

РАСЧЕТ ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ $\text{Cu}_{2-x}\text{Zn}_y\text{Te}$ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМ РЕНТГЕНДИФРАКТОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

¹Ю.Г.АСАДОВ, ¹Ф.Г.МАГЕРРАМОВА, ¹Ю.И.АЛЫЕВ, ¹А.Г.БАБАЕВ,
¹Д.И.ИСМАИЛОВ, ²А.Ю.НАДЖАФОВ

¹Институт Физики им. академика Г.М. Абдуллаева НАН Азербайджана,
AZ-1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

²Азербайджанский Технический Университет

Yüksək temperaturlu rentgen-difraksiya üsulu ilə $300\text{K} < T < T_{\text{cr}}$ intervalında $\text{Cu}_{2-x}\text{Zn}_y\text{Te}$ ($x=0,50; 0,45; 0,30; 0,10$, $y=0,50; 0,40; 0,30; 0,20; 0,05$) tipli nümunələrdə mümkün faza keçidlərinin mexanizmi tədqiq edilmişdir. Kristal qəfəsin parametrlərinin temperatur asılılığından hesablanmış qiymətləri əsasında müəyyən edilmişdir ki, qəfəsin İGƏ yüksək dərəcəli anizotropiyası çoxsaylı faza keçidlərinin baş verməsində əsas amildir.

Высокотемпературном рентгенифрактометрическом методом в температурном интервале $300\text{K} < T < T_{\text{пл}}$ исследовано всевозможные полиморфные превращение кристаллов состава $\text{Cu}_{2-x}\text{Zn}_y\text{Te}$ ($x=0,50; 0,45; 0,30; 0,10$, $y=0,50; 0,40; 0,30; 0,20; 0,05$). Из температурной зависимости изменение значений параметров решетки рассчитаны КТР и показано, что сильная анизотропия в КТР является одним из основных причин существования полиморфизма в указанных составах.

High-temperature X-ray-diffractometer the method in a temperature interval $300\text{K} < T < T_m$ investigates every possible polymorphic transformation of crystals of structure $\text{Cu}_{2-x}\text{Zn}_y\text{Te}$ ($x=0,50; 0,45; 0,30; 0,10$, $y=0,50; 0,40; 0,30; 0,20; 0,05$). From temperature dependence change of values of parameters of a lattice are calculate` FTE and it is shown, that strong anisotropy in FTE is one of principal causes existence of polymorphism in the specified structures.

В работе [1-3] подробно изложены условия синтеза и выращивания монокристаллов $\text{Cu}_{2-x}\text{Zn}_y\text{Te}$ ($x=0,50; 0,45; 0,30; 0,10$, $y=0,50; 0,40; 0,30; 0,20; 0,05$) и в температурном интервале от комнатной до плавления исследовались все возможные полиморфные превращения.

В данной работе приведены результаты измерения коэффициента теплового расширения (КТР) отдельных модификаций в кристаллах указанных составов.

I. $\text{Cu}_{1,50}\text{Zn}_{0,50}\text{Te}$. При комнатной температуре $\text{Cu}_{1,50}\text{Zn}_{0,50}\text{Te}$ двухфазный и состоит из гексагональной и орторомбической модификаций (табл.1).

Орторомбическая модификация при 811 К превращается в гексагональную модификацию, а гексагональная модификация при 970 К превращается в высокотемпературную ГЦК модификацию. Превращения обратимые.

Таблица 1.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле $\text{Cu}_{1,50}\text{Zn}_{0,50}\text{Te}$.

T _{эксп.} , К	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ, г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
293	Орторомбическая	7,319	22,236	36,458	104	Pnma	5933,368	7,434
	Гексагональная	4,248		7,234	2	P3m1	113,049	7,503
373	Орторомбическая	7,326	22,257	36,478	104	Pnma	5947,912	7,416
	Гексагональная	4,253		7,234	2	P3m1	113,315	7,486
473	Орторомбическая	7,342	22,281	36,504	104	Pnma	5971,584	7,387
	Гексагональная	4,259		7,249	2	P3m1	113,871	7,449
573	Орторомбическая	7,354	22,315	36,546	104	Pnma	5997,363	7,354
	Гексагональная	4,265		7,261	2	P3m1	114,381	7,416
673	Орторомбическая	7,365	22,347	36,582	104	Pnma	6020,872	7,326
	Гексагональная	4,271		7,275	2	P3m1	114,924	7,381
773	Орторомбическая	7,381	22,378	36,623	104	Pnma	6049,095	7,292
	Гексагональная	4,280		7,289	2	P3m1	115,631	7,336
873	Гексагональная	4,293		7,289	2	P3m1	116,334	7,292
973	ГЦК	6,119			4	Fm3m	229,109	7,405
1073	ГЦК	6,127			4	Fm3m	230,008	7,376

Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны КТР существующих модификаций результаты приведены в табл.2.

Как видно из табл.2 температурные зависимости коэффициента в линейного расширения $\alpha_{[100]}$, $\alpha_{[010]}$ и $\alpha_{[001]}$ орторомбической модификации положительные и поэтому их поверхность имеет вид эллипсоида.

Для гексагональной модификации имеется два независимых коэффициента, у которых $\alpha_{[100]} = \alpha_{[010]} \neq \alpha_{[001]}$, поверхность коэффициентов линейного расширения сплюснутая при $\alpha_{[001]} < \alpha_{[100]}$ вдоль оси [001] и симметрия

$$\text{поверхности} - \frac{m\infty}{m}.$$

В кубических модификациях поверхность коэффициентов линейного расширения имеет вид сферы, обладающей высшей симметрией $\frac{\infty}{\infty m}$.

II. $Cu_{1,90}Zn_{0,05}Te$. Как показано в табл.3 кристаллы $Cu_{1,90}Zn_{0,05}Te$ при комнатной температуре двухфазные и состоят из орторомбической и гексагональной модификаций. Обе модификации при 748 К превращаются в кубическую модификацию.

Таблица 2.

КТР кристалла $Cu_{1,50}Zn_{0,50}Te$ ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$).

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	293-373	13,07	11,86	9,96	10,63	30,64
	293-473	17,46	11,29	7,06	11,94	35,81
	293-573	17,13	12,59	8,63	12,78	38,52
	293-673	16,84	13,12	8,95	13,04	38,81
	293-773	17,65	13,31	9,45	13,47	40,63
Гексагональная	293-373	14,42		1,21	10,02	29,41
	293-473	14,39		11,90	13,56	40,68
	293-573	15,36		13,73	14,82	44,45
	293-673	19,39		14,99	17,92	53,77
	293-773	15,65		15,90	15,73	47,58
	293-873	18,35		13,28	16,06	50,10
	293-973	19,87		17,81	19,18	55,72
ГЦК	973-1073	13,24			13,24	39,72

Таблица 3.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле $Cu_{1,90}Zn_{0,05}Te$.

T _{эксп.} , K	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ, г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
300	Орторомбическая	7,325	22,255	36,331	104	Pnma	5922,602	7,331
	Гексагональная	8,372		21,589	24	P3m1	1130,415	7,642
373	Орторомбическая	7,327	22,361	35,961	104	Pnma	5891,816	7,369
	Гексагональная	8,407		21,611	24	P3m1	1322,741	7,570
473	Орторомбическая	7,349	22,394	35,847	104	Pnma	5899,466	7,360
	Гексагональная	8,447		21,630	24	P3m1	1336,532	7,492
573	Орторомбическая	7,346	22,508	35,400	104	Pnma	5853,169	7,418
	Гексагональная	8,487		21,651	24	P3m1	1350,530	7,415
673	Орторомбическая	7,355	22,502	35,608	104	Pnma	5893,203	7,367
	Гексагональная	8,524		21,671	24	P3m1	1363,590	7,344
773	ГЦК	6,068			4	Fm3m	223,428	7,474
873	ГЦК	6,101			4	Fm3m	227,093	7,353
973	ГЦК	6,135			4	Fm3m	230,911	7,232

Из температурной зависимости параметров решетки существующих модификаций рассчитаны КТР, которые приведены в табл.4.

Как видно из табл.4, у орторомбической модификации $\alpha_{[100]}, \alpha_{[010]} > 0$ а $\alpha_{[001]} < 0$ и поверхности коэффициентов линейного расширения состоит из вытянутой положительной области и двух отрицательных яйцеобразных областей. Для гексагональной модификаций $\alpha_{[100]} > \alpha_{[001]}$, поэтому поверхность КТР становится овалоподобной сплюснутой вдоль оси [001]. В кубических модификация, как и в кристалле поверхность КТР имеет вид сферы, обладающей высшей симметрией $\frac{\infty}{\infty m}$.

III. $Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te$. При комнатной температуре кристаллы $Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te$, как показано в табл.5,

трехфазные и состоят из гексагональной, орторомбической и метастабильно существующей высокотемпературной ГЦК модификаций. Орторомбическая и первая гексагональная модификации при температуре 686 К превращаются во вторую гексагональную модификацию (так называемую фазу Новотного). В этом процессе в параметре ГЦК модификации изменений не происходит. При 1084 К вторая гексагональная модификация также превращается в ГЦК модификацию. Надо отметить, что в процессе нагрева при 470 К параметр c орторомбической модификации резко сокращается ($\Delta c = 0,28 \text{ \AA}$), а дальше монотонно растет. Вероятно, это связано с перераспределением катионов. Из параметров решетки существующих модификаций рассчитаны КТР кристалла $Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te$, которые подытожены в табл.6.

Таблица 4.

КТР кристалла Cu_{1,90}Zn_{0,05}Te ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$)

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	300-373	2,62	64,94	-139,77	-24,07	-71,21
	300-473	18,62	36,13	-77,02	-7,42	-22,58
	300-573	10,20	41,53	-93,93	-14,07	-42,94
	300-673	10,20	29,71	-53,39	-4,26	-13,31
Гексагональная	300-373	55,96		13,52	41,81	128,85
	300-473	51,71		10,87	38,10	115,20
	300-573	50,27		10,50	37,01	112,13
	300-673	52,32		10,10	35,70	108,79
ГЦК	773-873	54,71			54,71	164,13
	773-973	54,71			54,71	164,13

Из табл.6 видно, что КТР орторомбической модификации по основным кристаллографическим направлениям имеет анизотропию. При всех положительных коэффициентах поверхность КТР имеет вид эллипсоида. Только при 473 К КТР в направлении [001] имеет отрицательное значение, т.е. $\alpha_{[001]} < 0$ а другие $\alpha_{[100]}, \alpha_{[010]} > 0$, тогда поверхность КТР имеет одну вытянутую положительную и две отрицательные

яйцеобразные области. Если сравнить КТР гексагональной-I и гексагональной-II модификации, то видно, что в гексагональной-I $\alpha_{[100]} < \alpha_{[001]}$. В первом случае поверхность КТР становится овалоподобной, а во втором поверхность КТР становится сплюснутой. Как обычно, поверхность КТР ГЦК модификации имеет вид сферы.

Таблица 5.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te.

T _{эксп.} , K	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ, г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
290	Орторомбическая	7,309	22,239	38,226	104	Pnma	6213,439	6,917
	Гексагональная	8,371		21,602	24	P3m1	1310,891	7,566
	ГЦК	6,096			4	Fm3m	226,535	7,297
373	Орторомбическая	7,315	22,276	38,357	104	Pnma	6250,232	6,877
	Гексагональная	8,386		21,319	24	P3m1	1316,628	7,533
	ГЦК	6,107			4	Fm3m	227,763	7,258
473	Орторомбическая	7,328	22,335	38,095	104	Pnma	6235,042	6,893
	Гексагональная	8,402		21,627	24	P3m1	1322,146	7,502
	ГЦК	6,113			4	Fm3m	228,435	7,237
573	Орторомбическая	7,336	22,358	38,226	104	Pnma	6269,763	6,855
	Гексагональная	8,423		21,644	24	P3m1	1329,808	7,459
	ГЦК	6,118			4	Fm3m	228,996	7,219
673	Орторомбическая	7,342	22,354	38,579	104	Pnma	6331,704	6,788
	Гексагональная	8,430		21,667	24	P3m1	1133,435	7,438
	ГЦК	6,121			4	Fm3m	229,33	7,208
773	Гексагональная-II	4,266		7,309	2		115,191	7,176
	ГЦК	6,126			4		229,896	7,191
873	Гексагональная-II	4,272		7,376	2		116,574	7,090
	ГЦК	6,133			4		230,685	7,166
973	Гексагональная-II	4,283		7,402	2		117,588	7,029
	ГЦК	6,139			4		231,362	7,145
1073	Гексагональная-II	4,305		7,437	2		119,361	6,928
	ГЦК	6,133			4		231,589	7,143
1080	ГЦК	6,141			4	Fm3m	231,589	7,138

IV. Cu_{1,50}Zn_{0,30}Te. Монокристаллы Cu_{1,50}Zn_{0,30}Te при комнатной температуре двухфазные и состоят из орторомбической и гексагональной модификации (табл.7). При 803 К обе модификации превращаются в ГЦК модификацию. Из температурной зависимости параметров кристаллической решетки рассчитаны КТР каждой модификации, которые приведены в табл.8. Как

видно из табл.8, КТР орторомбической модификации $\alpha_{[100]}, \alpha_{[010]} > 0$ а $\alpha_{[001]}$ отрицателен. Поэтому поверхность КТР имеет одну вытянутую положительную, область и две отрицательные яйцеобразные области. В гексагональной модификации поверхность КТР, так как $\alpha_{[100]} > \alpha_{[001]}$, становится овалоподобной вытянутой, а в ГЦК модификации поверхность КТР имеет вид сферы.

Таблица 6.

КТР кристалла $Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te$ ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$).

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	290-373	8,74	19,19	41,48	23,14	71,34
	290-473	13,98	23,47	-18,63	6,27	18,20
	290-573	12,81	18,78	0,00	10,53	32,03
	290-673	11,57	13,43	24,17	16,39	49,70
Гексагональная-I	290-373	21,88		9,65	17,80	52,73
	290-473	20,56		6,22	15,78	46,92
	290-573	22,25		6,89	17,13	50,99
	290-673	18,34		7,87	14,85	44,00
Гексагональная-II	773-873	14,07		91,67	39,94	120,06
	773-973	19,93		63,35	34,40	104,05
	773-1073	31,10		58,19	40,13	120,67
ГЦК	290-373	22,53			22,53	67,69
	290-473	15,51			15,51	46,53
	290-573	12,93			12,93	38,79
	290-673	11,05			11,05	33,15
	290-773	10,19			10,19	30,57
	290-873	10,41			10,41	31,23
	290-973	9,43			10,43	31,29
	290-1073	9,34			9,34	28,02
	290-1084	9,34			9,34	28,02

Таблица 7.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле $Cu_{1,50}Zn_{0,30}Te$.

T _{эксп} , K	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ, г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
293	Орторомбическая	7,290	22,225	36,503	104	Pnma	5914,225	7,077
	Гексагональная	8,370		21,593	24	P3m1	1310,032	7,372
373	Орторомбическая	7,331	22,441	35,753	104	Pnma	5881,904	7,115
	Гексагональная	8,392		21,597	24	P3m1	1317,171	7,333
473	Орторомбическая	7,333	22,721	35,018	104	Pnma	5831,313	7,177
	Гексагональная	8,414		21,600	24	P3m1	1324,270	7,293
573	Орторомбическая	7,362	22,651	35,492	104	Pnma	5918,527	7,071
	Гексагональная	8,440		21,636	24	P3m1	1334,638	7,237
673	Орторомбическая	7,401	22,742	35,348	104	Pnma	5949,547	7,034
	Гексагональная	8,443		21,639	24	P3m1	1335,822	7,230
773	Орторомбическая	7,423	22,857	35,253	104	Pnma	5981,286	6,997
	Гексагональная	8,461		21,641	24	P3m1	1341,648	7,199
773	ГЦК	6,120			4	Fm3m	229,221	7,022
873	ГЦК	6,130			4	Fm3m	230,346	6,988
973	ГЦК	6,139			4	Fm3m	231,362	6,957
1073	ГЦК	6,148			4	Fm3m	232,382	6,927

V. $Cu_{1,55}Zn_{0,20}Te$. Как и в кристалле $Cu_{1,50}Zn_{0,40}Te$, кристаллы $Cu_{1,55}Zn_{0,20}Te$ при комнатной температуре трехфазные, т.е. состоят из орторомбической, гексагональной и метастабильно существующей высокотемпературной ГЦК модификации (табл.9).

При 785 К орторомбическая и гексагональная модификации превращаются в ГЦК модификацию. До этого превращения происходит существенное изменение

параметров решетки орторомбической и гексагональной модификаций при 573 К, т.е. при этой температуре параметр a орторомбической модификации скачком растет, а параметры b и c меняют наклон роста. В гексагональной модификации параметр решетки a до температуры превращения растет монотонно, а параметр c резко сокращается. Эти изменения не влияют на монотонный рост параметра a ГЦК модификации.

РАСЧЕТ ТЕПЛОВОГО РАСШИРЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ $Cu_{2-x}Zn_xTe$ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫМ...

Параметр решетки ГЦК модификации не изменяется при превращении орторомбической и гексагональной модификаций в ГЦК модификацию. Это подтверждает, что при этих превращениях ГЦК модификация играет роль затравки. Из температурной зависимости параметров решетки существующих модификаций рассчитаны КТР по главным кристаллографическим направлениями, которые представлены в табл.10.

В орторомбической модификации $\alpha_{[100]}, \alpha_{[010]}, \alpha_{[001]} > 0$, поэтому поверхность КТР имеет вид эллипсоида.

КТР гексагональной модификации в интервале температур 293-473К положительный и $\alpha_{[100]} > \alpha_{[001]}$. Поэтому поверхность КТР становится овалоподобной вытянутой. Выше 473 К по направлению $\alpha_{[001]}$ КТР становится отрицательный и $\alpha_{[001]} < \alpha_{[100]}$, поэтому поверхность становится сплюснутой вдоль оси [001].

Поверхность КТР орторомбической и гексагональной модификаций в зависимости от температуры имеет вид различной сферы. В ГЦК модификации поверхность имеет вид сферы.

VI. $Cu_{1,70}Zn_{0,05}Te$. При комнатной температуре кристаллы $Cu_{1,70}Zn_{0,05}Te$ также двухфазные и состоят из орторомбической и гексагональной модификаций (табл.11). В зависимости от температуры $a(T), b(T), c(T)$ орторомбической и $a(T)$ и $c(T)$ гексагональной модификаций монотонно растут до 570 К. При 570 К параметры b и c орторомбической модификации претерпевают скачки и наклон роста меняется. Параметры a и c гексагональной модификации начиная с этой температуры заметно отклоняется от линейности. Обе модификации при 873 К превращаются в ГЦК модификацию.

Таблица 8

КТР кристалла $Cu_{1,50}Zn_{0,30}Te$ ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$).

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	290-373	70,13	121,37	-256,83	-21,73	-68,31
	290-473	32,84	121,50	-226,67	-24,11	-77,88
	290-573	35,32	68,39	-98,83	1,63	2,60
	290-673	40,03	61,20	-83,22	6,04	15,72
	290-773	37,84	59,24	-71,30	8,59	23,62
Гексагональная	290-373	32,71		1,85	22,42	68,12
	290-473	28,81		1,60	19,74	60,38
	290-573	29,65		7,00	22,10	67,08
	290-673	22,76		5,32	17,01	51,81
	290-773	22,76		4,64	16,66	50,28
ГЦК	773-873	14,87			14,87	49,08
	773-973	14,87			14,87	46,70
	773-1073	14,87			14,87	45,98

Таблица 9.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле $Cu_{1,55}Zn_{0,20}Te$.

$T_{эксп}$, K	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ , г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
290	Орторомбическая	7,328	22,195	35,951	104	Pnma	5847,249	7,058
	Гексагональная	4,171		21,574	6	P3m1	325,034	7,326
	ГЦК	6,091			4	Fm3m	225,978	7,024
373	Орторомбическая	7,341	22,314	36,020	104	Pnma	5900,331	6,995
	Гексагональная	4,189		21,604	6	P3m1	328,301	7,253
	ГЦК	6,100			4	Fm3m	226,981	6,993
473	Орторомбическая	7,343	22,424	36,087	104	Pnma	59,065	6,946
	Гексагональная	4,202		21,663	6	P3m1	331,244	7,188
	ГЦК	6,107			4	Fm3m	227,763	6,969
573	Орторомбическая	7,429	22,533	36,204	104	Pnma	6060,465	6,810
	Гексагональная	4,227		21,390	6	P3m1	330,973	7,194
	ГЦК	6,114			4	Fm3m	228,491	6,946
673	Орторомбическая	7,429	22,525	36,224	104	Pnma	6061,660	6,809
	Гексагональная	4,241		21,413	6	P3m1	333,528	7,139
	ГЦК	6,118			4	Fm3m	228,996	6,932
773	Гексагональная-II	7,429	22,526	36,254	104	Pnma	6066,949	6,803
	ГЦК	4,219		21,432	6	P3m1	330,369	7,207
		6,123			4	Fm3m	229,558	6,915
873	ГЦК	6,145			4	Fm3m	232,041	6,841

Таблица 10.

КТР кристалла $Cu_{1,55}Zn_{0,20}Te$ ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$).

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	293-373	20,64	67,08	23,85	37,19	113,48
	293-473	10,69	57,27	20,89	32,93	90,09
	293-573	48,83	54,36	25,10	42,76	130,22
	293-673	35,98	39,14	19,95	31,69	76,50
	293-773	28,49	31,09	17,41	55,66	78,31
Гексагональная	293-373	55,45	55,45		17,32	125,64
	293-473	41,29	41,29		22,94	106,14
	293-573	47,87	47,87		-30,43	65,26
	293-673	44,17	44,17		-19,58	68,77
	293-773	24,13	24,13		-13,71	34,20
ГЦК	293-373	18,47			18,47	55,48
	293-473	14,59			14,59	43,88
	293-573	13,43			13,43	39,72
	293-673	11,84			11,84	35,15
	293-773	10,91			10,91	33,01
	293-873	15,48			15,48	46,26

Таблица 11.

Температурные зависимости параметров решетки, объема и плотности существующих модификаций в кристалле $Cu_{1,70}Zn_{0,05}Te$.

T _{эксп.} , K	Модификация	Параметры решетки				Пр.гр.см.	V, Å ³	ρ, г/см ³
		a, Å	b, Å	c, Å	Z			
293	Орторомбическая	7,338	22,195	35,986	104	Pnma	5860,929	7,034
	Гексагональная	4,156		21,593	6	P3m1	322,985	7,364
373	Орторомбическая	7,343	22,200	36,007	104	Pnma	5869,667	7,032
	Гексагональная	4,158		21,607	6	P3m1	323,505	7,352
473	Орторомбическая	7,843	22,200	36,044	104	Pnma	5875,698	7,016
	Гексагональная	4,163		21,628	6	P3m1	324,599	7,327
573	Орторомбическая	7,356	22,244	36,074	104	Pnma	5902,675	6,984
	Гексагональная	4,166		21,651	6	P3m1	325,413	7,309
673	Орторомбическая	7,362	22,364	36,184	104	Pnma	5957,470	6,920
	Гексагональная	4,178		21,704	6	P3m1	328,091	7,249
773	Орторомбическая	7,391	22,414	36,252	104	Pnma	6005,574	6,864
	Гексагональная	4,186		21,752	6	P3m1	330,077	7,205
873	ГЦК	6,066			4	Fm3m	223,207	7,103
973	ГЦК	6,089			4	Fm3m	225,755	7,023
1073	ГЦК	6,113			4	Fm3m	228,435	6,941

Таблица 12.

КТР кристалла $Cu_{1,70}Zn_{0,05}Te$ ($\cdot 10^{-6} K^{-1}$).

Модификация	T, K	$\alpha_{[100]}$	$\alpha_{[010]}$	$\alpha_{[001]}$	$\bar{\alpha} = \frac{\alpha_{[100]} + \alpha_{[010]} + \alpha_{[001]}}{3}$	$\beta = \frac{V - V_0}{V_0(T - T_0)}$
Орторомбическая	293-373	8,35	3,10	7,09	6,18	18,64
	293-473	3,71	1,38	8,94	4,68	14,00
	293-573	8,66	7,95	8,65	8,42	25,44
	293-673	8,64	20,00	14,46	14,37	43,35
	293-773	15,02	20,55	15,38	16,98	51,42
Гексагональная	293-373	5,41		8,34	6,39	20,13
	293-473	8,96		9,19	9,04	27,76
	293-573	8,34		9,69	8,79	26,85
	293-673	14,18		13,63	14,00	41,60
	293-773	15,14		15,37	15,22	45,75
ГЦК	873-973	38,91			38,91	114,15
	873-1073	39,15			39,15	117,11

Из температурной зависимости параметров решетки рассчитаны КТР орторомбической гексагональной и ГЦК модификаций, которые приведены в табл.12.

Для орторомбических модификаций $\alpha_{[100]}$, $\alpha_{[010]}$, $\alpha_{[001]} > 0$. Отсюда следует, что поверхность КТР имеет вид эллипсоида.

В гексагональных модификациях $\alpha_{[001]} > \alpha_{[100]}$. Отсюда следует, что поверхность КТР становится овалоподо-

бной, а в ГЦК модификации поверхность КТР имеет вид сферы.

Резкие анизотропные тепловые расширения по основным кристаллографическим направлениям во всех рассмотренных кристаллах приводят к ослаблению химической связи в структуре и по этой причине все низкотемпературные структуры превращаются в ГЦК модификацию, в которой облегчаются тепловые колебания атомов в кристаллической решетке.

-
- [1]. Ю.Г. Асадов, К.М. Джафаров, Ф.Ю. Асадов, А.И. Мовланвердиева. *Fizika*, 1997, №3, s.88-93.
[2]. Ю.Г. Асадов, А.И. Мовланвердиева, Ф.Ю. Асадов. *Fizika*, 1999, cild.5, №2, s.57-61.

- [3]. Ю.Г. Асадов, А.И. Мовланвердиева, С.Ю. Асадова, Л.В. Рустамова. «НКРК-2000», тезисы докладов, Москва, ИК РАН, 2000, с.263.