

- [2] Theory of Chemisorption. Edited by J. R. Smith. // Springer-Verlag, Berlin- New York, 1980.
- [3] Поверхностные свойства твердых тел. Под ред М.Грина. М.: Мир 1980.
- [4] Зенгуил Э. Физика поверхности. М.: Мир, 1980.
- [5] . Х.Дункен, В.Лигин. Квантовая химия адсорбции на поверхности твердых тел. М.: 1987.
- [6] Newns D.M. // Phys.Rev. 1969. 178. No3. p.1123-1135.
- [7] Anderson P.W. // Phys. Rev. 1961. 124. No1. p.41-53.
- [8] R. Schrieffer and R.Gomer. // Surf. Science. 1971. 25. p.315.
- [9] J.L.Moran-Lopez and L.M.Falicov. // Phys.Rev. B, 1982. 26. No5. p.2560-2565.
- [10] M.Streszewski and C.Jendrzjek. // Phys.Rev. B. 1986. 34. No6. p.3750-1135.

УДК 537.226;538.936;621.315

**Франів А.В., Пелецишин Р.В., Тернавська С.В., \*Франів О.В.**  
**Львівський національний університет ім. Ів.Франка, фізичний факультет**  
**\*ДУ“Львівська політехніка”, кафедра фізики**

## **СТРУКТУРА ТА ДИНАМІКА ГРАТКИ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$**

© Франів А.В., Пелецишин Р.В., Тернавська С.В., \*Франів О.В., 2000

**Наведено експериментальні результати досліджень фізичних властивостей вперше вирощених твердих розчинів заміщення  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  в області  $0,2 < x < 1,0$ . Розраховано параметри кристалічної ґратки та концентраційна залежність її об'єму у процесі катіонного заміщення вузлів. На основі ІЧ-спектрів поглинання зроблено висновки про особливості фононної підсистеми ТРЗ. Отримано частоти внутрішньо- та міжмолекулярних коливань і величину їх анізотропії вздовж напрямків  $E \parallel c$  і  $E \parallel a$ .**

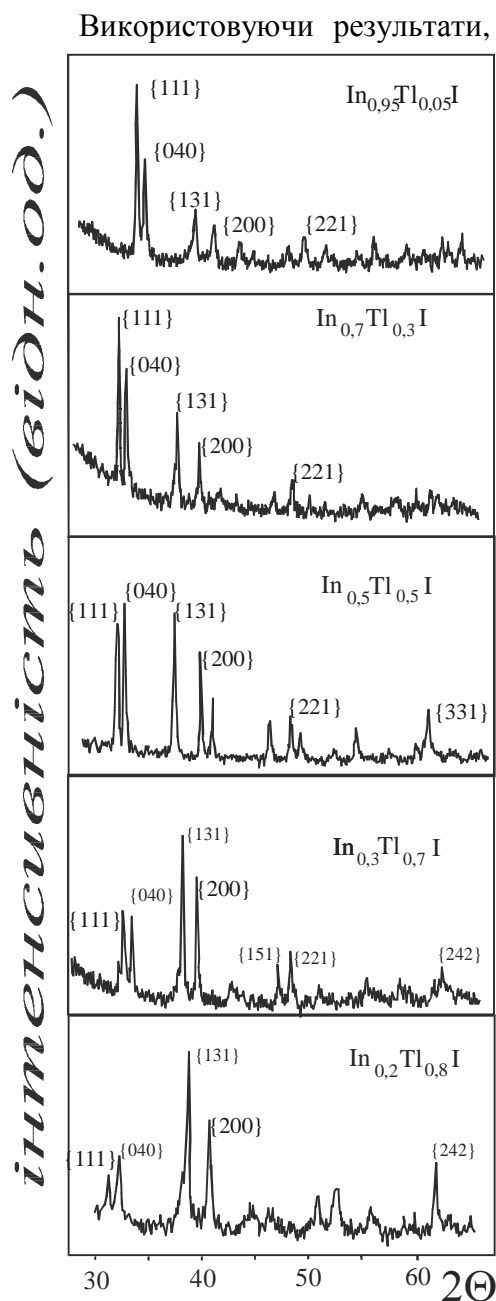
**In manuscript points experimental results about investigation of physical properties of first grown solid solution  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  in concentration region  $0,2 < x < 1,0$ . Counted parameter crystal lattice and particularity variance it bulks in process of cation substitution knots. On infrared reflection spectrum conclude character phonon dispersion in solid solution.**

### **Вступ**

Науковий інтерес до сполук  $\text{A}^3\text{B}^7$  пов'язаний з особливістю їх кристалічної будови і наявністю різкої анізотропії механічних, електричних й оптичних констант вздовж трьох кристалографічних напрямків. Для практичного застосування, а саме для можливості керованої зміни таких фізичних характеристик, як ширина забороненої зони, показник заломлення та коефіцієнт поглинання, перспективними є тверді розчини заміщення (ТРЗ)  $\text{InBr}_x\text{Cl}_{1-x}$ ,  $\text{InB}_x\text{I}_{1-x}$  та  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ . Деякі результати з динаміки екситонних збуджень і дисперсії показника заломлення вже опубліковані нами в роботах [1-3]. У цій статті обговорюються результати експериментальних досліджень структурних параметрів та інфрачервоні спектри

відбивання з метою з'ясування особливостей трансформації кристалічної ґратки та фоновної підсистеми ТРЗ  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ .

### 1. Вирощування і структура кристалічної ґратки $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$



**Рис. 1.** Дифрактограми твердого розчину заміщення  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$

ортормобічної ( $D_{2h}^{17}$ ) ґратки. Аналіз дифрактограм і розрахованих за їх допомогою постійних елементарної ґратки **a**, **b**, **c**, що наведені в таблиці, однозначно вказують на те, що отримані нами кристали становлять ряд неперервних ТРЗ. Підтвердженням зробленого висновку може служити наведена на рис.2 концентраційна залежність об'єму елементарної комірки  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ .

Функція  $V(x)$  є лінійною і монотонною в області  $1,0 > x > 0,2$ , що вказує на відсутність фазових структурних переходів в отриманих зразках. Отже, ТРЗ утворюється при заміщенні

іонів індію на талій у вузлах орторомбічної ґратки, зростання об'єму елементарної комірки відбувається за рахунок того, що іонний радіус  $Tl > In$ .

### Постійні елементарної комірки ТРЗ $In_xTl_{1-x}I$ просторової групи $D_{2h}^{17}$

кристал	$a, \text{Å}$	$b, \text{Å}$	$c, \text{Å}$	$V, \text{Å}^3$
InI	4,729	12,688	4,930	295,367
$In_{0,95}Tl_{0,05}I$	4,720	12,719	4,939	296,51
$In_{0,7}Tl_{0,3}I$	4,698	12,776	4,978	298,776
$In_{0,5}Tl_{0,5}I$	4,658	12,817	5,050	301,494
$In_{0,4}Tl_{0,6}I$	4,631	12,852	5,084	302,587
$In_{0,3}Tl_{0,7}I$	4,618	12,864	5,128	304,414
$In_{0,2}Tl_{0,8}I$	4,605	12871	5,132	305,199
TlI	4,559	12,922	5,229	308,048

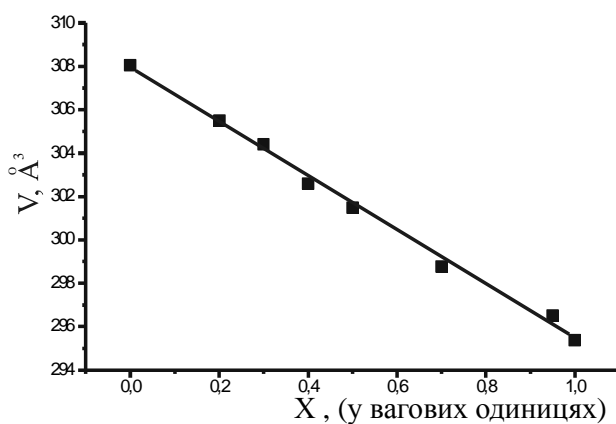


Рис. 2. Концентраційна залежність об'єму елементарної комірки

### 2. ІЧ- спектри ТРЗ $In_xTl_{1-x}I$

Експериментальні дослідження оптичних властивостей  $In_xTl_{1-x}I$  виконувались, насамперед, для з'ясування анізотропії фонованого спектра кристалів залежно від орієнтації світлового вектора. ТРЗ  $In_xTl_{1-x}I$  характеризуються центром інверсії і утворюються з двох молекул

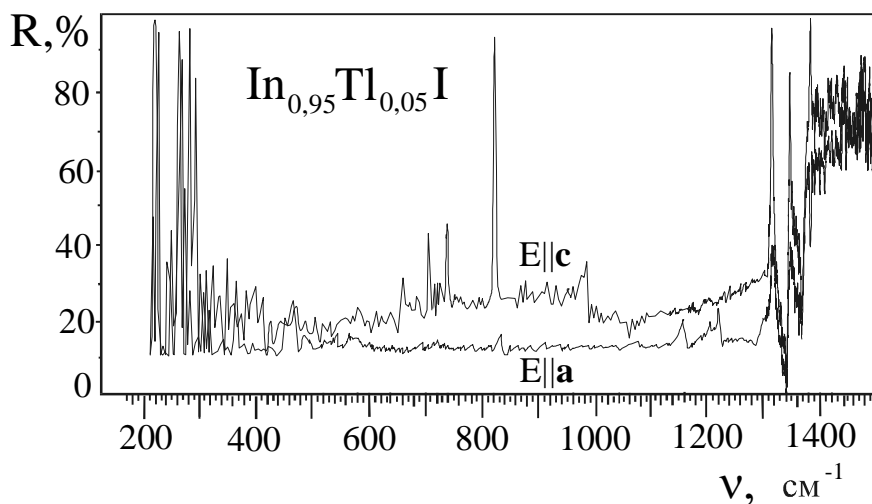


Рис. 3. Спектри ІЧ-поглинання ТРЗ  $In_{0,95}Tl_{0,05}I$  в напрямку: 1-  $E \parallel c$ , 2-  $E \parallel a$

(4 атоми) у примітивній комірі. Відповідно у фононному спектрі повинні проявлятися 9 коливних оптичних мод, що перетворюються незвідними представленнями групи  $D_{2h}^{17}$

$$2A_{1g} + 2B_{1g} + 2B_{3g} + B_{1u} + B_{2u} + B_{3u},$$

де перші 6 мод спостерігаються у спектрах комбінаційного розсіювання (КР), решта 3 моди дозволені в ІЧ фотопереходах. З міркувань симетрії впливає еквівалентність  $B_{1u}$  і  $B_{2u}$  представлень, тому експериментальні дослідження необхідно проводити вздовж напрямків  $E \parallel c$  та  $E \parallel a$ , що розташовані у площині шару і відповідають цим представленням.

Вимірювання здійснювали на інфрачервоному спектрофотометрі Specord-M-80 в спектральному діапазоні 200-1500  $\text{cm}^{-1}$ , з роздільною здатністю не гірше ніж 1  $\text{cm}^{-1}$ .

На рис.3 наведені ІЧ-спектри ТРЗ  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ . Можна виділити такі характерні особливості. В області 1300-1500  $\text{cm}^{-1}$  спостерігаються три інтенсивні смуги з максимумами 1320  $\text{cm}^{-1}$ , 1350  $\text{cm}^{-1}$  та 1385  $\text{cm}^{-1}$  в поляризації  $E \parallel c$ . Істотна анізотропія простежується в області, що формується внутрішньомолекулярними І-І коливаннями. Для класифікації коливань, використовуючи методики [7], розраховували оптичні функції ТРЗ: дійсну ( $\epsilon_1$ ), уявну ( $\epsilon_2$ ) частини діелектричної проникності і функції оптичних втрат  $\text{Im}\{-1/\epsilon\}$ . Встановлено, що найменше розщеплення LO-TO ( $\sim 15 \text{ cm}^{-1}$ ). Таке розщеплення характерне для міжмолекулярних коливань типу  $\{\text{InI}\}-\{\text{TlI}\}$ . Групи смуг в області 200-400  $\text{cm}^{-1}$  для поляризації  $E \parallel c$  та  $E \parallel a$  з розщепленням (10-25  $\text{cm}^{-1}$ ) ідентифікуються як коливання І-І. У зв'язку з існуванням ланцюжків типу In-Tl вздовж напрямку  $E \parallel c$  очевидно, що інтенсивна смуга 820  $\text{cm}^{-1}$  відповідає коливанню між заміщуваними атомами. З отриманих результатів випливає, що анізотропія кристалічного (внутрішньомолекулярного) поля перевищує відповідні міжмолекулярні розщеплення LO-TO.

### Висновки

Насамкінець зауважимо, що отримані експериментальні результати вказують на перспективність досліджень дисипативної підсистеми ТРЗ  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ , у зв'язку з хорошим спектральним розділенням смуг ІЧ поглинання і специфікою дисипативної підсистеми, що зумовлена різкою анізотропією хімічного зв'язку. На наш погляд, досліджувані зразки є кристалами неперервного ряду твердих розчинів заміщення. Фононна підсистема  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  характеризується сукупністю смуг, поляризаційна залежність коефіцієнтів поглинання в максимумах яких дозволяє зробити висновок про можливість практичного застосування ТРЗ як матеріалів для фазово-амплітудних модуляторів ІЧ- випромінювання.

- [1] Блонський. І.В., Бігун М.І., Лунь Ю.О., Франів А.В. УФЖ, 1992, 37, 971.
- [2] Блонський І.В., Бігун М.І., Лунь Ю.О., Франів УФЖ, 1992,37, 547,.
- [3] Франів А.В., УФЖ, 1999,44, 1473.
- [4] Постникова О.П., Денисов Ю.Н., Федоров П.И.. ЖНХ, 1973,18, 1436.
- [5] Jones R., Tempelton D. Acta crystal, 1955,8, 847.
- [6] Levy F., Mooser E. Helv. Phys. Acta, ), 1972, 45, 69.
- [7] Крочук А.С., Китык И.В., Колинко Н.И., Франив А.В., Неорганические материалы, 1992, 28, 619.
- [8] Блонский И.В., Крочук А.С., Стецишин Т. Л., Франив А.В., ФТТ, 1986, 28, 3136.