

## СТРУКТУРА И НЕКОТОРЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИСТЕМЫ Se – Te

С. И. МЕХТИЕВА, А. И. ИСАЕВ, Т. Г. ГАДЖИЕВ, Н. Т. ГАСАНОВ, А.М. КЕРИМОВА

*Институт физики  
Национальной Академии Наук Азербайджана  
AZ-1143, г.Баку, пр. Г. Джавида, 33*

На основе анализа результатов концентрационных изменений сжимаемости, плотности, скорости распространения продольных ультразвуковых волн и структурных измерений предложена новая интерпретация наблюдаемых экспериментальных особенностей, позволяющей выявить взаимосвязь между структурой и физическими свойствами в системе Se-Te.

The new interpretation of observable experimental peculiarities, allowing to reveal the intercommunication between structure and physical properties in Se-Te system is supposed on the base of the analysis results of concentration changes of compressibility, density, propagation velocity of longitudinal ultrasonic waves and structural measurements.

Селен и системы на его основе хорошо подходят как модельные полупроводники для изучения взаимосвязи структуры с физическими свойствами. т. к. структура и физические свойства претерпевают изменения в зависимости от химического состава, а также от режима получения образцов.

Общеизвестно, что Se и Te состоят из спиральных тригональных цепочек, упакованных в гексагональную модификацию, в которых связи внутри цепочек существенно сильнее, чем между цепочками [1,2,3]. Немонотонное изменение некоторых физических параметров системы Se-Te, в зависимости от концентрации атомов теллура наблюдается давно [4 - 8] и объясняются это разными авторами.

В настоящей работе сделана попытка выяснить взаимосвязь структуры и физических свойств систем Se-Te в области, где наблюдаются аномальные изменения физических свойств. С этой целью проведен анализ результатов исследований относительного изменения объема под влиянием квазигидростатического давления [9, 10], скорости распространения продольных ультразвуковых волн [11], а также плотности, определяемой из пикнометрических и рентгеновских измерениях. Дифрактограммы с медным излучением, отфильтрованные никелевой фольгой от образцов получались на рентгендифрактометре ДРОН-1.

Исследовались кристаллические образцы  $Se_{100-x}-Te_x$  при значениях  $x=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$ . Во всех измерениях наблюдается немонотонное изменение сжимаемости, плотности (рис.1) и скорости распространения продольных ультразвуковых волн в зависимости от концентрации атомов теллура для состава  $Se_{95}-Te_5$ .

Для выяснения немонотонных изменений физических свойств, связанных со структурой твердых растворов, необходимо рассматривать характер изменения матричной решетки при вводе в нее различных малых содержания другого компонента. Для выяснения закономерности связи структура – свойство в твердых растворах Se-Te нами проведены структурные исследования. Рассчитаны межплоскостные расстояния и значения интенсивностей для всех исследуемых образцов. Исходя из гексагональности решетки селена и твердых растворов Se-Te, определены параметры их решеток. Также определены значения плотности, определенные рентгенографическим методом при условиях статистически равномерного распре-

деления компонент (рис.1), в которых наблюдается монотонные изменения. Вычисленные таким традиционным образом структурные параметры твердых растворов Se-Te не характеризуют свойства данного образца, так как сам способ вычисления усредняет параметры решетки, не учитывая возможные отклонения экспериментальных значений межплоскостных расстояний от их средних значений. В данном случае предполагается, что атомы теллура входят в селеновую решетку, не изменяя ее.

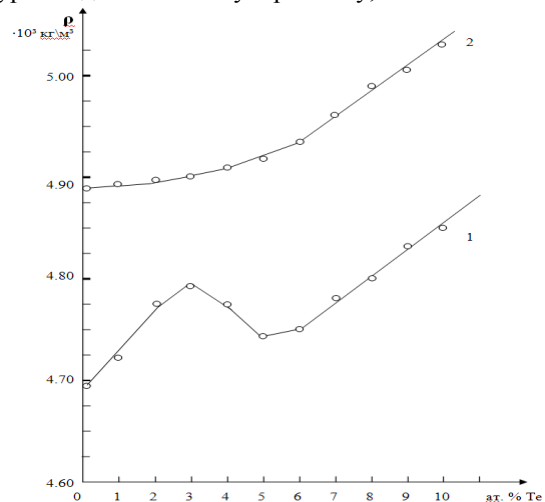


Рис. 1. Концентрационная зависимость плотности определенной пикнометрическим (1) и рентгеноструктурным (2) методами.

Анализ полученных экспериментальных межплоскостных расстояний показал, что не существует такой набор  $d_{расч.}$ , который полностью совпадал бы с  $d_{эксп.}$ , при условии гексагональности кристаллической решетки в твердых растворах Se-Te. Необходимо предположить, что в твердых растворах Se-Te с малым содержанием Te существуют два типа решеток, чисто селеновая решетка и селеновая с внедренным атомом Te. Такая решетка с внедренным атомом Te является искаженной, т.к. решетка определяется более чем двумя параметрами. Подобное понижение симметрии объясняется различием энергии связи Se-Te, составляющей 0,93 эВ и 1,25 эВ для Se-Se [12], откуда расстояние между ближайшими атомами возрастает от 2,35 Å у Se-Se, до 2,65 Å у Se-Te, что ведет к вышеупомянутому искажению. Увеличение расстояния

между атомами в цепочке в участках, куда входят атомы теллура, приводят к изменению валентного угла и расстояния между цепочками, а те в свою очередь, влияя на соседние цепочки, меняют их параметры. Насколько может распространяться подобное возмущение, зависит от концентрации атомов теллура, от расстояния и силы взаимодействия между цепочками. То, что в системе Se-Te аномалии наблюдаются при относительно малых концентрациях селена 2 ат. % [4, 5, 6, 7, 8] можно объяснить следующим образом: атомы теллура в цепочках связаны так же, как и у селена, ковалентными связями, а силы взаимодействия между цепочками в теллуре, сильнее, чем в селене. Поэтому внедренный атом селена в цепочку теллура передается на большее расстояние, чем это происходит при внедрении теллура в селеновую цепочку.

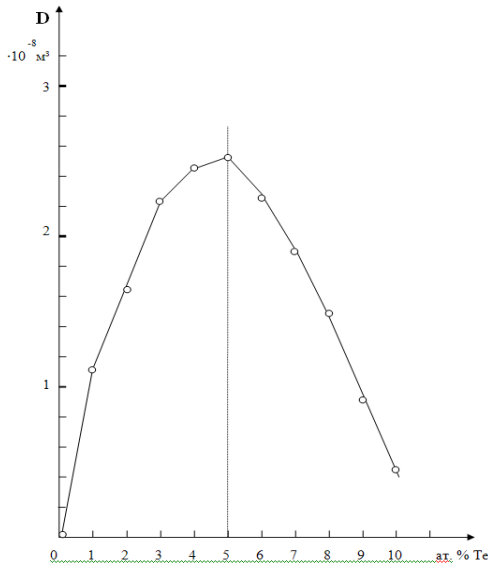


Рис.2. Зависимость коэффициента **D**, характеризующего искажение, от состава

Данные расчета параметров решетки Se<sub>95</sub>-Te<sub>5</sub> при различных значениях α, β, γ и соответствующие значения отклонений К

Таблица 1.

№№ пп	α	β	γ	a	b	c	К
1.	90°	90°	120°	4,348	4,406	5,012	10
2.	88°	90°	120°	4,398	4,317	4,851	48
3.	88° 35'	91° 25'	120°	4,365	4,365	5,064	4

Вычисление параметров искаженной решетки кристаллов с примесями и малыми добавками по данным рентгеноструктурного анализа проводилось следующим образом. Было получено равенство и наименьшее отклонение (К) всех значений параметров a и b от значений a<sub>cr</sub> и b<sub>cr</sub> при одинаковых отклонениях углов α и β в разные стороны от 90° на одинаковый угол (например α = 88° 30' и β = 91° 30') при неизменности угла γ = 120°. Пример таких расчетов для Se<sub>95</sub>-Te<sub>5</sub> приведен в таблице 1. Используя эти условия и принимая, что решетки искажены, определили параметры решетки a, c, α, β, характеризующие данный состав системы Se-Te.

Было введено понятие коэффициента D, характеризующее искажение во всем объеме образца, который находится из соотношения

$$D = N_{ic} (V_{ic} - V_{cp})$$

где: D - коэффициент искажения; N<sub>ис</sub> - число селеновых решеток с атомом Te, т.е. искаженные решетки; V<sub>ис</sub> - объем искаженной решетки; V<sub>ср</sub> - средний объем решетки. Наибольшее значение D соответствует составу Se<sub>95</sub>-Te<sub>5</sub>, т.е. это из исследуемых составов тот, при котором искажение в объеме наибольшее (рис. 2). Именно в этих образцах наблюдаются аномалии физических свойств.

- [1]. P.Grosse. Die Festk rpeigenschaften von Tellur. Springer Tracts in Modern Physics (1969) P. 48.
- [2]. Landolt-Bornstein. Group 3. Vol. 17. Subvol.: Physics of Non-Tetrahedrally Bonded Elements and Binary Compounds I Ed. O. Madelung. Springer-Verlag, Berlin – Heidelberg – N. Y.- Tokyo (1983).
- [3]. С.И. Мехтиева, Д.Ш. Абдинов. Развитие физики селена. Баку, Элм, 2000, 20 с.
- [4]. А.И. Блум, А.Р.Регель. Исследование термоэзд сплавов теллура и селена в твердом и жидком состоянии. Журнал технической физики. 1953, т. XXIII, вып. 5, с. 782-787.
- [5]. А. И. Блум. Электрические свойства твердых растворов Te-Se. Журнал технической физики. 1953, т. XXIII, вып. 5, с. 788-795.
- [6]. А.И.Блум, А.Р.Регель. Исследование электропроводности и вязкости в расплавах Te-Se. Журнал технической физики. 1953, т. XXIII, вып. 6, с. 964-967.
- [7]. В.Н. Ланге, А.Р. Регель. Некоторые аномалии в зависимости плотности и микро твердости сплавов Te-Se и Te-S. ФТТ, 1959, т. I, № 4, с. 559-561.
- [8]. В.Н. Ланге, А.Р. Регель. Особенности электрических свойств непрерывных твердых растворов в системе Te-Se и Te-S. ФТТ, 1959, т. I, № 4, с. 562-564.
- [9]. С.И. Мехтиева, А.И. Исаев, Т.Г. Гаджиев, Н.Т. Гасанов, В.З. Зейналов. Сжимаемость селена и системы Se-Te. Известия НАН АР, серия ф.м.н., 2006, т. XXVI, № 5, стр. 54 -57.
- [10]. А.И. Левыкин, В.В. Вавакин. Физические свойства горных пород и минералов при высоких давлениях и температурах. Москва, Наука, 1978, 341 с.
- [11]. У. Мезон Применение физической акустики в квантовой физике и физике твердого тела. М.: Мир, 1970, - 440 с.
- [12]. В.М. Катлер Жидкие полупроводники. – М: Мир, 1980, 256 с.

Received: 10.02.2007