

ния, кристалл содержит электроны, дырки и примеси, концентрации которых в каждом случае подчиняются условиям равновесия. В дальнейшем предполагаем, что кристалл является бинарным соединением анионов (А) и катионов (С) и находится в контакте с газовой фазой из A_2 молекул. А-атомы из газовой фазы могут быть размещены в анионной подрешетке с одновременным образованием вакансий V_C в катионной подрешетке. Равновесие между кристаллом и газовой фазой определяется реакцией

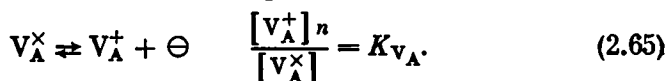
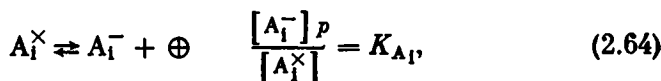
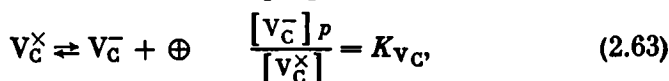
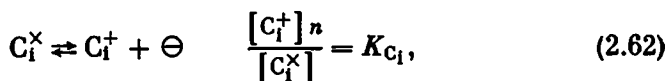


Концентрация катионных вакансий дается тогда соответствующим законом действующих масс

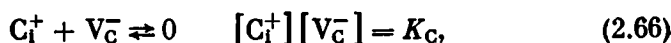
$$[V_C^{\times}] = K_A^{(g)} p_{A_2}^{(g)1/2}. \quad (2.61)$$

Здесь $p_{A_2}^{(g)}$ — парциальное давление молекул A_2 в газовой фазе, а $K_A^{(g)}$ — соответствующая константа равновесия. Концентрации здесь и в последующих формулах обозначены посредством квадратных скобок.

В кристалле могут иметь место различные реакции. Прежде всего, катионы и анионы в междоузлиях (C_i , A_i) и катионные и анионные вакансии (V_C , V_A) могут принимать и отдавать носители заряда. Реакции и соответствующие им законы действующих масс таковы:



Дальнейшие возможные реакции и законы действующих масс: при неупорядоченности по Френкелю и анти-френкелевской неупорядоченности (пары «вакансия/дефект внедрения» в катионной или анионной подрешетках):



При неупорядоченности по Шоттки и анти-шоттки неупорядоченно-