

СТРУКТУРА АМОРФНИХ СПЛАВІВ СИСТЕМИ $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$

Наведені експериментальні результати досліджень структури аморфних сплавів $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$. Показано, що дані сплави мають складну гетерогенну структуру, одним із компонентів якої є "кристалоподібні" структурні одиниці.

Results of experimental study of the structure of amorphous alloys $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$ was presented in this paper. It is show that these amorphous alloys has complicate heterogeneous structure and one of it components has "crystallike" structural units.

Методом дифракції рентгенівських променів досліджено структуру аморфних сплавів системи In-Te, отриманих при надвисоких швидкостях охолодження розплаву.

Для дослідження були синтезовані сплави із вмістом 15, 20, 25 і 28,57 (стехіометрія In_2Te_5) ат. % In. Вихідними компонентами служили телур марки ТВ-4 та індій марки ИН-00. Синтез сплавів проводили шляхом сплавлення вихідних компонентів, взятих у відповідних пропорціях, у кварцових ампулах, попередньо вакуумованих до $\sim 10^{-2}$ Па, при температурі $\sim 1000^\circ\text{C}$ протягом 4-х діб. В аморфний стан матеріали переводились методом спінігування розплаву від температури ліквідусу, більш детально описаному в [1]. Рентгенодифракційні дослідження проводили в монохроматизованому (графіт) MoK_α -випромінюванні на дифрактометрі ДРОН-3. Зйомка проводилась до $S=15 \text{ \AA}^{-1}$ (вектор розсіювання $S=4\pi\sin(\theta)/\lambda$, де θ – кут дифракції, λ – довжина хвилі).

Приведені до електронних одиниць експериментальні структурні фактори (СФ) – $i(S)$, отримані з дифракційних кривих, представлені на рис.1.

На кривих $i(S)$, спостерігається 7 основних інтерференційних максимумів. СФ для всіх складів за загальним виглядом і положенням інтерференційних максимумів практично збігаються, що вказує на подібність загальної структури. Наявність побічних максимумів (правий схил головного максимуму, між III і IV, та на лівому схилі головного максимуму для складу In_2Te_5) вказує, що в матеріалі існують мікрообласті з власною структурою компонентів. Крім того, в

малокутовій області проявляється так званий перший гострий дифракційний максимум (ПГДМ).

Оцінюючи положення ПГДМ S' та його напівширину $h_{1/2}$, можна оцінити розмір областей когерентного розсіювання $l=2\pi/S'$, розмір області середнього порядку $2R_c=2\pi/h_{1/2}$ – найбільшу область упорядкування для матеріалів, що не мають дальнього порядку та кількість у ній розсіюючих фрагментів $n=S'/h_{1/2}$. Результати вимірювань і розрахунків приведені в таблиці 1. Слід зауважити, що оскільки ПГДМ має досить малу інтенсивність і фактично зливається з головним максимумом, то отримані результати є наближеними.

Виходячи з вищесказаного, можна зробити висновок, що структура даних аморфних сплавів системи In-Te характеризується наявністю фрагментів "кристалоподібної" структури, які в певній мірі визначають ближній порядок, але не єдині структурні одиниці (с.о.). Дане припущення не суперечить висновкам [2].

Для більш повного визначення типу атомного впорядкування розраховувались функції радіального розподілу атомної густини $G(r)$ (рис.2) і проводилась їх модельна інтерпретація. Значення радіуса першої координаційної сфери r_1 та площі Q_1 теоретично розраховувались за формулами:

$$r_1 = \frac{\sum_i \sum_j c_i n_{ij} r_{ij}}{\sum_i \sum_j c_i n_{ij}}, \quad Q_1 = \sum_i \sum_j c_i k_i k_j n_{ij},$$

де c_i – концентрація компонента i , k_i , k_j – ефективна здатність розсіяння атомів сорту i чи j , n_{ij} – кількість атомів сорту j навколо атома сорту i , r_{ij} – віддаль між атомами сортів i та j .

Таблиця 1. Параметри ПГДМ та результати розрахунків.

	$S', \text{Å}^{-1}$	$l, \text{Å}$	$h_{1/2}, \text{Å}^{-1}$	$R_C, \text{Å}$	n
In_2Te_5	0,89 ₆	7,01	0,30 ₈	10,2	2,9
$\text{In}_{25}\text{Te}_{75}$	0,91 ₀	6,91	0,27 ₁	11,6	2,4
$\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$	0,93 ₃	6,74	0,33 ₄	9,4	2,8
$\text{In}_{15}\text{Te}_{85}$	0,96 ₂	6,54	0,40 ₅	7,8	2,4

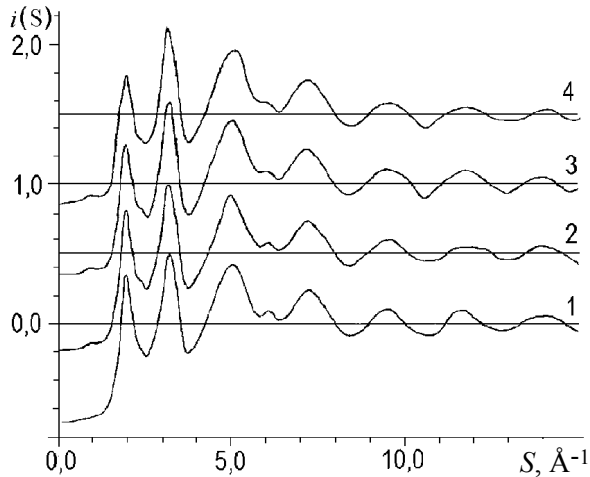


Рис. 1. Структурні фактори $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$. Ат.% In: 15 (1), 20 (2), 25 (3), 28,57 (4).

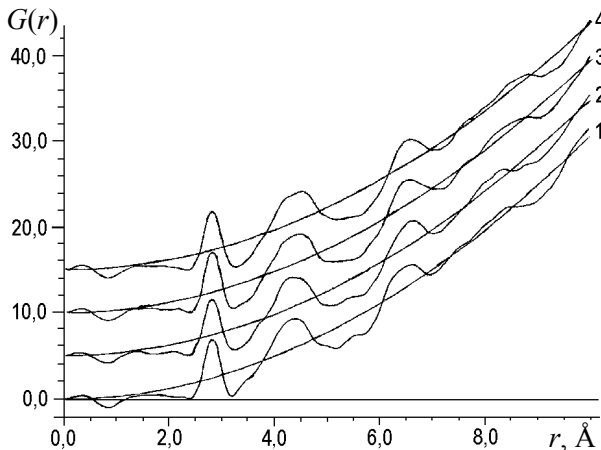


Рис. 2. Радіальний розподіл атомної густини в $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$. Ат.% In: 15 (1), 20 (2), 25 (3), 28,57 (4).

Випробовувались моделі середньостатистичного і квазіевтектичного розподілу атомів In та Te, моделі хімічної сполуки типу $\beta\text{-In}_2\text{Te}_3$ та In_2Te_5 , моделі сіток з випадковими ковалентними зв'язками та сформованих на основі с.о. типу InTe_3 , $\text{InTe}_{2,5}$, $\text{InTe}_{1,5}$, квазіевтектики на основі цих с.о. і Te. Жодна із застосовуваних моделей повністю не змогла задовольнити експериментальні значення. Емпіричним підбором, при умові, що в розплаві при даних температурах $n_{\text{Te}} \approx 2,5$ [3,4], для складу In_2Te_5 було встановлено, що $n_{\text{InTe}} \approx 3,2$. Звідси випливає, що в матеріалі

існують і 3-х координовані атоми In і 4-х координовані. Виходячи з цього, було запропоновано складну квазіевтектичну модель, складовими якої є $\beta\text{-In}_2\text{Te}_3$ ($n_{12}=4$), с.о. $\text{InTe}_{1,5}$ ($n_{12}=3$) та Te. За збігом експериментальних і розрахованих значень r_1 і Q_1 оцінено кількість фази з 4-х координованим In: в $\text{In}_2\text{Te}_5 \sim 17,5\%$, в $\text{In}_{25}\text{Te}_{75} \sim 15,5\%$, в $\text{In}_{20}\text{Te}_{80} \sim 11,5\%$, в $\text{In}_{15}\text{Te}_{85} \sim 0\%$. Варто зауважити, що розрахунок на основі моделі, згідно з якою в сітці з випадковими ковалентними зв'язками існують "кристалоподібні" асоціати з 4-х координованим In, показав фактично ідентичні результати.

Отже, з достовірністю встановлено, що аморфні сплави системи In-Te, отримані спінінгуванням розплаву, мають складну гетерогенну будову, однією зі складових якої є незначна кількість "кристалоподібної" фази. А розміщується ця фаза в аморфній матриці або типу сітки, або типу квазіевтектики. Наведені експериментальні результати не дозволяють однозначно відповісти на це питання і вимагають подальших досліджень.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Венгреневич Р.Д., Лопатнюк І.А., Подольчук С.В., Стасик М.О., Цалий В.З. Метастабильная кристаллизация сплавов $\text{Si}_x\text{Te}_{1-x}$ // Неорган. материалы. - 1996. - **32**, №9. - С.1087-1091.
2. Регель А.Р., Глазов В.М. Закономерности формирования структуры электронных расплавов. - М: Наука, 1982.
3. Cabane B., Friedel J. Local order in liquid Tellurium // J. de Physique. - 1971. - **32**, No.1. - P.73-84.
4. Полтавцев Ю.Г. Температурные измерения ближнего порядка расплавленного теллура // ЖФХ. - 1975. - **49**, №3. - С.738-740.