку інтервалу такі величини концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e^- - 16; h^+ - 16; V_M^x - 12; V_M^- - 14,5; M_i^x - 13; M_i^+ -15; A_M^x - 11; A_M^+ -14. Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.

9. Побудувати для кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрацій дефектів від оберненої Т, приймаючи для початкової Т такі значення логарифмів концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e^- - 15; h^+ - 13; V_M^x - 10; M_i^x -11; M_i^+ - 15. Величини $E_i(H_i)$ використати: $E_1= 1,0$ eV, $H_2= 1,1$ eV, $H_3=1,5$ eV, $E_5=0,2$ eV.

10. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД :залежність логарифмів концентрації дефектів від тиску пари домішки P_B для кристалу М, легованого домішкою В при таких вихідних логарифмах концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e^- - 13; h^+ - 15; V_M^x - 11; V_M^- - 15; M_i^x -10; M_i^+ -14; B_M^x - 10,5; B_M^- - 12.Скласти таблицю з виразами для концентрацій дефектів (нахили ліній) в різних областях.

11. Побудувати для кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрації дефектів від оберненої Т, приймаючи для початкової Т такі величини логарифмів концентрацій дефектів (ат/см.куб.): e^- - 13; h^+ -15; V_M^x - 11; V_M^- -15; M_i^x - 12; Величини $E_i(H_i)$ використати: $E_1= 1,2$ eV, $H_2= 0,8$ eV, $H_3=1,0$ eV, $E_4=0,2$ eV.

12. Побудувати для кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: залежність логарифмів концентрацій дефектів від оберненої Т, приймаючи для початкової Т такі значення логарифмів концентрацій дефектів (ат/см.куб.) e^- - 13; h^+ - 13; V_M^x - 10; M_i^x -11; V_M^- -12. Величини $E_i(H_i)$ використати: $E_1=0,7$ eV, $H_2=0,9$ eV, $H_3=1,4$ eV, $E_4=0,1$ eV.

13. Побудувати для легованого кристалу М апроксимаційну діаграму ВТРД: логарифмічну залежність концентрації дефектів від тиску пари (P_A) домішки А, приймаючи, що при малих P_A вихідні логарифми концентрацій дефектів складають (ат/см.куб.): e^- -15; h^+ -15; V_M^x -12; V_M^- -13; M_i^x - 10; M_i^+ -11; A_M^x - 10,5; A_M^+ - 12.

Враховуючи, що, за винятком монографії Ф.Крегера, книжкова база дуже скупа, робочим планом лекцій передбачено вичитування повної програми. Для підготовки до контрольних робіт та іспиту студентам пропонується авторський „Конспект лекцій з курсу „Дефекти в напівпровідниках”. В якості ІНДЗ студентам пропонується: написати реферат про властивості точкових дефектів (з використанням наданої лектором літератури з доповненням її інформацією з Інтернету) – в 1 модулі; складати задачі на побудову апроксимаційних діаграм дефектних структур на основі як елементарних, так і бінарних напівпровідників – в 2-му модулі

КРИТЕРІЙ ОЦІНОК,

Що виставляються за модульний контроль зі спецкурсу
“Дефекти в напівпровідниках”

1. Кожне з 10-и питань оцінене певною кількістю балів, загальна їх сума складає 43 балів в (КР-1) та 40 балів (КР-2).
2. Оцінки виставляються таким кількостям набраних балів: “відмінно” – 90 % балів; “добре” – 75 % балів; “задовільно” – 60 % балів.
3. Кількість балів, яка нараховується за питання, визначається таким чином: Якщо на питання дана лише правильна відповідь (типу так/ні, або вказаний правильний варіант з альтернативних відповідей) і ніяких пояснень немає – то нараховується лише 50% від числа балів за це питання. Якщо додатково є певні, але неповні пояснення до відповіді – то 75%. Лише коли правильна відповідь супроводжується вичерпними поясненнями, тоді нараховується всі 100% балів за питання.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- 1.Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов. М.: Мир, 1968, 654 С,
2. Переш Є.Ю., Різак В.М., Семрад О.О. Хімія твердого тіла, т.1-2. Ужгород: “Закарпаття”, 2000
3. К. Бургуэн, М. Ланно. Точечные дефекты в полупроводниках. М.; Мир, 1985
4. Болтакс Б.И.. Диффузия и точечные дефекты в полупроводниках. М.:Наука, 1972, 384 с.
5. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М.: Высшая школа, 1983.
- 6.P.Fochuk, O.Korovyanko, O.Panchuk. High-temperature point defect equilibrium in CdTe modeling. J.Cryst. Growth, v.197, 1999, p.603-6.
7. P.Fochuk, O.Korovyanko, I.Turkevych a.o. Defect chemistry in CdTe<In> crystals. J.Cryst. Growth, 1999, v.207, p. 273-277.

1.1. Навчальна програма СПЕЦКУРСУ "ДЕФЕКТИ В НАПІВПРОВІДНИКАХ"

для спеціалістів та магістрів 5-го курсу хімічного факультету,
що спеціалізуються з неорганічної хімії

1. Вступ. Кристалічні та аморфні тіла. Ідеальні та реальні кристали. Дефекти в кристалах: точкові (нульмірні), лінійні (одномірні), поверхневі двомірні), об'ємні (трьохмірні).

2. Точкові дефекти. Електронні та атомні дефекти. Вакансії та міжвузлові атоми. Дефекти за Шотткі та Френкелем, механізм їх утворення. Тетраедричні та октаедричні пустоти в щільно-упакованих ГЦК. Антиструктурні дефекти в бінарних сполуках на прикладі CdTe.

3. Статистика точкових дефектів. Вільна енергія кристала. Ентропія термічна (коливна) та конфігураційна. Статистичний розгляд утворення дефекту за Шотткі в елементарному кристалі. Конфігурація вакансій як функція коливної та конфігураційної ентропії, а також ентальпії утворення вакансій. Способи обчислення цих величин. Утворення дефектів за Френкелем в елементарному кристалі. Концентрація цих дефектів як функція термодинамічних параметрів процесу. Термічні дефекти в бінарних істалах.

4. Теорія квазіхімічних реакцій між точковими дефектами в твердих тілах Крегера. Структурні елементи кристалу. Заряди вакансій Cd, Te в ґратці CdTe.

5. Дефекти в кристалах простих чистих речовин. Власні атомні і електронні дефекти. Повна рівновага дефектів. Власні дефекти в елементарному напівпровіднику „М”. Повне рівняння електро-нейтральності (РЕН). Метод Брокера апроксимації РЕН. Апроксимоване рівняння електронейтральності (АРЕН). Діаграми "концентрація дефектів - зворотна температура".

6. Дефекти в кристалах простих речовин, що містять домішки. Механізм впровадження атомів домішки. Дефекти в кристалах чистих бінарних сполук. Типи дефектів в них. Уявлення про способи розрахунку констант рівноваги. Ізотерми концентрації дефектів при високотемпературній рівновазі. Розгляд

системи рівнянь для CdTe. Дефекти в CdTe, що містять домішки одного типу. Значення теорії Крегера для синтезу кристалів заданими властивостями.

7. Ознайомлення з комп'ютерним моделюванням структури ТД в CdTe за допомогою пакета констант КХРД СН-5.

8. Лінійні дефекти - дислокації. Їх роль у поясненні механічних властивостей кристалів. Краєві дислокації. Механізм їх утворення. Екстраплощина та ядро дислокації. Вектор Бюргерса і контур Бюргерса. Ковзання краєвих дислокацій. Переповзання краєвих дислокацій. Роль точкових дефектів кристалу в переміщенні краєвих дислокацій. Гвинтова дислокація, її переміщення.

9. Вплив дислокацій на електричні властивості Ge, Si, CdTe. Введення та усунення дислокацій. Способи визначення густини дислокацій, роль ямок травлення в цьому.

ДОДАТКОВІ ПИТАННЯ (ДЛЯ МАГІСТРІВ)

10. Побудова апроксимаційних діаграм залежності концентрацій точкових дефектів від тиску пари Кадмію (у всьому інтервалі від мінімального до максимального значення), в CdTe, легваному фіксованими кількостями ($1 \cdot 10^{17}$ ат/см³) акцептора (Купрум) або простого донора (Індій), при 700, 800 та 900⁰ С.

12. Побудова діаграм (з повним розв'язком рівняння електронейтральності) залежності точкових дефектів від тиску пари Кадмію (у всьому інтервалі від мінімального до максимального значення), в CdTe, легваному фіксованими кількостями ($1 \cdot 10^{17}$, $1 \cdot 10^{18}$, $1 \cdot 10^{19}$ ат/см³) домішки Індію з врахуванням утворення асоціатів А⁻. Використати набір констант КХРД СН-5, програму розрахунків „Marle”. Побудувати графік та таблицю цифрових результатів.

12. Побудова (з користуванням комп'ютерною програмою) діаграм (з повним розв'язком рівняння електро-нейтральності) залежності точкових дефектів від температури (600-900⁰С) при концентрації Індію $1 \cdot 10^{19}$ ат/см³ та значеннях P_{Cd} 10^{-3} та 10^{-2} атм. Побудувати графік та таблицю цифрових результатів.

1.2. Тексти ККР

Тексти готові, знаходяться у лектора

1.3. Рецензія на пакет ККР (вкласти)

1.4. Критерії оцінювання виконання завдань ККР

1. Результати ККР оцінюються сумарно в умовних 100 балів, при цьому відповідь на 1-е і 2-е питання оцінюється максимум в 50 балів.
2. Якщо відповідь на питання повна і розкриті повністю або майже повністю, то виставляється оцінка “відмінно” – 90%-100% балів; “добре” – 75%- 89% балів – якщо питання в основному питання розкриті, проте не висвітлені деякі істотні деталі, або є інші недоліки, які не є принциповими.
“задовільно” – 60% - 74% балів – у випадку, коли відповідь загалом не розкриває питання, проте автор має загальне уявлення про його суть.
„незадовільно” (59% балів або менше) – якщо автор плутає основні моменти питання (не зумів розв’язати задачу), тобто не має чіткого уявлення про матерію питання.

1.5. Перелік довідкової літератури.

Користування довідковою літературою не передбачено, дозволяється тільки наявність набору рівнянь КХРД для напівпровідника „М” та (окремо) кристалу CdTe.