

В.В. Прокопів<sup>1</sup>, І.В. Горічок<sup>1</sup>, Т.О. Семко<sup>1</sup>, Р.О. Дзумедзей<sup>1</sup>,  
Г.Д. Матеїк<sup>2</sup>, О.І. Хшановська<sup>1</sup>

## Термодинамічний аналіз дефектної підсистеми кристалів плюмбум телуриду з домішкою оксигену

<sup>1</sup>Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, ул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ,  
76018, Україна, E-mail: [fcss@pu.if.ua](mailto:fcss@pu.if.ua)

<sup>2</sup>Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, вул. Карпатська, 15, м. Івано-Франківськ,  
76000, Україна

Досліджено електрофізичні властивості (питома електропровідність, коефіцієнт термо-ЕРС, ефект Холла) плюмбум телуриду отриманого пресуванням порошку. При цьому порошок попередньо проходить термічну обробку при 300 оС на повітрі для насичення його оксигеном. Для інтерпретації отриманих експериментальних даних запропоновано модель дефектної підсистеми легованих оксигеном кристалів плюмбум телуриду.

**Ключові слова:** плюмбум телурид, легування, пресування, термо-ЕРС.

*Стаття постуила до редакції 11.02.2019; прийнята до друку 15.03.2019.*

### Вступ

Плюмбум телурид – напівпровідниковий матеріал групи А4В6, який використовується для створення термоелектричних перетворювачів енергії [1-3]. Особливо ефективними є матеріали отримані методом пресування порошку, що з одного боку дозволяє відносно незалежно керувати електронною та фононною підсистемою, а з іншого – створювати зразки потрібного розміру і форми. Крім того, пресовані матеріали на основі РbТе характеризуються кращими механічними властивостями у порівнянні з монокристалічними [4-6].

При використанні методу пресування порошку для отримання термоелектричних матеріалів значно зростає кількість технологічних операцій необхідних для отримання термоелемента готового для дослідження чи практичного використання. Незважаючи на те, що переважно всі ці процедури проводяться у захисній атмосфері інертного газу, повністю уникнути взаємодії матеріалу з атмосферним киснем складно. Тому дослідження впливу оксигену на властивості РbТе є актуальною задачею.

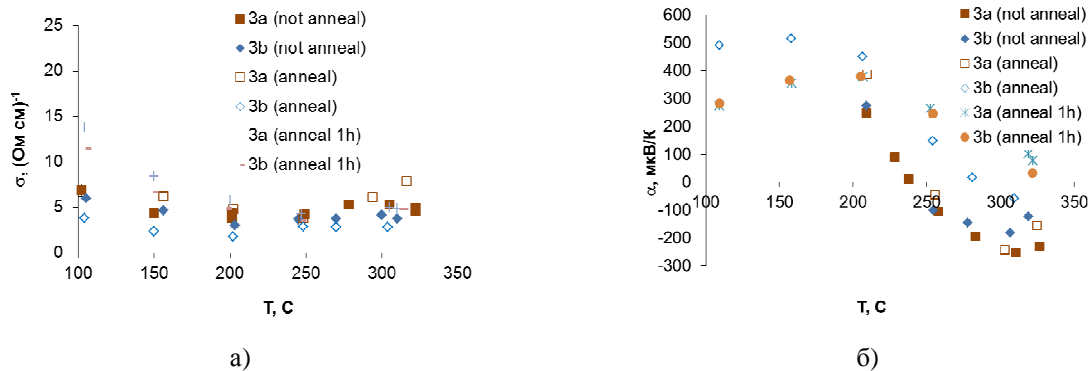
У роботах [7-8] показано, що дифузія оксигену у РbТе може призводити до виникнення приповерхневих областей р-типу провідності з концентрацією носіїв  $\approx 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Товщина цього шару залежатиме від часу експозиції, температури і

може становити десятки мікрометрів, що є величиною співмірною з розміром зерен РbТе, що використовуються для пресування термоелементів. Завданням даної роботи було отримати зразки методом пресування з порошку відпаленого на повітрі, провести вимірювання концентрації носіїв у них та запропонувати модель дефектної підсистеми для інтерпретації отриманих даних.

### I. Методика експерименту

Синтез досліджуваних напівпровідникових матеріалів проводили методом сплавлення компонентів у вакуумованих ампулах з кварцового скла марки Рігех. Ампули виготовляли з трубок зовнішнім діаметром 20 мм та товщиною стінки 2 мм. Перед завантаженням шихти ампули піддавали травленню сумішшю азотної та соляної кислот. Для синтезу використовували речовини виробництва AlfaAesar чистотою 99,999 %. Відкачування здійснювали до тиску  $10^{-4}$  Па з використанням вакуумного поста HiCubeEco.

Вакуумовану ампулу з шихтою поміщали горизонтально у муфельну піч Naberzerm, що дозволяла проводити всі процедури нагріву-охолодження автоматично. Синтез проводили у кілька етапів: нагрів до 500 °С і витримка 1 год, нагрів до 700 °С і витримка 3 год, нагрів до 1020 °С і витримка 1 год, охолодження до 900 °С і витягування



**Рис. 1.** Температурні залежності питомої електропровідності  $\sigma$  (а) та коефіцієнта термо-ЕРС  $\alpha$  (б) зразків пресованих з порошку відпаленого на повітрі при 350 °С 2 год. Тиск пресування 1.5 ГПа (notanneal – невідпалені зразки, anneal – зразки відпалені при 500 °С 15 хв, anneal 1h – зразки відпалені при 500 °С 1 год).

з печі.

Зразки для вимірювання електрофізичних параметрів отримували методом пресування порошку, який отримували розмелюванням синтезованих злитків у агатовій ступці. Відпал порошків на повітрі проводили у посудині з кварцового скла. Для пресування зразків відбирались фракції розміром (50 - 500) мкм.

Тиск пресування зразків становив 1,5 ГПа. Діаметр пресованих зразків становив 5 або 8 мм (в залежності від необхідних вимірювань), а співвідношення висоти до діаметру –  $\approx 1:1$ . Отримані зразки відпалювались в аргоні при температурі 500 °С.

Методика вимірювання електрофізичних параметрів та ефекту Холла детально описана в [9].

## II. Результати експерименту та їх аналіз

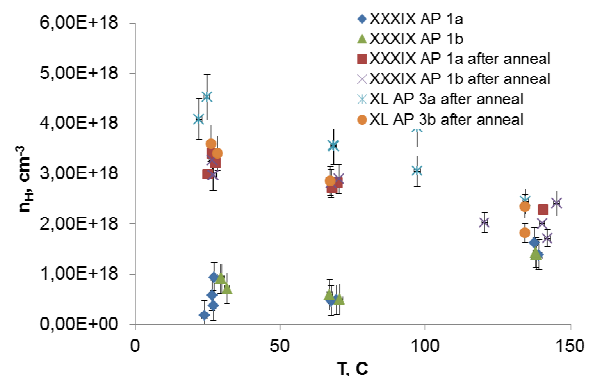
Зразки пресовані з порошку, що відпалювався на повітрі при температурі 200 °С впродовж 5 год демонстрували відмінні властивості, що може бути свідченням незавершеності дифузійних процесів за такої температури та часу відпалу. Підвищення температури відпалу порошку до 350 °С (час – 2 год, також в процесі нагріву і охолодження порошок знаходився у печі) значно зменшує його питому електропровідність, без зміни якісної залежності  $\sigma(T)$  у порівнянні з пресованими зразками PbTe отриманого з не відпаленого порошку [7]. Коефіцієнт термо-ЕРС, при цьому, майже не змінився (у порівнянні з зразком із не відпаленого порошку) (рис. 1).

Після відпалу двох однаково приготовлених зразків 15 хв при температурі 500 °С їх провідність та коефіцієнт термо-ЕРС дещо відрізнялися між собою. Після подовження часу відпалу до 1 год відмінності були відсутні. Важливо, що концентрація носіїв у зразках була однакова вже після відпалу 15 хв.

З рис. 2. видно, що відпал порошку не змінює концентрації носіїв у зразку, якщо сам зразок не

відпалювати. Її температурна залежність і кількісно і якісно є аналогічною до зразків отриманих з не відпаленого порошку [7]. Проте, після відпалу самого зразка температурна залежність концентрації носіїв є подібною до відпалених зразків з не відпаленого порошку, але числові значення  $n_H$  – вищі. Такий приріст холлівської концентрації, причому практично однаковий для двох температур відпалу порошку, може свідчити про підвищення дефектності за рахунок взаємодії з оксигеном.

Рентгенографічно оксидних фаз на відпалених порошках не виявлено, а параметр елементарної комірки після відпалу дещо зменшився: для не відпаленого порошку PbTe – 6,45866(14) Å, а відпаленого на повітрі при 350 °С (3год) – 6,45815(15) Å. Отже, відпал порошків для пресування на повітрі, з одного боку, призводить до зменшення їх питомої електропровідності, а з іншого, до збільшення концентрації носіїв у них. Зменшення провідності зразків виглядає закономірним і



**Рис. 2.** Залежність холлівської концентрації носіїв від температури для зразків пресованих з порошку відпаленого на повітрі при 200 °С 5 год (зразки XXXIX AP: 1a,1b – зразки не відпалені, 1a afteranneal, 1b afteranneal – зразки відпалені при 500 °С 15 хв ) та 350 °С 3 год (зразки XL AP: 3a afteranneal, 3b afteranneal – зразки відпалені при 500 °С 15 хв). Тиск пресування 1,5 ГПа.

зумовлено, найвірогідніше, зменшенням рухливості, через потенціальні бар'єри на границях кристалітів. Ріст концентрації носіїв може бути інтерпретовано в рамках моделі дефектної підсистеми кристалів РbТе:О.

### III. Термодинаміка точкових дефектів плюмбум телуриду з домішкою кисню

Концентрації точкових дефектів у кристалі р-типу провідності при заданій температурі Т можуть бути визначені з умови мінімуму вільної енергії кристала [10]:

$$F = F_0 + (E_{O_{Te}^0} + F_{vib, O_{Te}^0})[O_{Te}^0] + (E_{O_i^-} + F_{vib, O_i^-})[O_i^-] + (E_{V_{Pb}^{2-}} + F_{vib, V_{Pb}^{2-}})[V_{Pb}^{2-}] - TS_k - \mu p \quad (1)$$

де  $F_0$  – вільна енергія, що не залежить від наявності дефектів,  $E$  – енергія утворення дефекту,  $F_{vib}$  – вільна коливна енергія дефекту,  $[D]$  – концентрації дефекту D,  $p$  – концентрації дірок,  $S_k$  – конфігураційна ентропія,  $\mu$  – хімічний потенціал.

Літературні дані про енергії утворення дефектів заміщення  $O_{Te}$ , відсутні. Для їх оцінки було використано формулу:

$$E(O_{Te}) = 6(E_Z^{PbTe} - E_Z^{PbO}), \quad (2)$$

де  $E_Z^{PbTe}$  та  $E_Z^{PbO}$  – енергії одного зв'язку у плюмбум телуриді та плюмбум оксиді. Множник перед дужками – кількість зв'язків, які утворює атом у структурі NaCl з найближчими сусідами. Використовуючи дані [11], енергія утворення дефектів заміщення  $O_{Te}$   $E(O_{Te}) = 4,84 - 5,02 = -0,18$  (eВ)

Вільна коливна енергія дефекту заміщення [10]

$$F_{vib} = x \cdot 3kT \ln \left( \frac{\omega}{\omega_0} \right), \quad (3)$$

де  $x$  – кількість атомів, що змінили частоту своїх коливань з  $\omega_0$  на  $\omega$ . Зміна частот коливань атомів в околі дефекту заміщення  $O_{Te}$  визначалась за формулою [12]:

$$\frac{\omega}{\omega_0} = \frac{T_0 \theta_{PbTe}}{T_{PbTe} \theta_O} = \frac{54,5 \cdot 125}{1190 \cdot 155} \approx 0,04 \quad (4)$$

тут  $T_0$ ,  $T_{PbTe}$  – температури плавлення,  $\theta_O$ ,  $\theta_{PbTe}$  – температури Дебая для кристалів кисню та плюмбум телуриду. Зважаючи на те, що  $\omega_0 / \omega \ll 1$ , то  $F_{vib}$  є від'ємною величиною, а отже, утворення таких дефектів є енергетично вигідним кристалу (при  $T = 1000$  К,  $F_{vib} \approx -5$  eВ).

Для міжвузлового атома кисню провести аналогічну оцінку енергії утворення дефекту складно, тому дана величина, а також  $\omega/\omega_0$  вважалась варіаційними параметрами. Слід зазначити, що для визначення вільної коливної енергії міжвузлового атома у формулі (3) справа від знаку рівності повинен бути врахований доданок  $3kT \ln \left( \frac{T_0}{T} \right) - kT$  [10], де  $T_0$  – температура Дебая РbТе.

Мінімізацію функції (1) необхідно проводити з урахуванням умови

$$[O_{Te}^0] + [O_i^-] = O_{tot} \quad (5)$$

Конфігураційна ентропія кристалу, при наявності дефектів у катіонній та аніонній підгратках, а також у міжвузлових порожнинах, визначатиметься як:

$$S_k = S_{k,c} + S_{k,a} + S_{k,i} \quad (6)$$

де:

$$S_{k,c} = k \ln(N_c \ln N_c - [V_{Pb}^{2-}] \ln[V_{Pb}^{2-}] - (N_c - [V_{Pb}^{2-}]) \ln(N_c - [V_{Pb}^{2-}]))$$

$$S_{k,a} = k \ln(N_a \ln N_a - [O_{Te}^0] \ln[O_{Te}^0] - (N_a - [O_{Te}^0]) \ln(N_a - [O_{Te}^0]))$$

$$S_{k,i} = k \ln(N_i \ln N_i - [O_i^-] \ln[O_i^-] - (N_i - [O_i^-]) \ln(N_i - [O_i^-]))$$

Хімічний потенціал вільних носіїв заряду можна визначити з рівняння електронейтральності, представленою у вигляді:

$$-2[V_{Pb}^{2-}] - 2[O_i^-] = -N_h a e^{-\frac{E_g + \mu}{kT}}$$

Звідки:

$$\mu = -E_g - kT \ln \frac{2[V_{Pb}^{2-}] + 2[O_i^-]}{N_h}$$

Тоді:

$$\mu p = \left( -E_g - kT \ln \frac{2[V_{Pb}^{2-}] + 2[O_i^-]}{N_h} \right) (2[V_{Pb}^{2-}] + 2[O_i^-])$$

Для проведення процедури мінімізації вільної енергії необхідно знайти похідні від (1) по кожному з дефектів, прирівняти їх до нуля та розв'язати отриману систему рівнянь. Остаточні вирази для розрахунку концентрацій точкових дефектів мають вигляд:

$$[O_{Te}^0] = N_a \exp \left( -\frac{E_{O_{Te}^0} + F_{vib, O_{Te}^0}}{kT} \right). \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & ([V_{Pb}^{2-}]) (2[V_{Pb}^{2-}] + 2[O_i^-])^2 = \\ & = N_c N_h^2 \exp \left( -\frac{E_{V_{Pb}^{2-}} + F_{vib, V_{Pb}^{2-}} - 2kT - 2E_g}{kT} \right). \end{aligned} \quad (8)$$

$$[O_i^-] = O_{tot} - [O_{Te}^0] \quad (9)$$

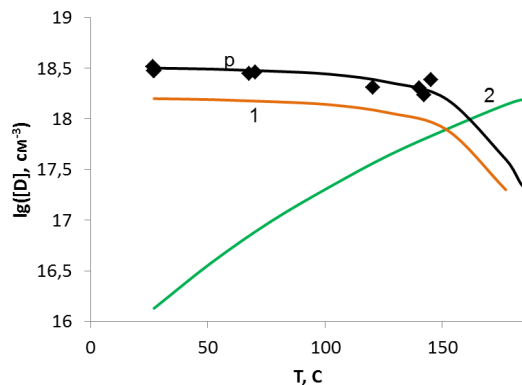
Таким чином, з рівняння (7) отримуємо концентрацію атомів кисню у вузлах телуру; знаючи її, а також  $O_{tot}$ , з рівняння (8) визначаємо концентрацію міжвузлових атомів кисню; при відомому  $[O_i^-]$  з (8) визначаємо концентрацію вакансій плюмбуму. Рівняння (8), розв'язували чисельно, у середовищі MAPLE 14. З трьох можливих коренів – один дійсний (фізичний) і два комплексно спряжені. Термодинамічні параметри вакансії плюмбуму визначено у роботі [13].

На рисунку 3 представлено результати розрахунку залежності концентрацій точкових дефектів та дірок від температури для РbТе:О. Експериментальні точки – дані вимірювання для зразка XXXIX 1b отриманого пресуванням порошку, який відпалювали на повітрі. Значення  $O_{tot}$  варіювалось для досягнення найкращого узгодження розрахункової кривої з експериментальними даними  $p(T)$ . Отримане найоптимальніше значення становить  $O_{tot} = 1,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

Таблиця 1

Параметри елементів [11] та розраховані деформаційні вклади в енергію утворення комплексів				
Елемент	$\chi$ , ГПа <sup>-1</sup>	$r_{cov}$ , А	$r_{ion}(2-)$ , А	$\Delta E^*$ , еВ
Pb	0,025	1,47	1,12 (2+)	0,26 0,55
Te	0,048	1,40	1,92 (2-)	
O	0,455	0,73	1,16 (2-)	

\* – два значення відповідають розрахунку з використанням ковалентного та іонного (2-) радіусів, відповідно.



**Рис. 3.** Залежність концентрації дірок  $p$  і точкових дефектів (1 –  $O_i^-$ , 2 –  $O_{Te}^0$ ) від температури у кристалах п्लомбум телуриду з домішкою оксигену ( $O_{tot} = 1,6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ).

Концентрації вакансій п्लомбуму на рисунку не приведені, оскільки дані числові значення знаходились на рівні  $10^{12} \text{ см}^{-3}$ . Отже, домінуючим точковим дефектом, який визначає температурну залежність вимірюваної холлівської концентрації у діапазоні температур (30 - 150) °C є міжвузлові атоми оксигену. З ростом температури їх концентрація зменшується, а концентрація дефектів заміщення  $O_{Te}$  – зростає. При температурі 150 °C концентрація останніх починає переважати концентрацію міжвузлових атомів. Проте, в даному температурному діапазоні для більш коректного визначення типу домінуючого дефекту та його концентрації варто було б врахувати активну генерацію власних носіїв заряду.

На основі отриманих розрахункових залежностей можна припустити, що дифузія атомів оксигену вглиб приповерхневого шару здійснюється по міжвузлових позиціях де й локалізуються термодинамічно рівноважні дефекти  $O_i^-$ . Попри значно меншу енергію утворення дефекти заміщення  $O_{Te}$  не можуть утворюватись при даній температурі оскільки для цього необхідним є вихід атома телуру з свого вузла, а енергія цього процесу становить близько 3 еВ [13], тобто є досить високою. Такий висновок, зокрема підтверджується і низькою концентрацією вакансій п्लомбуму, для яких енергія утворення теж становить  $\approx 3 \text{ еВ}$  [13]. З підвищенням температури, ймовірність виходу атомів телуру зі свого вузла зростає, що сприяє росту концентрації дефектів заміщення  $O_{Te}$ , існування яких, згідно вище

проведеного розрахунку, є енергетично більш вигідним для кристалу.

Проте, дана модель не може пояснити зменшення параметра елементарної комірки для зразків отриманих з порошку, що відпалювався на повітрі. Відмінність радіусів оксигену та телуру створює передумови для виникнення вакансій у найближчому до атома заміщення вузлі, тобто утворення дефектного комплексу  $O_{Te}-V_{Pb}$ . Його існування могло б пояснити спостережувані закономірності для величини  $a$ .

Енергія утворення комплексу «домішковий атом – вакансія п्लомбуму» може бути визначена за теорією, запропонованою у [14]. Вкорінення домішки у вузол ґратки спричинює виникнення локальних деформацій навколо дефекту через неоднаковість радіусів основного атома і атома заміщення. Ці деформації змінюють енергію утворення вакансії у околі дефекту, і цю зміну кількісно можна визначити за формулою [14]:

$$\Delta E \approx \frac{6\pi(r_{Te} - r_O)^2 r_O}{z(1 - \alpha)x_{Te}}, \quad \alpha = \frac{(1 + \eta)x_{Te}r_O}{2(1 - \eta)x_{O}r_{Te}} \quad (10)$$

$r_{Te}$ ,  $r_O$  – ковалентні радіуси домішкового атома та атома що заміщується,  $x_O$  і  $x_{Te}$  – стискуваності домішкового атома та атома що заміщується,  $\eta$  – коефіцієнт Пуассона основної речовини ( $\eta_{PbTe} = 0,67$  [15]).

Якщо дефекти, які утворюють комплекс іонізовані, то необхідно враховувати електростатичну енергію їх взаємодії:

$$\Delta E_K = \frac{z_{V_{Te}} z_{Ln_{Pb}} \cdot e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r}, \quad (11)$$

де  $z_i$  – заряди дефектів,  $r$  – відстань між ними. Проте, оксиген у вузлі телуру, найімовірніше, перебуває у електронейтральному стані, тому даний доданок не є актуальним.

З іншого боку, у випадку моделі чисто іонного зв'язку відносно кристалічної ґратки оксиген у аніонній підґратці повинен мати заряд -2, а отже між даним атомом та двократно негативно іонізованою вакансією свинцю може виникати електростатичне відштовхування. Але, зважаючи на високу статичну діелектричну проникність  $\epsilon(PbTe) = 400$  [16] (а для розрахунку необхідно використовувати саме статичну діелектричну проникність [14])  $\Delta E_K = 0,02 \text{ еВ}$ , що практично не впливатиме на результат розрахунку. Відстань між дефектами приймалась рівною міжатомній відстані у ідеальному кристалі  $PbTe$  ( $r(V_{Pb}-O_{Te}) \approx 3,23 \text{ \AA}$ ).

Згідно проведеного розрахунку (табл. 1) енергія утворення комплексу (тобто, енергетичний вигравш при його утворенні) становить 0,26 еВ при використанні для розрахунку ковалентного радіусу, чи 0,55 еВ при використанні іонного радіусу. Такі значення енергій утворення комплексів свідчать про те, що їх концентрації можуть бути високими.

## Висновки

1. При відпалі порошку PbTe на повітрі за температури 300 °С атоми кисню активно взаємодіють з ним, дифундуючи вглиб та підвищуючи концентрацію дірок. Даний процес характеризується виходом на насичення за певних технологічних параметрів відпалу, а максимальні спостережувані концентрації носіїв становлять  $(4,0-5,0) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

2. Експериментально вимірювані температурні залежності концентрації носіїв можуть бути пояснені в рамках моделі, що враховує локалізацію атомів кисню у міжвузлових позиціях або у аніонних вузлах. При цьому, слабка температурна залежність  $n_{\text{H}}(T)$  може бути зумовлена зміною домінуючого механізму входження атомів кисню зі зміною

температури.

3. Для глибшого аналізу дефектної підсистеми кристалів PbTe:O необхідним є проведення розрахунків з використанням моделі, що враховує утворення дефектного комплексу  $V_{\text{Pb}}\text{-O}_{\text{Te}}$ , розрахунок енергій утворення якого дає підстави вважати, що концентрації даних дефектів можуть бути співмірними з концентраціями інших домінуючих точкових дефектів.

*Робота виконана в рамках виконання проектів за державним замовленням МОН України, державні реєстраційні номери 0117U006425 та 0119U100062.*

**Прокопів В.В.** – професор, кандидат фізико-математичних наук, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;

**Горічок І.В.** – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник;

**Семко Т.О.** – кандидат фізико-математичних наук;

**Дзумедзей Р.О.** – науковий співробітник;

**Матеїк Г.Д.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент;

**Хшановська О.І.** – магістрант.

- [1] Л.И. Анатычук, Термоэлементы и термоэлектрические устройства: Справочник (Наукова думка, Київ, 1979).
- [2] А.О. Епремян, В.М. Арутюнян, А.И. Ваганян, International scientific journal for alternative energy and ecology 5 (25), 7 (2005).
- [3] А.В. Дмитриев, И.П. Звягин, УФН 180 (8), 821 (2010) (DOI: 10.3367/UFNr.0180.201008b.0821).
- [4] Е.П. Сабо, Термоэлектричество (3), 30 (2000).
- [5] А.В. Кузнецов, С.Д. Летюченко, В.В. Моцкін, Термоэлектрика (2), 43 (2002).
- [6] Li-Dong Zhao, Vinayak P. Dravid, and Mercouri G. Kanatzidis, Energy Environ. Sci., 7, 251–268, (2014).
- [7] I.V. Horichok, V.V. Prokopiv, R.I. Zapukhlyak, O.M. Matkivskiy, T.O. Semko, I.O. Savelikhina, T.O. Parashchuk, Journal of Nano- and Electronic Physics, 10(5), 05006 (2018) (DOI: 10.21272/jnep.10(5).05006).
- [8] I.V. Horichok, M.O. Galushchak, T.O. Semko, O.M. Matkivskiy, R.O. Dzumedzey, Physics and Chemistry of Solid State, 19(2), 317 (2018) (DOI: 10.15330/pcss.19.2.147-150).
- [9] I. V. Horichok, I. M. Lischynskyy, S. I. Mudryy, A. S. Oberemok, T. O. Semko, I. M. Hatsevych, O.M. Matkivskyy, G. D. Mateyik, R. O. Dzumedzey, SEMST, 14 (3), 53 (2017) (DOI: 10.18524/1815-7459.2017.3.105564).
- [10] І.В. Горічок Термодинаміка і кристалохімія точкових дефектів у бездомішкових та легованих галогенами (Cl, Br, I) кристалах кадмій телуриду. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.21 – хімія твердого тіла. Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника. (Івано-Франківськ, 2010).
- [11] С. С. Бацанов, Структурная химия. Факты и зависимости (Диалог-МГУ, Москва, 2000).
- [12] В.В. Светухин, С.В. Булярский, Д.В. Санчишин, Письма в ЖТФ 30 (6), 9 (2004).
- [13] D.M. Freik, I.V. Horichok, M.V. Shevchuk, L.V. Turovska, Physics and Chemistry of Solid State 12(2), 378 (2011).
- [14] А. Сакалас, З. Янушкевичюс, Точечные дефекты в полупроводниковых соединениях (Наука, Москва, 1988).
- [15] Л. А. Сергеева, НМ 16(8), 1346 (1980).
- [16] Ю.Н. Равич, В.А. Ефимова, В.А. Смирнова, Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS (Наука, Москва, 1968).

V.V. Prokopiv<sup>1</sup>, I.V. Horichok<sup>1</sup>, T.O. Semko<sup>1</sup>, R.O. Dzumedzey<sup>1</sup>,  
G.D. Mateik<sup>2</sup>, O.I. Khshanovska<sup>1</sup>

## Thermodynamic Analysis of the Defective Subsystem of Lead Telluride Crystals with Impurity of Oxygen

<sup>1</sup>Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine, E-mail: [fcss@pu.if.ua](mailto:fcss@pu.if.ua)

<sup>2</sup>Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, 15, Karpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine.

Electrophysical properties (specific conductivity, Seebeck coefficient, Hall effect) of the lead telluride obtained by pressing of the powder were investigated. In this case, the powder was pre-heat treated at 300 oC in the air to saturate it with oxygen. To interpret the experimental data obtained, a model of a defect subsystem of crystals of lead telluride with impurity of oxygen is proposed.

**Keywords:** Lead telluride, doping, pressing, Seebeck coefficient.