

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ ТРОЙНЫХ СОЕДИНЕНИЙ CuGa_3Se_5 И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СТРУКТУРЫ.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие полупроводниковой электроники и микроэлектроники непосредственно связано с поиском и исследованием новых материалов, позволяющих расширить и дополнить спектр свойств уже освоенных материалов на основе сложных полупроводниковых соединений.

Тройное соединение CuGa_3Se_5 относится к классу дефектных полупроводников типа I-III₃-VI₅, которые являются электронно-химическими аналогами соединений $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ и перспективными материалами для оптоэлектроники, нелинейной оптики и солнечной энергетики. На основе таких соединений могут быть реализованы светоизлучающие инжекционные приборы, фотодетекторы видимого и инфракрасного диапазонов, солнечные элементы. Соединение CuGa_3Se_5 является малоизученным веществом, что связано, вероятно, с трудностями выращивания качественных кристаллов.

В данной работе приводятся температурные условия синтеза и выращивания кристаллов CuGa_3Se_5 , а также исследование их структуры.

СИНТЕЗ И ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ CuGa_3Se_5

Для выращивания кристаллов тройного соединения CuGa_3Se_5 использовали элементарные компоненты полупроводниковой степени чистоты (медь марки ВЗ, галлий и селен – В4). Указанные вещества в соотношении $\text{Cu}:\text{Ga}:\text{Se}=1:3:5$ общей массой 20 г загружали в двойные кварцевые ампулы с конусоидальным дном. Снизу к наружной ампуле приваривали держатель из кварцевого стекла для присоединения ампулы к вибратору. Ампулы предварительно проходили химико-термическую обработку. После откачки ампулы до остаточного давления $\sim 10^{-3}$ Па и отпайки от вакуумного поста ее помещали в вертикальную одно-зонную печь с заданным градиентом температуры. Температуру в печи повышали со скоростью ~ 50 К/ч до 900 К и выдерживали в течение 2 ч с включением вибрации. Затем с той же скоростью повышали температуру до 1450 К (без выключения вибрационного перемешивания) и образовавшийся расплав выдерживали в течение 1 часа. После этого вибрацию выключали и проводили направленную кристаллизацию расплава путем понижения температуры печи со скоростью 2–3 К/ч до полного затвердевания расплава. Для гомогенизации выращенных кристаллов проводили их отжиг в течение 120 часов. Состав полученных кристаллов соединения CuGa_3Se_5 устанавливали при помощи химического анализа. Установлено, что состав выращенных кристаллов соответствует формульному.

РЕНТГЕНОВСКИЙ АНАЛИЗ СОЕДИНЕНИЯ CuGa_3Se_5

Измерения проводились на порошковых образцах, приготовленных из выращенных вышеописанным методом монокристаллов соединения CuGa_3Se_5 . Порошок запрессовывали в кювету и отжигали для снятия напряжений в вакууме при температуре 500 К в течение приблизительно 10 часов. Угловые положения линий дифракционного спектра измерялись на рентгеновском дифрактометре в монохроматизированном $\text{CuK}\alpha$ излучении в температурной вакуумной камере. При этом исследовались от 7 до 11 различных независимых рефлексов. Вид спектра дифракции рентгеновских лучей, полученного на порошковом образце CuGa_3Se_5 при комнатной температуре на аппарате ДРОН-3 приведен на рисунке 1.

Угловые положения, индексы Миллера соответствующих плоскостей, межплоскостные расстояния и относительные

интенсивности дифракционных максимумов представлены в таблице.

Таблица – Результаты рентгеновского анализа кристаллов CuGa_3Se_5 .

| hkl | 2θ , град | d , Å | I отн. ед. |
|----------|------------------|---------|--------------|
| 112 | 28,066 | 3,1767 | 100 |
| 200 | 32,500 | 2,7527 | 2 |
| 220 | 46,667 | 1,9447 | 58 |
| 312 | 55,466 | 1,4338 | 32 |
| 400, 008 | 68,167 | 1,3745 | 8 |
| 316, 332 | 75,333 | 1,2606 | 10 |
| 424, 228 | 86,800 | 1,1211 | 9 |
| 336, 521 | 93,583 | 1,0568 | 7 |
| 440, 408 | 104,967 | 0,9711 | 4 |
| 532, 516 | 112,083 | 0,9287 | 6 |
| 620, 604 | 124,967 | 0,8685 | 3 |
| 356 | 133,667 | 0,8378 | 2 |
| 3 3 10 | 134,217 | 0,8361 | 2 |

На основании измерений угловых положений различных дифракционных линий по формуле Вульфа-Брэггов определялись межплоскостные расстояния исследуемых плоскостей отражений, по которым методом Когена с использованием метода наименьших квадратов путем решения систем двух уравнений, составленных для различных комбинаций рефлексов с разными индексами Миллера, были рассчитаны параметры решетки для соединения CuGa_3Se_5 .

Параметры элементарной ячейки a и c определены для комнатной температуры по ниже приведенным формулам.

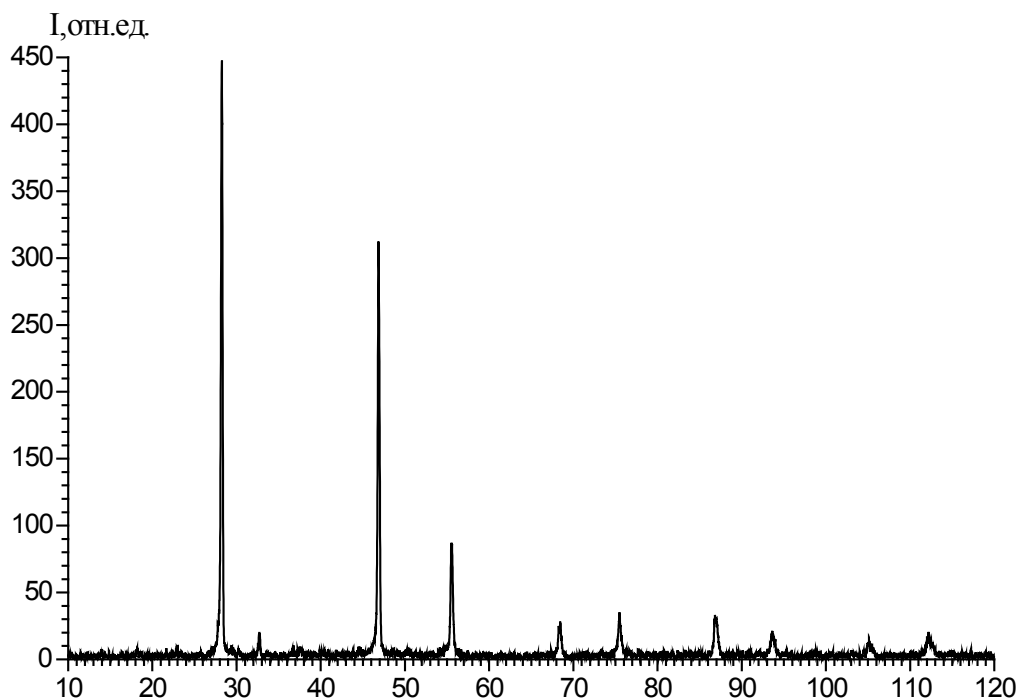
$$\frac{1}{a^2} \sum A_i^2 + \frac{1}{c^2} \sum A_i B_i = \sum A_i \frac{1}{d_i^2}$$

$$\frac{1}{a^2} \sum A_i B_i + \frac{1}{c^2} \sum B_i^2 = \sum B_i \frac{1}{d_i^2},$$

где $A_i = h^2 + k^2$, $B_i = l^2$.

Анализ выращенных кристаллов показал, что соединение CuGa_3Se_5 кристаллизуется в структуре дефектного халькопирита с параметрами элементарной ячейки $a = 0,5496$ нм и $c = 1,0993$ нм при комнатной температуре. Полученные значения хорошо согласуются с данными, приведенными в [1].

Для бинарных соединений $\text{A}^{\text{II}}\text{B}^{\text{VI}}$ характерна структура типа сфалерита. Если тройное соединение кристаллизуется в этой структуре, катионы обоих сортов занимают эквивалентные позиции, статистически чередуясь друг с другом. Такая структура может быть описана как трехслойная плотнейшая шаровая упаковка анионов, в которой половина тетраэдрических промежутков одного сорта заполнена катионами. Эту структуру можно изобразить в виде трехслойной укладки одинаково ориентированных тетраэдров. Часто для наглядности структуру типа сфалерита описывают, как состоящую из двух кубических гранцентрированных подрешеток, анионной и катионной, вставленных одна в другую и сдвинутых относительно друг друга по телесной диагонали на $1/4$.

Рисунок 1 – Спектр дифракции рентгеновских лучей кристаллов CuGa_3Se_5 .

Структура халькопирита отличается от сфалерита упорядоченным расположением катионов. Упорядочение приводит к увеличению периода решетки вдоль одной из осей в 2 раза, а также вдоль диагоналей основания элементарной ячейки $\langle 100 \rangle$. В атомных рядах вдоль указанных направлений чередуются атомы A^{I} и B^{III} . Такое упорядочение приводит к понижению симметрии. В идеальной тетрагональной ячейке халькопирита осевое соотношение c/a равно 2. Однако из-за различия размеров двух типов катионов в кристалле возникает два типа анионных тетраэдров, центрированных катионами

большого и меньшего размеров. В результате кристаллическая решетка трехкомпонентных соединений $\text{A}^{\text{I}}\text{B}^{\text{III}}\text{C}^{\text{VI}}$ приобретает дополнительное искажение, определяемое параметром $\delta = 2 - (c/a)$. Тетрагональное искажение кристаллической решетки соединения CuGa_3Se_5 $\delta = -0,0002$.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Marin G., Taulring S., Guevara R., Delgado J.M. et.al. Inst. Phys. Conf. Ser.N 152, Section D. 1997. Pres.at the 11 ICTMC-11. P.573-577.

УДК 621.9.08

Костюк Д.А.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ АКУСТИЧЕСКОГО СИГНАЛА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА СРЕД

ВВЕДЕНИЕ

Хотя отражение непрерывных и импульсных акустических сигналов от границы раздела сред изучено теоретически и экспериментально весьма подробно [1, 2], случай отражения акустической волны от среды, обладающей сильным поглощением звуковых колебаний, представляет значительный научный и практический интерес. В данной работе нами анализируются и развиваются недавние результаты по нормальному отражению акустических продольных [3] и поперечных [4] волн от плоской границы раздела твердого тела с сильно диссипативной средой (СДС), в качестве которой может служить вязкая жидкость.

1. ТЕОРИЯ

Рассмотрим используемую теоретическую модель. Пусть из твердого тела 1 в исследуемый объект 2 нормально к плоской границе раздела сред $x=0$ распространяется непрерывная гармоническая волна, которая частично отражается, а прошедшая волна в СДС достаточно быстро затухает (см. рисунок 1).

Волновое уравнение для продольной волны (ПВ), наиболее интересной с практической точки зрения, в СДС имеет вид [1]:

$$\rho \ddot{u}_x = cu_{x,xx} + bu_{x,xxx}, \quad (1)$$

где u_x – компонента продольного смещения в продольной волне, c – модуль упругости, ρ – плотность, b – параметр