

ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Макуца М. О.

Боднарь И. В. – д-р хим. наук, профессор

Измерили тепловое расширение монокристаллов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$. Все измерения проводили в вакууме, для предотвращения окисления кристаллов. Рассчитали коэффициент теплового расширения монокристаллов перпендикулярно и параллельно главной оси кристалла. Полученные значения коэффициентов теплового расширения были использованы для расчета характеристической температуры Дебая и среднеквадратичных динамических смещений атомов. Выявили, что с ростом температуры, значения температуры Дебая уменьшаются, а среднеквадратичные динамические смещения атомов увеличиваются, что свидетельствует об ослаблении химической связи в исследованных монокристаллах с ростом температуры.

Тепловое расширение монокристаллов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$ измеряли на кварцевом dilatометре в интервале 80 – 400 К. Измерения проводили на образцах, ориентированных перпендикулярно и параллельно главной оси кристалла средними размерами 3 x 3 x 12 мм³. Температуру измеряли хромель – алюмелевой термопарой. Для предотвращения окисления кристаллов все измерения проводили в вакууме. В интервале 80 – 293 К происходил естественный нагрев образца путем испарения жидкого азота (скорость нагрева ~ 3 К/мин), а в интервале 293 – 400 К нагрев вели со скоростью 3 – 5 К/мин. Такие скорости нагрева позволяли получать воспроизводимые результаты.

Коэффициент теплового расширения рассчитывали по соотношению:

$$\alpha = \frac{l}{l_0} \cdot \frac{dl}{dT}, \quad (1)$$

где l_0 – начальная длина образца, dl/dT – изменение длины образца на 1 К.

Температурные зависимости коэффициентов теплового расширения монокристаллов перпендикулярно и параллельно главной оси кристалла представлены в таблице 1.

Анализ полученных результатов исследований показал (таблица 1), что для исследованных монокристаллов характерна значительная анизотропия теплового расширения. Коэффициент теплового расширения вдоль оси c (α_{\parallel}) больше, чем вдоль перпендикулярной оси c (α_{\perp}) при всех температурах измерения. Наиболее значительные изменения коэффициентов теплового расширения характерны для интервала температур 80–280 К, после чего влияние температуры заметно снижается и выше 300 К указанные величины изменяются незначительно.

Полученные значения коэффициентов теплового расширения были использованы для расчета характеристической температуры Дебая (Θ_D) и среднеквадратичных динамических смещений атомов $\sqrt{\bar{u}^2}$ по следующим формулам:

$$\Theta_D = 14.3/\alpha^{1/2} \bar{A}^{1/2} V^{1/3}, \quad (2)$$

$$\bar{u}^2 = 4.3 \cdot 10^{-14} [D(\Theta/T)/\Theta T + 1/4] \bar{A} \Theta, \quad (3)$$

где α – коэффициент теплового расширения, \bar{A} – средняя атомная масса, V – средний атомный объем, $D(\Theta/T)$ – функция Дебая.

Результаты расчетов по формулам (2) и (3) представлены в таблице 1. Видно, что с ростом температуры значения температуры Дебая уменьшаются, а среднеквадратичные динамические смещения атомов увеличиваются, что свидетельствует об ослаблении химической связи в исследованных монокристаллах с ростом температуры.

Таблица 1 – Коэффициенты теплового расширения, температуры Дебая и среднеквадратичные динамические смещения атомов $\text{CuIn}_7\text{Se}_{11}$

T, K	$\alpha_{\perp} \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$	θ, K	$\sqrt{u^2}, \text{Å}$	T, K	$\alpha_{\parallel} \cdot 10^6, \text{K}^{-1}$	θ, K	$\sqrt{u^2}, \text{Å}$
	3.50	416	0.1871	86	2.24	521	0.1497
	3.75	402	0.1937	96	2.49	494	0.1578
0	4.08	386	0.2020	110	2.85	461	0.1688
9	4.32	375	0.2078	119	3.09	443	0.1758
0	4.81	355	0.2193	140	3.62	409	0.1903
4	5.17	343	0.2274	154	3.97	391	0.1992
5	5.44	334	0.2332	165	4.26	377	0.2064
5	5.65	328	0.2377	175	4.54	366	0.2131
0	6.08	320	0.2466	190	4.95	350	0.2225
200	6.33	310	0.2516	200	5.23	341	0.2287
210	6.58	303	0.2565	210	5.52	332	0.2351
220	6.81	299	0.2610	220	5.80	324	0.2408
250	7.54	284	0.2746	250	6.58	304	0.2565
270	8.06	275	0.2839	270	7.14	292	0.2670
298	8.74	264	0.2956	298	7.91	277	0.2812
352	9.53	252	0.3087	352	8.37	269	0.2893
400	9.64	251	0.3105	400	8.48	268	0.2912

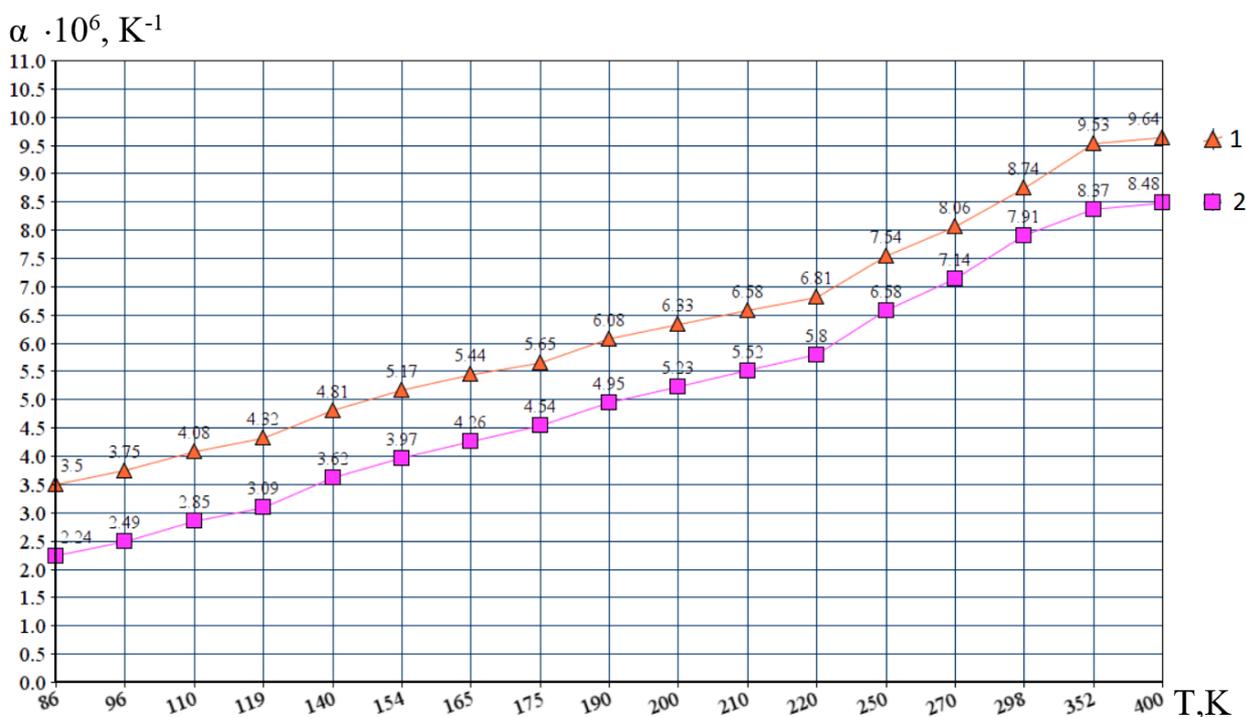


Рисунок 1 – График температурной зависимости коэффициентов теплового расширения монокристаллов перпендикулярно (1) и параллельно (2) главной оси кристалла

Список использованных источников:

- Hönle, W. Cryst. Res. Technol/ W. Hönle, G. Kühn, U. Boehnke // — 1998. — Vol. 23. — №10/11. — P. 1347. Vol. 384. — No. 1 — 2. — P. 1000 — 1002.
- Wasim, S.M. Rhys. Stat. Sol./ S.M. Wasim, C. Rincon, G. Marin // — 2002. — Vol. 194. — №1. — P.244.
- Marin, G. Jpn. J. Appl. Phys./ G. Marin, R. Marguez, R.Guevara, S.M. Wasim // — 2000. — Vol.39. — Suppl. 39–1 — P.44.