

## О КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ МИКРОТВЁРДОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ЛИНЕЙНОГО ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $TlIn_{1-x}Nd_xTe_2$

М.М. ЗАРБАЛИЕВ, Э.Г. МАМЕДОВ, А.М. АХМЕДОВА, А.Б. НАГИЕВ

*Сумгаитский государственный университет*

*AZ-5008, г. Сумгаит, 43 кв-л*

Работа посвящена исследованиям концентрационной зависимости микротвёрдости и коэффициента линейного теплового расширения твёрдых растворов в системе  $TlInTe_2 - TlNdTe_2$  и дан анализ немонокотному ходу этих зависимостей в рамках существующей теории.

Report is devoted to researching of concentration dependence of microhardness coefficient of linear thermal broadening of solutions in  $TlInTe_2 - TlNdTe_2$  and analysis of non-monotone course of these dependences in limits of being theory is given.

Соединение  $TlInTe_2$  относится к группе полупроводников типа  $TlSe$ , обладающих слоисто-цепочечной структурой. Согласно работе [1] замещением часть трехвалентных ионов индия трехвалентными ионами редкоземельных элементов получены твердые растворы на его основе. В [2] показано, что в системе  $TlInTe_2 - TlNdTe_2$  наблюдается область растворимости при комнатной температуре (на основе  $TlInTe_2$  до 10 мол %  $TlNdTe_2$ ). В [3] были исследованы электрические свойства в слабых и сильных электрических полях. В [4] изучено переключающие, в [5] теплопроводность в зависимости от температуры и состава твердых растворов  $TlIn_{1-x}Nd_xTe_2$ . Однако, количество опубликованных работ по вопросам оптимизации физических параметров этих материалов невелико, что и вызывает интерес к дальнейшим исследованиям.

Цель данной работы – анализ концентрационной зависимости микротвердости  $H$  и коэффициента линейного теплового расширения  $\alpha$  твердых растворов  $TlIn_{1-x}Nd_xTe_2$  ( $0 \leq x \leq 0,10$ ).

Образование твердых растворов приводит к изменениям электронной и решеточной подсистем кристалла, вызывая статическую деформацию решетки, возмущение электронного и фононного спектров. С ростом концентрации твердого раствора среднее расстояние между атомами растворенного вещества  $TlInTe_2$  достигает значений, при которых межпримесное взаимодействие начинает вносить заметный вклад в энергию кристалла растворителя  $TlInTe_2$ , и это должно привести к качественному изменению состояния твердого раствора и, соответственно, к появлению на кривых концентрационных зависимостей свойств. Взаимодействие примесей и дефектов может быть различным по своей природе. Сложность процессов, происходящих при взаимодействии примесных атомов, определяет многообразие проявлений этого взаимодействия и, следовательно, широкий спектр свойств, которое часто обнаруживается на ее концентрационных зависимостях.

Согласно принципам непрерывности и соответствия [6], лежащим в основе классического физико-химическо-

го анализа, в области твердого раствора, не претерпевающего фазовых превращений, свойства изменяются непрерывно. Однако, анализируя процессы, связанные с увеличением содержания растворенного вещества, можно предсказать немонокотный характер концентрационной зависимости свойств, в пределах области гомогенности.

Введение в кристалл атомов замещения, отличающихся по размеру от атомов матрицы, приводит к созданию локальных полей упругой деформации, которые взаимодействуют с упругим полем деформации дислокации, тормозя ее движение. Для того чтобы началось движение дислокации, требуется дополнительное напряжение. Из опыта известно, что упрочнение в разбавленных твердых растворах обычно пропорционально концентрации. Это связано с тем, что атомы примесей находятся на больших расстояниях друг от друга  $d \gg R_0$

( $R_0$ -радиус сферы действия примесного атома, т.е. размер возмущенной примесным атомом области кристалла). Поля упругих деформаций изолированы и, взаимодействуя с дислокациями, дают аддитивный вклад в величину какого-либо параметра  $\chi$ , т.е.  $\Delta\chi = \Delta\chi_0 N$ , где  $\Delta\chi_0$  - вклад, вносимый одним атомом примеси,  $N$  - число примесных атомов.

Моделировать упругое взаимодействие между примесными атомами взаимодействия между сферами деформации радиусом  $R_0$  можно следующим образом.

При  $d = 2R_0$  сферы соприкасаются, а при дальнейшем уменьшении расстояния между примесными атомами перекрываются, что означает начало упругого взаимодействия, приводящего к перераспределению энергии поля упругих деформаций и, соответственно, к изменению энергии взаимодействия дислокации с примесными атомами. В областях перекрывания напряжения частично снимаются ввиду компенсации напряжений противоположного знака, причем при  $d = R$  снятие напряжения максимально. При  $d < R_0$  перераспределения напряжений изменяется. Если атомы примесей упорядоченно распределены по кристаллу, взаимодействие сфер начи-

## О КОНЦЕНТРАЦИОННОЙ ЗАВИСИМОСТИ МИКРОТВЁРДОСТИ И КОЭФФИЦИЕНТА ЛИНЕЙНОГО...

нается одновременно по всему кристаллу, процесс частичной компенсации напряжений носит кооперативный характер и при определенной концентрации примеси можно ожидать резкого изменения  $\chi$ . В общем случае атомы примесей расположены неупорядоченно, поэтому в одних областях деформационные сферы перекрываются, а в других – нет. Образуются участки с пониженными напряжениями, но до определенной концентрации примеси они не связаны между собой.

Согласно теории протекания, существует концентрация (интервал концентраций)  $N_c$ , при которой образуется непрерывная цепочка взаимосвязанных упругих полей с частично компенсированными напряжениями (примесная жидкость), заполняющая при дальнейшем увеличении концентрации примеси весь объем кристалла. Порогу протекания и будет отвечать изменение характера концентрационной зависимости  $\chi$  - изменение последней, которое сменится последующим ростом или снижением, когда процесс «конденсации примесной жидкости» будет завершен. Таким образом, характер изменения  $\chi$  в зависимости от концентрации примеси должен существенно зависеть от степени однородности

структуры, которая в свою очередь, определяется такими кинетическими факторами, как температура и время отжига, скорость закалки, режима выращивания монокристаллов и т.д.

Межпримесные взаимодействия стимулирует процессы перераспределения атомов примесей по кристаллу для реализации конфигурации, отвечающей минимуму термодинамического потенциала.

В исследуемых нами твердых растворах наблюдается медленный рост  $H$  и  $\alpha$  при малых концентрациях второго компонента  $TlNdTe_2$ , в области  $0,04 < x < 0,06$   $H$  и  $\alpha$  резко увеличивается, затем наблюдается уменьшение  $H$  и резкое снижение  $\alpha$ . Такой ход зависимости  $H$  и  $\alpha$  от концентрации, по-видимому, связан с упорядочением примесных атомов в образцах этих составов, соответствующим плотнейшей упаковке сфер деформации примесных состояний в пределах всего кристалла. Согласно работе [7] аномалия свойств в общем случае обусловлены началом «конденсации примесного пара», которое является необходимым, но не достаточным условием для образования сверхструктуры.

- 
- [1]. Э.М.Годжаев, М.М.Зарбалиев, Ф.М. Новрузов и др. Получение четверных сплавов типа  $TlSe$  с редкоземельными элементами // Изв.АН СССР. Физическая химия, 1975, Т.49, №9, с.2458
- [2]. Э.М.Годжаев, М.М. Зарбалиев, К.М.Джафаров, С.Д. Мамедов Некоторые свойства сплавов системы  $TlInTe_2 - TlNdTe_2$  Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1980,Т.16,№11,с.1932-1935.
- [3]. М.М. Зарбалиев Электрические свойства твердых растворов  $TlIn_{1-x}Nd_xTe_2$  в слабых и сильных электрических полях. Физика,1997,Т.3.№3.с.30-34.
- [4]. Э.М.Годжаев, М.М. Зарбалиев Эффект переключения сплавов систем  $TlInTe_2 - TlLnTe_2$  // Изв.АН СССР. Неорганические материалы, 1979, Т.15, №9, с.1558-1560.
- [5]. М.М.Зарбалиев Теплопроводность твердых растворов системы  $TlInTe_2 - TlNdTe_2$  Физика, 1997, Т.3, №4, с.35-38.
- [6]. Н.С. Курнаков Непрерывность химических превращений вещества Введение в физико-химический анализ. М.: Изд. АН СССР, 1940, с. 20-25.
- [7]. Е.И. Рогачева О концентрационной зависимости микротвердости в полупроводниковых твердых растворах. РАН. Неорганические материалы, 1989, Т.25, №5, с 754-757.

Received: 29.01.2007