

О ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ РЕНТГЕНОВСКИХ ИНТЕРФЕРЕНЦИЙ МОНОКРИСТАЛЛОВ ДИАРСЕНИДА ЦИНКА

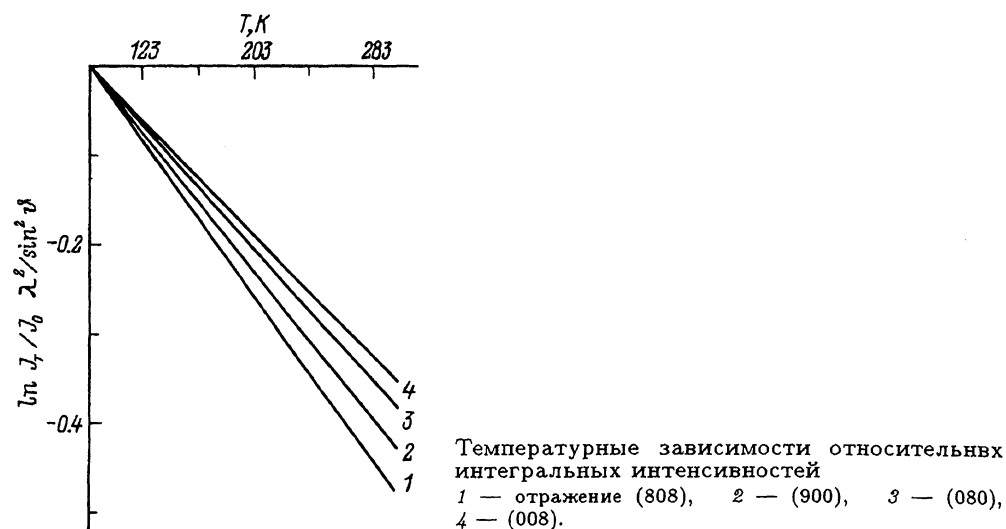
*В.Н.Балазюк, Г.Ю.Богачев, Е.И.Гешко, С.Ф.Маренкин, В.П.Михальченко,
Д.И.Пищиков, А.И.Раренко, С.А.Чорней*

Рентген дифрактометрическим методом в монохроматических $\text{CuK}\alpha$, $\text{FeK}\alpha$, $\text{CoK}\alpha$ -излучениях на установке «Дрон-2» определялись температурные смещения и относительные интегральные интенсивности рентгеновских отражений высоких порядков (900), (080), (0010) и (808) монокристаллов соединения ZnAs_2 в интервале температур 83–293 К. Монокристаллы диарсенида цинка (моноклинная сингония, пространственная группа $P2_1/c(C_{2h}^5)$ [1]) выращены методом направленной кристаллизации из раствора по Бриджмену. Степень монокристалличности образцов проверялась рентгентопографическими методами. Температурные зависимости межплоскостных расстояний $d_{hkl} = f(T)$ в указанном интервале оказались нелинейными. Рассчитанные компоненты тензора термического расширения $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ в кристаллографических осях и приведенные к главным осям компоненты $\alpha_{11}, \alpha_{22}, \alpha_{33}$ представлены в табл. 1 ($\alpha_2 = \alpha_{22}$). Из этой таблицы можно усмотреть, что исследуемые кристаллы, вопреки ожидаемому, не обладают четко выраженной анизотропией тепловых колебаний. С понижением температуры коэффициенты термического расширения проявляют тенденцию к уменьшению и анизотропия тепловых колебаний становится более существенной.

Таблица 1

Зависимость компонент тензора термического расширения
в главных кристаллографических осях от температуры

Т, К	10^{-6}K^{-1}					
	α_{11}	α_{22}	α_{33}	α_1	α_3	α_5
93	3.12	2.31	5.67	4.07	5.15	-1.12
113	4.02	3.17	6.02	4.82	5.43	-1.02
133	4.81	3.85	6.31	5.42	5.75	-0.85
153	5.42	4.45	6.65	5.92	6.02	-0.65
173	5.85	5.00	6.91	6.32	6.27	-0.45
193	6.13	5.45	7.15	6.65	6.51	-0.20
213	6.25	5.85	7.41	6.95	6.67	0.1
233	6.45	6.12	7.65	7.21	6.82	0.4
253	6.61	6.35	7.85	7.42	6.95	0.75
273	6.72	6.55	8.06	7.55	7.02	1.10
293	6.81	6.84	8.30	7.77	7.14	1.52



На рисунке приведены температурные зависимости относительных интегральных интенсивностей

$$\ln \frac{J_T}{J_0} \frac{\lambda^2}{\sin^2 \vartheta} = f(T)$$

диарсенида цинка (λ — длина волны, ϑ — Брегговский угол отражения, J_0 и J_T — относительные интегральные интенсивности при $T = 83$ К и при температуре T из данного интервала соответственно), которые в пределах точности эксперимента оказались линейными функциями температуры в соответствии с теорией Дебая–Валлера, что обусловлено сравнительно слабой агармоничностью колебаний решетки ZnAs_2 . Наклоны кривых

$$\ln \frac{J_T}{J_0} \frac{\lambda^2}{\sin^2 \vartheta}$$

отражают анизотропию среднеквадратических смещений атомов $\langle U^2 \rangle_{[hkl]}$ и соответственно эффективных рентгеновских характеристических температур $\theta_{[hkl]}$. Численные значения $\langle u^2 \rangle_{[hkl]}$ и $\Theta_{[hkl]}$ при комнатной температуре с учетом поправок на тепловое диффузное рассеяние по [2] приведены в табл. 2. Следует отметить, что $\langle U^2 \rangle$ рассчитаны нами исходя

Таблица 2

Среднеквадратические смещения атомов решетки и эффективные рентгеновские характеристические температуры

$[hkl]$	$\langle U^2 \rangle \cdot 10^3, \text{ \AA}$	$\theta_p, \text{ K}$
[100]	1.11	238
[010]	0.92	256
[001]	0.88	262
[101]	1.22	222

из близости атомных масс Zn и As. Для более строгого решения вопроса об однозначности перехода от $\langle u^2 \rangle$ к Θ необходим учет соответствующих функций атомного рассеяния.

Анализ значений α_{kl} , $\langle u^2 \rangle_{[hkl]}$ и $\theta_{[hkl]}$ для диарсенида цинка показал, что наибольшая жесткость связи соответствует направлениям [001] и [010]. Среднее значение $\Theta_p = 237$ К находится в хорошем согласии с литературными данными θ_D , рассчитанной из измерений теплоемкостных данных поликристаллических образцов $ZnAs_2$ ($\theta_c = 234$ К [3]).

Полученные данные по тепловому расширению и ранее измеренные нами компоненты тензора упругих модулей [4] позволили вычислить тензор обобщенных коэффициентов Грюнайзена γ_i в квазигармоническом приближении

$$\gamma = \begin{vmatrix} 0.71 & 0 & 0.06 \\ 0 & 0.66 & 0 \\ 0.006 & 0 & 0.74 \end{vmatrix}.$$

В заключение отметим, что моноклинный угол β , рассчитанный по известному соотношению [5], оказался равным $102^\circ 18'$. Он практически не зависит от температуры.

Список литературы

- [1] Flut M.E. // Acta Cryst. 1974. V. B30. P. 122-126.
- [2] Гешко Е.И., Михальченко В.П., Шарлай Б.М. // УФЖ. 1971. № 12. С. 2066.
- [3] Даниленко Г.Н., Даниленко В.Е., Карапетянц М.Х. и др. // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. 1977. Т. 13. № 13. С. 214.
- [4] Балазюк В.Н., Богачев Г.Ю., Курячий В.Я., Маренков С.Ф., Михальченко В.П., Пищиков Д.И., Раренко А.И. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 10. С. 2777.
- [5] Ежкова З.И., Жданов Г.С., Уманский М.М. // Кристаллография. 1959. Т. 4. № 2. С. 249.

Черновицкий государственный
университет

Поступило в Редакцию
31 мая 1993 г.