

УДК 631.315.592

**РОЛЬ АТОМОВ СЕРЕБРА ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ШИРИНЫ
ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В ТЕЛЛУРИДЕ СЕРЕБРА**

Ф.Ф.АЛИЕВ*, **Р.А.ГАСАНОВА***, **Э.Р.ГАСАНОВ**, **Т.Ф.ЮСИФОВА***
Бакинский Государственный Университет Баку
**Институт Физики НАН Азербайджана,*
farzali@physics.ab.az

В работе проведен расчет для определения ширины запрещенной зоны E_g в зависимости от концентрации дефектов в n - и p - Ag_2Te , а также анализированы температурные зависимости кинетических свойств с учетом E_g . Установлено, что при значениях E_g -0.054эВ для n - Ag_2Te и, E_g =0.035эВ для p - Ag_2Te расчетные и экспериментальные результаты согласуются. Выявлена связь между шириной запрещенной зоны полупроводника и плотности дефектов, возникающих за счет ионов и вакансии атомов серебра в подрешетке Ag_2Te .

Ключевые слова: полупроводник, ширина запрещенной зоны, концентрация дефектов, подрешетка.

Среди кристаллов типа Ag_2B (где B – S, Se, Te) Ag_2Te занимает особое место, так как она в зависимости от концентрации дефектов является узкозонным и бесщелевым полупроводником. Поэтому дефекты сильно влияют на зонные параметры, а это, в свою очередь, влияет на явления переноса носителей заряда в целом.

Теллурид серебра также обладает аномально высокой униполярной ионной проводимостью [1], что существенно ускоряет диффузионные процессы, связанные с изменением состава в соответствующей подрешетке, т.е. важной особенностью Ag_2Te является собственная дефектность, которая существенно влияет на электронные и ионные процессы. С ростом температуры увеличивается число таких дефектов, что при определенной температуре приводит к структурному фазовому переходу. При фазовом переходе скачкообразно меняются все физические свойства Ag_2Te .

В работах [2-7] исследованы электрические и термоэлектрические свойства Ag_2Te , обусловленные поведением носителей заряда. В работе [8] показано, что в области гомогенности избыток Te в Ag_2Te приводит к p -типу, а избыток Ag - к n -типу проводимости. В работе [7] сообщалось, что атомы Ag в Ag_2Te создают мелкие донорные, а атомы Te - акцепторные уровни, расположенные от дна зоны проводимости на расстоянии $(0.002-7 \cdot 10^{-5})$ эВ и $0,030 - 7 \cdot 10^{-5} T$ эВ, соответственно. В литературе приводятся разные значения ширины запрещенной зоны (ε_g): 0.006[5], 0.035 [6], 0.058 [2], 0.113 [4], 0.19 [3], 0.7 эВ [9]. Поэтому возникает вопрос: чем обусловлен такой разброс ε_g в Ag_2Te ? Для этого, в первую очередь, надо выяснить за счет чего происходит расщепление энергетического спектра носителей заряда кристалла. По теории это может происходить либо за счет спин-орбитального взаимодействия, или за счет деформационного потенциала (дефекта) кристалла. Первый аспект обсуждался в работе [9], где авторы провели расчет зонной структуры Ag_2Te , сделали вывод, что он является полуметаллом с перекрытием зон около 0.1-0.2 эВ. В Ag_2Te предполагается интенсивное взаимодействие уровней-- 4d Ag с уровнями 5p Te . Существует небольшое перекрытие между зонами проводимости и валентной для Ag_2Te . В энергетическом диапазоне от уровня ниже уровня Ферми до 0.5-1.0 эВ плотность состояний очень низка. Взаимодействие между Ag и Te показывает ковалентный характер.

Экспериментальная часть

Нами были исследованы температурные зависимости электропроводности (σ), коэффициента Холла (R) и термоэдс (α_0) в n - и p - Ag_2Te (рис.1-3).

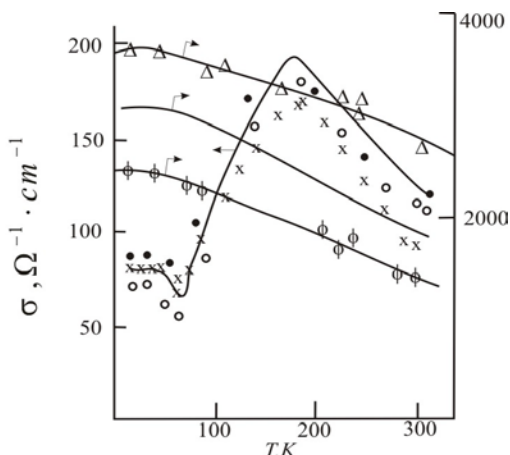


Рис.1. Температурная зависимость электропроводности в Ag_2Te .

Избыток Ag ат. % : \blacktriangle - 0.02; \triangle - 0.05

Избыток Te ат. % : x - 0.5; \circ - 0.6; \bullet - 0.75 ; стехиометрический состав - \emptyset

Установлено, что для *n*- Ag₂Te при $T < 10\text{K}$ величина σ не зависит от температуры (рис.1), затем с ростом T , она плавно уменьшается, а R во всей рассмотренной области температура остается постоянным (рис.2). В отличие от σ и R , термоэдс (α_0) с ростом температуры линейно увеличивается (рис.3). Из рис.1-3 видно, что при различных содержаниях Ag температурные зависимости σ , R и α_0 отличаются только количественно. На рис.1-3 также представлены зависимости $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ в *p*-Ag₂Te.

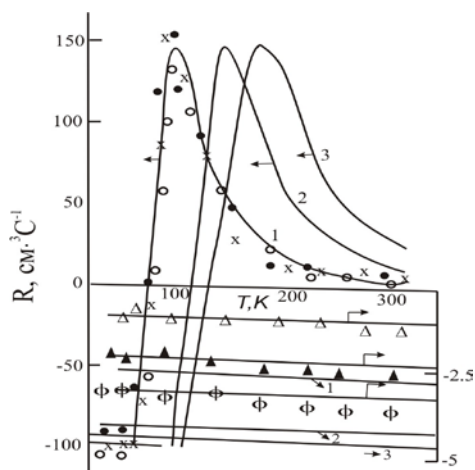


Рис.2. Температурная зависимость коэффициента Холла в Ag₂Te. Обозначения те же, что и на рис.1. Сплошные линии-расчетные при разных значениях E_g (эВ): для образца с избытком 0.75ат.% Te.-1-0.035; 2-0.054; 3-0.113; и для образца с избытком 0.02ат.% Ag 1'-0.054; 2'-0.113; 3'-0.035.

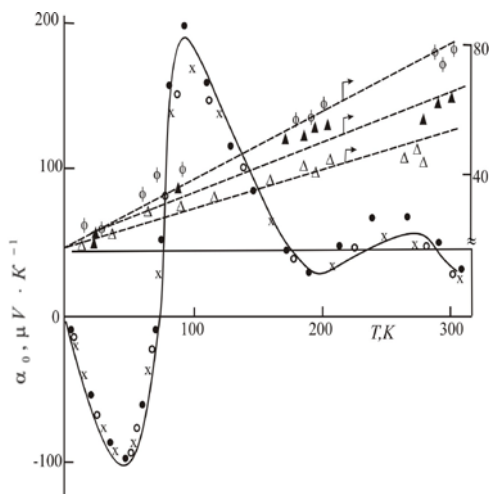


Рис.3. Температурная зависимость термо э.д.с в Ag₂Te. Обозначения те же, что и на рис.1.

Из рис 1-3 видно, что при $T \leq 40\text{K}$ σ не зависит от T , а при $T \approx 65\text{K}$ зависимость $\sigma(T)$ проходит через минимум. Коэффициент Холла R до 40K не зависит от температуры, выше 40K - уменьшается и при 65K меняет свой знак, (происходит p - n конверсия). Далее зависимость $R(T)$ при 80K проходит через минимум (рис.2). Для всех исследуемых образцов до 40K α_0 величины линейно растет с температурой, при 65K наблюдается инверсия его знака, а при 80K и 200K зависимость $\sigma(T)$ проходит через минимум (рис.3). На зависимостях $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ в p - Ag_2Te также наблюдается количественные отличия (подобно n - Ag_2Te), вернее при различных содержаниях Te значения σ , R заметно отличаются.

Полученные данные о $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ в n - и p - Ag_2Te , достаточно подробно обсуждались в работах [6,7,8]. Однако, в этих работах не анализированы причины сильного отличия значений ε_g . Для решения данного вопроса были проведены расчеты.

Метод расчета

Авторы [4] сообщают, что Ag_2Te характеризуется дефектами Френкеля- наличием полностью ионизированных атомов серебра Ag_i^0 и вакансий серебра в междоузлиях V_{Ag}^I , появляющихся за счет статически расположенных атомов Ag в подрешетке. Расхождения в стехиометрии δ на единицу объема описывается как [4]:

$$\delta = [\text{Ag}_i^0] - [V_{\text{Ag}}^I] = n - p, \quad (1)$$

где $[\text{Ag}_i^0]$, $[V_{\text{Ag}}^I]$ n и p - концентрации избыточного серебра и их вакансий, т.е. электронов и дырок. ЭДС связана с химпотенциалами μ по формуле Вагнера

$$\mu_{\text{Ag}(c)}^0 - \mu_{\text{Ag}_i^x} = EF, \quad (2)$$

где

$$\mu_{\text{Ag}_i^x} = \mu_{\text{Ag}_i^0} + \mu_n = \mu_{\text{Ag}^0} - \mu_p, \quad (3)$$

где $\mu_{\text{Ag}(c)}^0$, $\mu_{\text{Ag}_i^x}$, $\mu_{\text{Ag}_i^0}$, μ_n и μ_p , соответственно, химпотенциалы металлического серебра, нейтрального серебра, ионизированного серебра, электронов и дырок в теллуриде серебра, а F -число Фарадея. Величина μ_{Ag_i} согласно по уравнению, установленной для α - Ag_2Se [14]

$$\mu_{\text{Ag}_i^0} - \mu_{\text{Ag}_i}^0 = RT \ln \frac{[\text{Ag}_i^0]}{[\text{Ag}_i^0]^\theta} = -RT \ln \frac{[V_{\text{Ag}}^I]}{[V_{\text{Ag}}^I]^\theta}, \quad (4)$$

где θ -соответствует стехиометрическому Ag_2Se , а μ_n дается выражением [4]

$$\mu_n - \mu_n^\theta = RT \ln \frac{\gamma n}{\gamma^\theta n^\theta}, \quad (5)$$

где γ - коэффициент активации, вычисленный методом Розенберга [10] согласно,

$$\gamma = \frac{\sqrt{\pi}[\exp n; p]}{2[F_{1/2}(\eta); I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)]}, \quad (6)$$

где $\eta = \mu_n/k_0T$ - приведенный химпотенциал, $\beta = k_0T/\varepsilon_g$ - параметр характеризующий нестандартность зоны, $F_{1/2}(\eta)$ и $I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)$ - одно и двух-параметрические интегралы Ферми. Эти интегралы Ферми определяются согласно [11]

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{n\sqrt{\pi}}{4(2\pi m^* k_0 T \hbar^{-2})^{3/2}}; \quad I_{3/2,0}^0(\eta, \beta) = \frac{3\pi^2 \hbar^3 n}{(2m^* k_0 T)^{3/2}},$$

где m^* - эффективная масса носителей заряда.

Функции $F_{1/2}(\eta)$ и $I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)$ численно вычисляются в следующем виде: В случае квадратичного закона дисперсии и нереболическая зона любой степени вырождения коэффициент термоэдс в классически сильных магнитных полях выражается согласно [6-8]:

$$\alpha_\infty = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{5F_{3/2}(\eta)}{3F_{1/2}(\eta)} - \eta \right], \quad \alpha_\infty = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{I_{3/2,0}(\eta, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)} - \eta \right]. \quad (7)$$

Известно [12], что $\alpha_\infty = \alpha_0 + \Delta\alpha_\infty$, где $\Delta\alpha_\infty$ - магнитотермоэдс в классически сильном магнитном поле. В узкощелевых полупроводниках $\Delta\alpha_\infty$ составляет ~10-15% от величины α_0 [12]. Учитывая значения $\Delta\alpha_\infty$ в (7) можно рассчитать $F_{1/2}(\eta)$ и $I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)$.

Концентрация электронов (n) определяется по экспериментальным данным коэффициента Холла в области, где проводимость осуществляется одним типом носителей заряда (в случае Ag_2Te это удовлетворяется до недостатка Ag больше 0.01 at.% [7]), как $n \approx \frac{1}{\text{Re}}$.

С другой стороны, в области избытка Te превалирует вклад дырок; R связан с концентрацией и подвижностью электронов и дырок (n, p, U_n, U_p), который определяется по формуле:

$$R = \frac{pU_p^2 - nU_n^2}{e(pU_p - nU_n)^2}, \quad (8)$$

где U_n, U_p и n, p определяются согласно [6-8].

Если $F_{1/2}(\eta), I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)$, n и p известны, то из соотношений (5) и (6) можно определить значения γ, γ^θ и n^θ .

На рис.4 представлена зависимость $\log \gamma^\theta (n^\theta)^2 T^{-3} (m^*/m_0)^{-3/2}$, как функция от $1/T$ прямая, наклон которой позволяет получить ε_g .



Рис. 4. Температурная зависимость $\log \gamma^\theta (n^\theta)^2 T^{-3} \left(\frac{m^*}{m_0}\right)^{-3/2}$ от $1/T$ в Ag_2Te . 1-взято из [4] ($E_{g_0} = 0.113 \text{ эВ}$), 2-для образца с избытком 0.02ат.% ($E_{g_0} = 0.054 \text{ эВ}$), 3-для образца с избытком 0.75ат.% Te ($E_{g_0} = 0.035 \text{ эВ}$).

С другой стороны разница между началом этой прямой позволяет вычислить температурный коэффициент ширины запрещенной зоны β_1 . Полученные данные представлены в таблице.

Таблица

| Образцы Параметры | $\text{Ag}_2\text{Te}+0.02 \text{ ат.}\% \text{Ag}$ | | | $\text{Ag}_2\text{Te}+0.05 \text{ ат.}\% \text{Te}$ | | |
|---|---|----------------|----------------|---|----------------|----------------|
| | 100К | 200К | 300К | 100К | 200К | 300К |
| $\beta_1, eV \cdot K^{-1}$ | $-7,5 \cdot 10^{-5}$ | — | — | $-7,5 \cdot 10^{-5}$ | — | — |
| ε_g, eV | 0.046 | 0.040 | 0.031 | 0.028 | 0.021 | 0.014 |
| γ^θ | 1.501 | 1.439 | 1.354 | 1.438 | 1.347 | 1.298 |
| m_n^* | 0.025[6] | 0.018 | 0.014 | 0.022 | 0.020 | 0.020 |
| m_p^* | 0.12 [8] | — | — | — | — | — |
| $U_n, V^{1/2} \cdot S \cdot \text{cm}^{-2}$ | $1,5 \cdot 10^{-5}$ | $8 \cdot 10^3$ | $4 \cdot 10^3$ | $5 \cdot 10^3$ [6] | $2 \cdot 10^3$ | $1 \cdot 10^4$ |
| $U_p, V^{1/2} \cdot S \cdot \text{cm}^{-2}$ | — | — | — | $6 \cdot 10^3$ [6] | $4 \cdot 10^3$ | $2 \cdot 10^3$ |

Из таблицы видно, что расщепление происходит за счет дефектов (или деформационного потенциала). Для подтверждения действительности полученных результатов о ширине запрещенной зоны был проведен расчет температурной зависимости коэффициента Холла в n - и p - Ag_2Te . Расчет производился по следующей схеме: для одного типа носителей

заряда (электронов) в модели со сферическими изоэнергетическими поверхностями коэффициент Холла выражается согласно.

$$R = -1/ne. \quad (9)$$

Концентрация электронов n при Кейновском законе дисперсии определяется согласно:

$$n = \frac{(2m_n^*k_0T)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3} I_{3/2,0}^0(\eta, \beta). \quad (10)$$

По полученным значениям m_n^* , η и β и соотношению (10) можно определить n ; далее по (9) можно рассчитать R (рис.2).

Из рис.2 видно, что при значении $\varepsilon_g = 0.054 \text{ эВ}$ расчетная кривая R для n - Ag_2Te (рис.2) согласуется с экспериментальными данными для $n = 2.1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Расчет для $R(T)$ в p - Ag_2Te проведен следующим образом. Как видно из рис.2, при $T \leq 50\text{K}$ проводимость исследуемого образца Ag_2Te с избытком Te больше 0.05 ат.% полностью обеспечивается дырками. Интервал температуры $50 < T < 300\text{K}$ соответствует области собственной проводимости, и зависимость $R(T)$ определяется двумя типами носителей заряда. В области собственной проводимости для двух типов носителей заряда величина R в слабом магнитном поле (при $(U_p H / c)^2 \ll 1$) согласно выражению [6]:

$$R = \frac{1}{N_a e} \frac{(1-c)(1-b^2c)}{(1+bc)^2}, \quad (11)$$

где $N_a = p(1-c)$ - концентрация акцепторов, $b = U_n / U_p$ - отношение подвижностей электронов и дырок, $c = n/p$ - отношение концентраций электронов n и дырок p (которые определяются по установленному [6]) зависимость $c(T)$ рассчитывалась по соотношению

$$c = \frac{n_i}{N_a + P_i},$$

где $n_i \approx p_i$ - собственная концентрация определяется согласно

$$n_i = 4,9 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_p^* m_n^*}{m_0^2} \right)^{3/4} T^{3/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_g}{2k_0T} \right). \quad (12)$$

Зависимость $b(T)$ определяется по методу [6].

Подставляя значения $m_p^* = 0.12$ [6], $m_n^* = 0.02$ [7], ε_g , c и b можно рассчитать $R(T)$ (рис.2).

Из рис.2 видно, что при значениях $\varepsilon_g = (0.035 - 7 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}) \text{ эВ}$ экспериментальные и расчетные данные полностью согласуются.

Из расчетных данных видно, что ε_g для электроотрицательных дефектов больше (ионизированных атомов серебра), чем для электроположительных (вакансии серебра); значения температурного коэффициента ширины запрещенной зоны близка данным [4,6].

Обсуждение полученных результатов

Анализ электрофизических свойств Ag_2Te позволяет считать, что это соединение относится к группе нестехиометрических полупроводниковых фаз переменного состава [7], обладающей характерными особенностями; такими как структурный фазовый переход, сложная энергетическая структура и смешанный ионно-ковалентно-металлический характер химической связи. Одним из основных признаков теллурида серебра является собственная дефектность (их концентрация больше $1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [4]), которая обуславливает отклонения от стехиометрии и изменения энергетических и кинетических параметров носителей заряда. Неполное заполнение тетраэдрических и октаэдрических пустот приводит к кристаллизации соединений Ag_2Te в решетках собственного типа, а наличие ионизированных и вакансий атомов серебра в подрешетке влияет на механизм электрон-фононного процесса.

Сильная зависимость электрических и термоэлектрических свойств Ag_2Te при отклонениях от стехиометрии, обусловлена образованием и поведением собственных дефектов-вакансий по Ag (межузельных атомов) $Ag_{2-x}Te$ и связано с возникновением дополнительных носителей заряда (n_D). Расчеты показывают, что если выполняется условие $n_D \geq n_i$, то при этом изменяется ширина запрещенной зоны. Это условие удовлетворяется в случае $Ag_{2-x}Te$ при добавках 0.01 ат.% Ag и 0.05 ат.% Te.

Из анализа моделей [13] образования собственных дефектов и их диффузии [11] обуславливается движение вакансий междузельных атомов серебра. Среди членов семейства халькогенидов серебра Ag_2X (X-S, Se, Te) только Ag_2Te обладает n - и p - типом проводимости. Причина этого анализирована в работе [7].

Как отмечалось выше, физические свойства Ag_2Te определяются поведением собственных дефектов и, следовательно, отклонением от стехиометрии. Поэтому все основные параметры носителей заряда и их поведения закономерно изменяются при варьировании стехиометрии состава. Большая концентрация собственных дефектов, сравнимая с концентрацией основных носителей заряда, приводит к специфическим особенностям физических свойств. Увеличение концентрации электроотрицательных дефектов приводит к росту концентрации электронов, а также электропроводности n - Ag_2Te (рис.1); при этом уровень Ферми смещается в разрешенную энергетическую зону и наступает вырождение [8]. При

этом, наоборот, уменьшается подвижность носителей заряда и термоэдс, изменяются ширина запрещенной зоны и эффективная масса носителей заряда на уровне Ферми. Степень дефектности количественно и качественно меняет характер зависимостей $\sigma(T)$ и $R(T)$, что подтверждается реализацией для Ag_2Te электронного фазового перехода типа упорядочения [14]. Основным механизмом рассеяния носителей заряда при низких температурах является на дефектах, а при высоких температурах - на тепловых колебаниях решетки [6,7,8].

Таким образом, доказано что Ag_2Te существуют определенные и взаимосвязанные корреляции между кинетическими свойствами, зонной структурой и характером химической связи. Поведение $\sigma(T)$, $R(T)$ и $\alpha_0(T)$ связаны положением атомов серебра в подрешетке элементарной ячейки. Путем сплавления с помощью добавок серебра и теллура в Ag_2Te можно регулировать его Ag_2Te электрические и термоэлектрические свойства, что позволяет прогнозировать поведение носителей заряда в материалах электронной техники на основе теллурида серебра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гуревич Ю.Я., Харкац Ю.И. Особенности термодинамики суперионных проводников. УФН, 136(4) 693, 1982.
2. Dalreen R., Gill R. Energy gap in $\beta - Ag_2Te$. Phys. Rev. 1966, 143,2, p. 666-669.
3. Керимова Т.Г., Алиев С.А., Ахундов Г.А.. Эффективная масса носителей тока в Ag_2Te . ФТП, 1970, т. 4, в.2, с.400-401.
4. Addel A., Simon Gromb. Proprietes electroniques et electrogalvaniques du tellurure d'argent β domoixins d'existence // J. Phys. hem. Sol., 1983, v.44, p.95-105.
5. Королева А.С., Мартынов В.Ю., Петров П.П. Зонная структура Ag_2Te . // Тез. 2-й Всес. Конф. ЧГУ "Материаловедение халькогенидных кислород содержащих полупроводников". 1986, т.11, 47, с. 100-101.
6. Алиев Ф.Ф., Керимова Э.М., Алиев С.А. Электрические и термоэлектрические свойства p- Ag_2Te // ФТП, 2002, 36 (8), с. 1932-1936.
7. Алиев Ф., Джафаров М.Б. Энергетический спектр носителей заряда в Ag_2Te . // ФТП, 2008, т.42, в.11, с.1297-1300.
8. Алиев С.А., Алиев Ф.Ф. Электрические и термоэлектрические свойства вблизи фазового перехода в Ag_2Te и Ag_2Se . // Изв.АН СССР, Неорг.матер., 1989, 25(2), с. 24-26.
9. Fang C.M., R.A.de Groot, Wigers G.A. Ab initio band structure calculations of the low-temperature phases of Ag_2Se , Ag_2Te and Ag_3AuSe_2 . J. of Phys. and Chem. of Sol. 2002, 63, p.457-464.
10. J.Rosenberq Activite Coefficientc of Electrons and Holes at High Concentrations // J.Chem. Phys. v.33, 1960, №3, p.665-667.
11. Аскеров Б.М. Кинетические эффекты в полупроводниках. Л., Наука, 1970, 570 с.
12. Алиев Ф.Ф., Гасанов Г.А. Энергетический спектр носителей заряда в $Sm_xPb_{1-x}Te$. Неорган. материалы, 2011, 47(8), с.1.
13. Алиев Ф.Ф., Джафаров М.Б., Эминова В.И. Влияние дефектов на электрические свойства Ag_2S при фазовом переходе // ФТП, 2010, т.44, в.6, с.749-752.
14. Алиев Ф.Ф. Фазовый переход в Ag_2Te . Неорг. матер. 2002, 38(10), с. 1184.

GÜMÜŞ TELLURİD KRİSTALININ QADAĞAN OLUNMUŞ ZONASININ QIYMƏTİNİN DƏYİŞMƏSİNDƏ GÜMÜŞ ATOMLARININ ROLU

F.F.ƏLİYEV, R.A. HƏSƏNOVA, E.R. HƏSƏNOV, T.F. YUSİFOVA

XÜLASƏ

İşdə n və p – Ag_2Te kristalında defektlərin konsentrasiyasından asılı olaraq qadağan olunmuş zonanın E_g qiymətinin təyin olunması üçün hesablama aparılmışdır. Eyni zamanda E_g qiyməti nəzərə alınmaqla, kinetik əmsalların temperatur asılılığı analiz olunmuşdur. $n - Ag_2Te$ üçün $E_g = 0.054$ eV və $p - Ag_2Te$ üçün isə $E_g = 0.035$ eV qiymətlərində nəzəri və təcrübi qiymətlər bir-biri ilə uyğunlaşmışdır. Qadağan olunmuş zona qiyməti ilə defektlərin konsentrasiyasının arasındakı əlaqənin, gümüş atomlarının və ionlarının Ag_2Te kristalının iç qəfəsindəki vəziyyəti ilə bağlı olduğu tapılmışdır.

Açar sözlər: Yarımkeçirici, qadağan olunmuş zona, defektlərin konsentrasiyası.

THE ROLE OF SILVER ATOMS AT THE CHANGE OF THE BAND GAP ENERGY IN THE SILVER TELLURIDE

F.F.ALIYEV, R.A.HASANOV, E.R.HASANOV, T.F.YUSIFOVA

SUMMARY

The work calculates the band gap energy E_g as the function of defect concentration in n – and $p - Ag_2Te$, and analyzes the temperature dependence of the kinetic properties taking into account E_g . It is established that at values of E_g -0.054eV equal to 0.035eV for $n - Ag_2Te$ and $p - Ag_2Te$ the calculation and experimental data coincide. The relationship between band gap energy and the concentration of defects produced by ions and vacancy of silver atoms in Ag_2Te sublattice is detected.

Key words: Semiconductors, bandgap, defect concentration, sublattice.

Поступила в редакцию: 15.03.2012 г.

Подписано к печати: 08.05.2012 г.