

ОДНОПАКЕТНАЯ ПОЛИТИПНАЯ МОДИФИКАЦИЯ ГТ CdInAlS₄

М.Г.КЯЗУМОВ, Г.С.МЕХДИЕВ, А.Б.МАГЕРРАМОВ

Институт Физики АН Азербайджана
Баку-370143, пр. Г.Джавида, 33.

Расшифрована однопакетная политипная модификация ГТ CdInAlS₄ с модулем структуры ...T₁O₁T₁П... и параметрами решетки: $a_0=3,867 \text{ \AA}$ $c=12,326 \text{ \AA}$ пр.гр. P3m1. $a_{\text{к.р.}}=\sqrt{3}a_0$, а также последовательность плотноупакованных сеток атомов серы (ABC) и заполняющие тетраэдрические (T) и октаэдрические (O) позиции, атомов металлов (a, в, с):A₂B₂A₂B₂ п - пустые полиэдры.

Кристаллическая структура CdInAlS₄ и ранее была исследована нами и результаты приведены в работах [1,2]. Были исследованы образцы, выращенные методом химической транспортной реакции (ХТР) и получены следующие результаты: $a_0=3,867 \text{ \AA}$ $c_0=36,978 \text{ \AA}$ пр.гр. R3m. Кроме того обнаружена сверхрешетка с периодами $a_{\text{к.р.}}=\sqrt{3}a_0$ и $c=c_0$. Расположение атомов анианов (A, B, C) и катионов (a, в, с): для основной решетки:

.....A_cC_aB_bA_aB_aB_aC_cB_bC_bB_cA_aC_p.....

где, п-пустой слой.

В работе [2] по электронограммам от монокристалла 3 R CdInAlS₄ установлено распределение катионов по слоям, т.е. процентное содержание каждого катиона в полиэдрических слоях.

Эта работа посвящается результатам продолжающихся структурных исследований образцов CdInAlS₄ в виде монокристалла, взятых из разных ампул, выращенных методом ХТР и Бриджмена.

Тонкие (менее 1000 Å) монокристаллические образцы были получены методом отслаивания лишкой лентой. Электронографический экспериментальный материал был получен на ЭГ - 400.

На рис.1 и 2 показаны электронограммы от монокристалла CdInAlS₄, полученные вращением образца во время съемки вокруг оси 100 и 110 обратной решетки (оси 100 и 110 находились в перпендикулярном положении к электронному пучку). Схемы получения и расшифровки таких электронограмм приводятся в [3] и [4]. На электронограммах отсутствуют закономерные погасания. После индцирования рефлексов определены параметры решетки $a_0=3,867 \text{ \AA}$, $a_{\text{к.р.}}=\sqrt{3}a_0$ $c=12,326 \text{ \AA}$ и пр.гр. P3m1. При фиксированном значении h вторыми сильными рефлексами в сериях рефлексов $hh\bar{2}h\bar{1}$ являются рефлексы со значением $l=3$.



Рис.1. Электронограмма вращения монокристалла CdInAlS₄ вокруг оси $10\bar{1}0$ обратной решетки.



Рис.2. Электронограмма вращения монокристалла CdInAlS₄ вокруг оси $11\bar{2}0$ обратной решетки.

Значит в соответствии с [5] из четырех полиэдрических слоев только три заполнены катионами. Согласно работе [6], если второй сильный рефлекс в сериях $hh\ 2hl$ ($h=\text{const}$) (в данном случае $hh\ 2h\ 3$) сильно отличается от соседних рефлексов (особенно в данном случае от $hh\ 2h\ 4$) тогда, в пакете, только стандартные позиции (установленные модулем), заняты катионами. Значит структура характеризуется с модулем ...ТОТТ... Учитывая принципы плотнейшей упаковки [7] и то, что в этих типах структур межпакетные переходы происходят по типу tt

[8] мы остановились на упаковке анионов типа ...ттт...

Исследовались десятки образцов CdInAlS_4 в виде монокристалла; выращенных методом ХТР и Бриджмена. В основном наблюдалась ромбоэдрическая 3R модификация. Только в некоторых образцах была установлена однопакетная 1T модификация с модулем ... $T_1O_1T_1P_1$... Ранее, исследованиями текстур этих образцов мы не могли установить 1T модификации. Видимо, во время растирания образцов или действием ультразвука на них происходят фазовые переходы или у образцов разрушаются структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г.Абдуллаев, М.Г.Кязумов, Г.С.Мехдиев, Д.А.Гусейнов. ДАН Аз.ССР, 1988, т. XIV, № 3, с.13.
2. A.G.Abdullayev, M.G.Kyazumov. Thin Solid Films, 1990, v.190, p.303-307.
3. М.Г.Кязумов. Сообщения НПО КИ, Баку Элм, 1988, № 4, с.211.
4. Б.Б.Звягин, А.П.Жухлистов, М.Г.Кязумов, А.М.Фоминенков. Кристаллография, 1990, т.35, вып.3, с.602-609.
5. А.Г.Абдуллаев, М.Г.Кязумов. Сообщения НПО КИ, Баку Элм, 1988, № 4, с.324.
6. М.Г.Кязумов. г.Ужгород, Украина, 1994, с.
7. Н.В.Белов. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М., Из. АН СССР, 1947 - 237 с.
8. Ф.Г.Доника. Автореферат дис. доктора физ.-мат. наук, Кишинев, Институт прикл. физ. АН МССР, 1990.

M.H.KAZIMOV, Q.S.MEHDIYEV, Ə.V.MƏHƏRRƏMOV

CdInAlS_4 - ÜN BİRPAKETLİ POLİTİP MODİFİKASIYASI

CdInAlS_4 kristalının ... $T_1O_1T_1P_1$... quruluş modulu ilə xarakterizə olunan və qəfəs parametrləri $a_0=3,867 \text{ \AA}$, $c_0=12,326 \text{ \AA}$, $a_{i,q}=\sqrt{3}a_0$, f.qr. $P3m1$ olan birpaketli politip modifikasiyası aşkar olunmuşdur.

Sıx qablaşmış kükürd atomları layının (A,B,C) həm tetraedrik (T), həm də oktaedrik (O) boşluqları dolduran metal atomlarının (a,b,s) ardıcılığı ... $A_nB_nA_nB_n$... kimidir (n - boş poliedrik lay).

M.H.KYAZUMOV, G.S.MEHDIYEV, A.B.MAGERRAMOV

SINGLE PACKED POLYTYPE MODIFICATION OF 1T. CdInAlS_4

Single packed polytype modification of 1T. CdInAlS_4 with modul of structure ... $T_1O_1T_1P_1$... and parameters of lattice: $a_0=3,867 \text{ \AA}$, $c=12,326 \text{ \AA}$, sp.gr. $P3m1$, $a_{mp,lat}=3a_0$ have been determined.

Arrangement of snugly packed sulphur atoms (ABC) and metal atoms (abc) which occupy tetrahedral (T) and octahedral (O) positions is as following: $A_nB_nA_nB_n$ where n-empty layer.

Поступило 05.07.96

Редактор: Р.Б.Шафизаде