

## ТЕРМІЧНЕ РОЗШИРЕННЯ І ХАРАКТЕРИСТИКИ МІЦНОСТІ МІЖАТОМНОГО ЗВ'ЯЗКУ В АМОРФНИХ СПЛАВАХ СИСТЕМИ In-Te

За даними дилатометрії розраховано величини коефіцієнтів термічного розширення, характеристичних температур Дебая, середньоквадратичних динамічних зміщень атомів та оцінено енергетику структури ближнього порядку аморфних сплавів системи In-Te. Установлено, що в аморфному стані коливний спектр атомів телуридів In більш наближений до кристалічного стану. На жорсткість системи впливає і наявність "кристалоподобних" фрагментів структури.

Using dilatometer data, the coefficients of thermal expansion, characteristic Debye temperatures, root-mean-square dynamic displacements of atoms and is appreciated energetic of structure of the short-range order of amorphous alloys In-Te are determined. Set, that in an amorphous state the oscillatory spectrum atoms of telluride's of In is more similar to a crystalline state. The stiffness of system is influenced also by presence "crystal-like" fragments of structure.

У роботі В.М. Глазова [1] на основі експериментальних досліджень теплового розширення і теплоємності напівпровідникових кристалів з різною структурою та їх розплавів зроблено оцінку характеристичних температур Дебая (ХТД) та середньоквадратичних динамічних зміщень атомів (СКЗ) із рівноважного положення. Ним встановлено корелятивні співвідношення між характеристиками міцності міжатомних зв'язків та коефіцієнтами термічного розширення (КТР), ХТД і СКЗ.

Раніше було проведено аналогічні дослідження для аморфних сплавів системи Ga-Te [2,3]. Крім того, вивчалися структури аморфних сплавів системи In-Te методом рентгенівської дифракції [4] та диференціально-термічним аналізом [5]. Встановлено найбільш ймовірні типи структури та динаміку їх концентраційної зміни.

Мета цієї роботи – встановлення кореляції між параметрами термічного розширення, ХТД та СКЗ як характеристик міцності міжатомних зв'язків на прикладі аморфних телуридів індію.

### Теоретичні співвідношення

Розрахунок ХТД здійснювався за співвідношенням, отриманим шляхом комбінації рівнянь Ліндеманна-Бореліуса та Грюнайзена [1]:

$$\theta_D = 19,37(\bar{A} V_M^{3/2} \alpha)^{-1/2} \quad (1),$$

де  $\bar{A}$  – середньоквадратична атомна маса,  $V_M$  – молекулярний об'єм,  $\alpha$  – лінійний КТР. Використання цього співвідношення показало його ефек-

тивність у застосуванні як і для розплавів [1], так і для кристалічних структур [6]. Будучи отриманим для пружного ізотропного континууму, воно цілком придатне і до аморфного стану. Величини повних середньоквадратичних динамічних зміщень атомів ( $\sqrt{u^2}$ ) визначалися за співвідношенням Дебая-Уоллера. Величина  $m\theta_D^2$  пропорційна другій похідній енергії зв'язку по міжатомній відстані, і в першому наближенні можна вважати, що вона пропорційна самій енергії ґратки [1]. Розраховуючи величини  $m\theta_D^2$ , можна оцінювати динаміку зміни енергетики структури ближнього порядку.

### Результати експерименту і їх обговорення

У даній роботі досліджувались сплави з вмістом 15; 20; 25 і 28,57 ат.% In, які в аморфний стан переводились методом спінінгування розплаву ( $V_{\text{охл}} \sim 105$  К/с). Якість отримуваних стрічок контролювалась рентгенографічно в  $\text{MoK}_\alpha$ -випромінюванні.

Для вивчення термічного розширення використовувався кварцовий дилатометр (*Q-Derivatograph*). Виміри проводили на пресованих ( $10 \times 4 \times 2,5 \div 3,5$  мм) зразках в атмосфері повітря ( $V_{\text{нагр}} = 5$  К/хв). Густина визначалась як відношення маси зразків до їх об'єму.

За даними зміни відносної довжини зразків у процесі нагріву розраховано температурні залежності лінійного КТР до температури кристалі-

зації. У досліджених сплавах зі збільшенням температури КТР зростає, на відміну від системи Ga-Te [2,3]. Найбільш сильне зростання у  $\text{In}_{15}\text{Te}_{85}$ . Тому можна припустити, що в даному сплаві існує складова міжмолекулярної взаємодії. При вмісті In 20 ат.% ступінь наростання сильно зменшується. При вмісті 25 та 28,57 ат.% In ступінь наростання ще дещо зменшується, але у цих двох складів практично однакова.

Загалом зі збільшенні вмісту In КТР при 298 К зменшується (таблиця 1), однак мінімальне значення ( $13,51 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ) отримано для  $\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$ . При збільшенні вмісту In до 25 ат.% КТР дещо зростає, але на складі  $\text{In}_{28,57}\text{Te}_{71,43}$  знову ж таки зменшується. Оскільки зменшення КТР характерно для матеріалів, у яких зменшується частка сил міжмолекулярної взаємодії [7], то можна вважати, що у  $\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$  відбувається суттєве зменшення сил такої природи, а у  $\text{In}_{25}\text{Te}_{75}$  частка таких сил зростає. Отже, при збільшенні вмісту In понад 20 ат.% відбувається зміна типу структури.

Таблиця 1. Розраховані характеристики аморфних сплавів  $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$

ат.% In	$\alpha_{298} \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$	$\theta_D, \text{K}$	$\sqrt{u^2} \cdot 10^{11}, \text{м}$	$m\theta_D^2 \cdot 10^{18}$
$\text{In}_{15}\text{Te}_{85}$	18,93	136,2	2,3666	3,8942
$\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$	13,51	160,3	2,0185	5,3632
$\text{In}_{25}\text{Te}_{75}$	15,72	148,4	2,1838	4,5756
$\text{In}_2\text{Te}_5$	14,09	155,9	2,0830	5,0325

Отримані згідно із залежністю (1) величини ХТД вписуються в інтервал значень, визначених для к-Te (128,8 152,1 К), р-Te (95 К) та к- $\text{In}_2\text{Te}_3$  (116 К). Отже, при переході в аморфний стан тип зв'язків суттєво не змінюється. Причому визначені ХТД більш наближені до значень к-Te та к- $\text{In}_2\text{Te}_3$ , ніж до р-Te. Для складу  $\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$  величина ХТД найбільша. Зважаючи на прямо пропорційну залежність ХТД і пружності середовища, така поведінка означає, що при даному складі з'являється фактор, який суттєво збільшує жорсткість сітки зв'язків у склі. Таким фактором

можуть виступати "кристалоподібні" області когерентного розсіювання [4]. Отримані значення ХТД (за винятком  $\text{In}_{20}\text{Te}_{80}$ ) досить добре лягають на плавну криву від к-Te до к- $\text{In}_2\text{Te}_3$ . Це означає, що в даних аморфних матеріалах коливний спектр атомів наближений саме до складових у кристалічному стані. Концентраційна поведінка  $\sqrt{u^2}$  та  $m\theta_D^2$  також дозволяє зробити такі висновки.

Установлено:

- 1) у даних матеріалах міцність зчеплення між атомами зі збільшенням вмісту In зростає;
- 2) при переході в аморфний стан тип зв'язків суттєво не змінюється;
- 3) хід концентраційних залежностей КТР, ХТД та СКЗ добре узгоджуються між собою.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Регель А.Р., Глазов В.М. Периодический закон и физические свойства электронных расплавов. – М.: Наука, 1978.
2. Цалый В.З., Венгреневич Р.Д., Юречко Р.Я. Термічне розширення та характеристики сітки ковалентних зв'язків в аморфних сплавах Ga-Te // Науковий вісник ЧДУ. Вип. 86: Фізика.Електроніка. – Чернівці: ЧДУ, 2000. – С.58-60.
3. Цалый В.З., Венгреневич Р.Д. Особенности ближнего порядка и некоторые физические свойства аморфных сплавов  $\text{Ga}_x\text{Te}_{100-x}$  // Металлофизика и новейшие технологии. – 2001. – 23, № 3. – С.407-417.
4. Цалый В.З., Венгреневич Р.Д. Структура аморфних сплавів системи  $\text{In}_x\text{Te}_{100-x}$  // Науковий вісник ЧДУ. Вип. 50: Фізика. – Чернівці: ЧДУ, 1999. – С.39-40.
5. Цалый В.З. Кристалізація аморфних сплавів системи In-Te // Науковий вісник ЧНУ. Вип. 133: Фізика.Електроніка. – Чернівці: ЧНУ, 2002. – С.103-104.
6. Shelimova L.E., Plachkova S.K. Estimation of the Debye Temperature of IV-VI Semiconductor Compounds and Rhombohedral  $(\text{GeTe})_{1-x}((\text{Ag}_2\text{Te})_{1-y}(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_y)_x$  Solid Solutions ( $y=0,6$ ) // Phys. Stat. Sol. (A). – 1987. – 104, No.2. - P.679-685.
7. Сандитов Д.С., Бартнев Г.М. Физические свойства неупорядоченных структур. – Новосибирск: Наука, 1982.