

СИЛОВІ СТАЛІ У КРИСТАЛАХ ZnSb

Розроблено комплексний підхід для розрахунку силових сталей мікроскопічної теорії в складних низькосиметричних кристалах. Проведено розрахунок силових сталей у кристалах ZnSb.

Comprehensive approach for calculation of the microscopic theory force constants in complex low-symmetric crystals has been developed. Force constants in ZnSb crystals calculations have been done.

Предмет дослідження – розробка комплексного підходу до синтезу методів теорії пружності та мікроскопічної теорії кристалів. Як відомо [1], є ряд методів переходу від теорії ґратки до теорії пружності. Характерним для всіх них є те, що пружні сталі знаходяться з допомогою результатів мікроскопічної теорії. Нами розв'язана обернена задача: за експериментальними даними знайдені основні параметри теорії пружності – пружні модулі, а потім шляхом складання системи рівнянь та розв'язку їх з допомогою молекулярних моделей були розраховані силові сталі мікроскопічної теорії кристалічної ґратки.

Першим кроком розробки такого підходу було встановлення взаємозв'язку між теорією пружності й теорією ґратки. Для розв'язання цієї задачі проведено співставлення рівнянь руху в теорії пружності [2] та теорії ґратки [3]. Згідно [1] пружні сталі $\tilde{c}_{ik,mn}$ взаємозв'язані з силовими сталими мікроскопічної теорії в простих кубічних кристалах наступним чином:

$$\tilde{c}_{ik,mn} = -\frac{1}{2V_z} \sum_h \Phi_{ik}^{(h)}(A_h)_m (A_h)_n, \quad (1)$$

де $\Phi_{ik}^{(h)}$ - коефіцієнти розкладу потенціальної енергії Φ в ряд по зміщенням s , A - матриця, що задає положення ядра в ґратці, V_z - об'єм елементарної комірки.

Однак, як слідує з роботи [4], в сполучі ZnSb збереглися елементи зв'язку між атомами Sb-Sb і Zn-Zn (характерні для вихідних компонентів), а також з'явилися нові зв'язки Zn-Sb різної довжини. Тим самим всі зв'язки в ZnSb розподілилися на п'ять сімейств, що відповідають п'яти різним міжатомним віддалям і описуються не-

еквівалентними орбіталями. У відповідності з цим співвідношення (1) буде мати більш загальну форму:

$$\tilde{c}_{ik,mn} = -\frac{1}{2V_z} \sum_{h,l,h_k} \Phi_{ik}^{(h)}(Ah_k)_m (Ah_k)_n, \quad (2)$$

де l означає відношення до певного типу нееквівалентних орбіталей, а h_k характеризує перехід атомних зв'язків (в рамках окремого сімейства) під дією елементів симетрії. Вивід формули (2) для ромбічних кристалів приведено в роботі [5].

Далі опис пружних властивостей в ZnSb проводився в наближенні пружинного зв'язку. Це означає, що коливання вздовж атомних зв'язків характеризуються своїм коефіцієнтом пружності $f^{(l)}$ ($1 \leq l \leq 5$). При цьому величини ${}^{(l)}\Phi_{ik}^{(h)}$ виражаються через $f^{(l)}$ так:

$$\|{}^{(l)}\Phi_{ik}^{(h)}\| = f^{(l)} \|{}^{(l)}\alpha_{ik}^{(h)}\|, \quad (3)$$

де ${}^{(l)}\alpha_{ik}^{(h)} = \cos\varphi_{li}^{(h)} \cos\varphi_{lk}^{(h)}$ є добутки направляючих косинусів зв'язків l ($1 \leq l \leq 5$) з осями координат x_i та x_k ($1 \leq i, k \leq 3$) атомів елементарної комірки.

Наступний етап розроблюваного підходу зводиться до розрахунку $f^{(l)}$. Підставляючи (3) в (2) і перебираючи всі можливі значення індексів i, k, l, m , що допускаються групою симетрії кристалу, було отримано систему алгебраїчних рівнянь, що описує залежність \tilde{c}_{iklm} від $f^{(l)}$. Розв'язуючи систему рівнянь відносно $f^{(l)}$ отримано:

$$f^{(1)} \cdot 10^7 = -5,96\tilde{c}_{11} + 0,43\tilde{c}_{22} - 0,1(\tilde{c}_{44} + \tilde{c}_{23}) + (0,16\tilde{c}_{55} + \tilde{c}_{13}) + 0,24(\tilde{c}_{66} + \tilde{c}_{12}),$$

$$f^{(2)} \cdot 10^7 = -0,4\tilde{c}_{11} - 3,32\tilde{c}_{22} - 0,29\tilde{c}_{33} + 0,86(\tilde{c}_{44} + \tilde{c}_{23}) + 0,32(\tilde{c}_{55} + \tilde{c}_{13}) + 0,43(\tilde{c}_{66} + \tilde{c}_{12}),$$

$$f^{(3)} \cdot 10^7 = 3,19\tilde{c}_{11} - 0,76\tilde{c}_{22} - 5,7\tilde{c}_{33} + 2,83(\tilde{c}_{44} + \tilde{c}_{23}) + 1,1(\tilde{c}_{55} + \tilde{c}_{13}) + 1,64(\tilde{c}_{66} + \tilde{c}_{12}), \quad (4)$$

$$f^{(4)} \cdot 10^7 = 4,4\tilde{c}_{11} + 2,67\tilde{c}_{22} + 0,86\tilde{c}_{33} - 0,67(\tilde{c}_{44} + \tilde{c}_{23}) - 2,57(\tilde{c}_{55} + \tilde{c}_{13}) - 3,84(\tilde{c}_{66} + \tilde{c}_{12}),$$

$$f^{(5)} \cdot 10^7 = -2,09\tilde{c}_{11} + 0,57\tilde{c}_{22} + 3,89\tilde{c}_{33} - 4,01(\tilde{c}_{44} + \tilde{c}_{23}) - 0,76(\tilde{c}_{55} + \tilde{c}_{13}) - 1,13(\tilde{c}_{66} + \tilde{c}_{12}),$$

де \tilde{c}_{ij} - пружні сталі $\tilde{c}_{ik,mn}$, записані в позначеннях Фойгта [6].

Підставляючи в (4) експериментальні значення пружних сталей можна знайти чисельні значення $f^{(l)}$. Однак слід зауважити, що тензори $\tilde{c}_{ik,mn}$ мікроскопічної теорії і $c_{ik,mn}$ теорії пружності не можуть бути безпосередньо ідентифіковані, адже вони входять в рівняння руху по-різному: в рівняння руху теорії пружності входить лише симетрична по mn частина $c_{ik,mn}$. Це означає, що ці тензори стануть ідентичними за умови [1]:

$$\tilde{c}_{ik,mn} = \frac{1}{2}(c_{im,kn} + c_{in,km}). \quad (5)$$

Взаємозв'язок \tilde{c}_{ij} та c_{ij} в кристалах ZnSb згідно (5) буде:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{11} &= c_{11}; & \tilde{c}_{22} &= c_{22}; & \tilde{c}_{33} &= c_{33}; \\ \tilde{c}_{23} &= c_{44}; & \tilde{c}_{13} &= c_{55}; & \tilde{c}_{12} &= c_{66}; \end{aligned} \quad (6)$$

$$\tilde{c}_{44} = \frac{c_{44} + c_{23}}{2}; \quad \tilde{c}_{55} = \frac{c_{55} + c_{13}}{2}; \quad \tilde{c}_{66} = \frac{c_{66} + c_{12}}{2}.$$

Підставляючи чисельні значення c_{ij} з роботи [7] згідно (6) в (4), було отримано такі чисельні значення для коефіцієнтів пружності зв'язків, що відповідають нееквівалентним гібридним орбіталям в ZnSb:

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= -4,85 \cdot 10^2 \text{ Н/м}, & f^{(2)} &= -1,75 \cdot 10^2 \text{ Н/м}, \\ f^{(3)} &= 1,55 \cdot 10^2 \text{ Н/м}, & f^{(4)} &= 1,35 \cdot 10^2 \text{ Н/м}, \\ f^{(5)} &= -3,1 \cdot 10^2 \text{ Н/м}. \end{aligned}$$

Отримані результати вказують на те, що прояв анізотропних властивостей ZnSb криється у самій природі кристалу, його структурі, в анізотропії коефіцієнтів пружності окремих хімічних зв'язків.

Висновки

Розроблено комплексний підхід до синтезу методів теорії пружності та мікроскопічної теорії у складних низькосиметричних кристалах, що дозволило записати аналітичні вирази для коефіцієнтів пружності окремих хімічних зв'язків через пружні сталі в кристалах ZnSb. Розроблений підхід дає можливість розглядати з єдиних позицій результати розрахунків в теорії ґратки та теорії пружності з подальшим використанням їх в дослідженнях, пов'язаних з отриманням нових матеріалів з наперед заданими властивостями шляхом формування відповідного хімічного зв'язку.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Лейбфрід Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. - М.-Л.: Госиздат физ.-мат. литературы, 1962.
2. Ландау П.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. - М.: Наука, 1965.
3. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. - М.: Наука, 1978.
4. Материалы, используемые в полупроводниковых приборах / Под ред. К.Хогарта. - М.: Мир, 1968. - С.257-263.
5. Анатычук Л.И., Маник О.Н. Силовые матрицы и упругие постоянные в ромбических кристаллах / Ин-т термоэлектричества. - Черновцы, 1992. - Деп. в УКРИНТЭИ 07.05.92, № 640-Ук.92.
6. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. - М.: Наука, 1965.
7. Балазюк В.Н., Гешко Е.И., Грицюк Б.Н., Михальченко В.П., Шарлай Б.М. Температурная зависимость компонент тензора упругих модулей ZnSb // Физическая электроника. - 1979. - 19. - С.34-41.