

З.А. Дутчак, Л.М. Ракобовчук  
Національний університет "Львівська політехніка",  
кафедра електронних приладів,

## ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕХОДУ АМОРФНОГО СЕЛЕНУ В КРИСТАЛІЧНИЙ СТАН

© Дутчак З.А., Ракобовчук Л.М., 2005

Z. Dutchak, L. Rakobovchuk

## THE FEATURES OF TRANSITION OF AMORPHOUS SELENIUM IN THE CRYSTALLINE STATE

© Dutchak Z., Rakobovchuk L., 2005

Рентгенографічним методом досліджений аморфний селен. Встановлено, що в кристалічний стан він переходить при температурі 343 К. За допомогою аналізу кривих інтенсивності малокутової дифракції рентгенівського випромінювання та функції радіального розподілу атомів визначені параметри ближнього порядку: радіус координаційної сфери та координаційне число.

The amorphous selenium was explored by X – ray method. It is set that in the crystalline state it passes at a temperature by 343 K. With the help of analysis of curves of intensity of small-angular diffraction of X-ray radiation and function of the radial distributing of atoms the parameters of near order (radius of coordinating sphere and co-ordinating number) were calculated.

Унікальні фотоелектронні властивості аморфного Se роблять його ідеальним фоточутливим матеріалом для ксерокопіювання і фотопровідником в цифровій радіографії [1]. Досліджені структурні і електронні властивості селену під впливом високого тиску [2], структурні механізми від неметалевої до металевої фази в кристалічному Se [3–5]. Рентгенографічні дослідження аморфного селену при температурі переходу в кристалічний стан досі не велись.

Досліджуваний аморфний селен був отриманий методом поршень – ковадло, в основі якого лежить швидке загартування розплаву [6]. Ковадло і основна частина поршня виготовлені із технічної міді. Цей метод має переваги над іншими завдяки отриманню однорідних за товщиною аморфних зразків.

Реєстрація рентгенівського розсіяного випромінювання здійснювалась на установці КРМ за методикою [7]. Як джерело рентгенівського випромінювання застосовували трубку БСВ-23 з мідним анодом  $\text{CuK}_\alpha$ . Монохроматизація випромінювання відбувалась за допомогою нікелевого фільтра. Дифрактограми отримані в режимі автоматичного крокового сканування детектора БДС–6. Точність вимірювання інтенсивності розсіяння на "хвості" кривої становить  $\sim 3\%$ .

Виконані нами дослідження аморфного селену показали, що в кристалічний стан він переходить при температурі 343 К. Критерієм аморфного стану були результати дифракційного експерименту – гало на рентгенограмі та характерне для аморфного стану малокутове розсіяння. Тому для визначення параметрів ближнього порядку з точністю  $\pm 2$  К температури рентгенографування дослідження здійснювались при температурах 340 К (343(–)) і 345К (343(+)), оскільки відомо, що температура переходу речовини із аморфного стану в кристалічний залежить від швидкості нагрівання або часу витримки при заданій температурі [8].

Отримані експериментальні криві інтенсивності розсіяння рентгенівського випромінювання були оброблені за методикою [9], і відповідні результати подані на рис.1 і рис. 2.

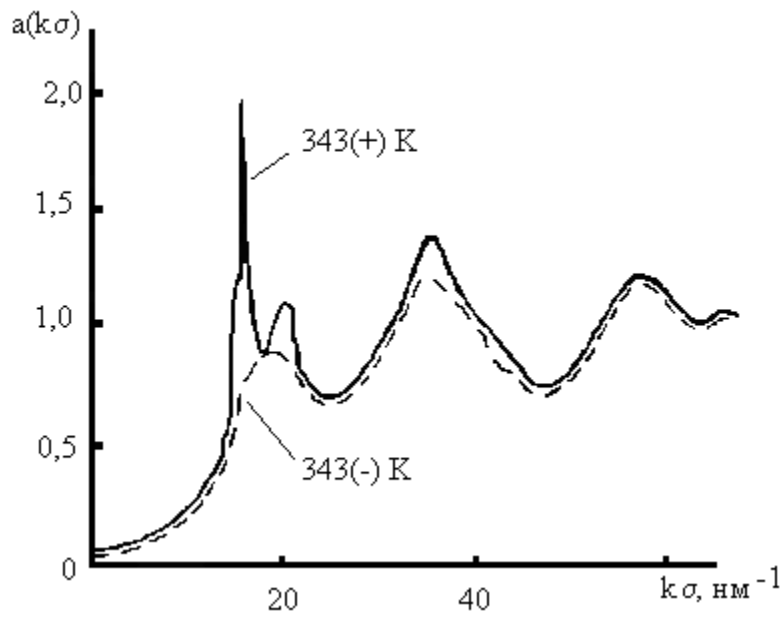


Рис. 1. Структурний фактор аморфного селену при температурі кристалізації:

$$k = 4\pi \frac{\sin\theta}{\lambda}; \sigma - \text{діаметр жорсткої сфери.}$$

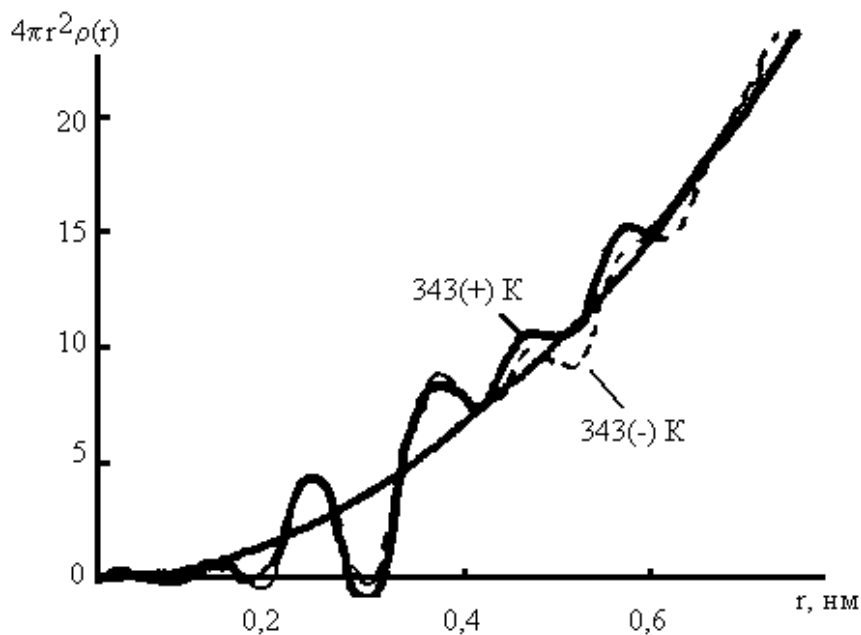


Рис. 2. КРРА аморфного селену при температурі кристалізації

Аналізуючи залежності, які зображені на рис. 1, можна сказати, що структурний фактор Se при 343(-)К являє собою криву, типову для його аморфного стану [2], а при 343(+К) на цій кривій з'являються аномалії і вузькі піки, які свідчать про початок кристалізації. Найчіткіше аномалії проявляються в області першого максимуму. При 343(-)К він при  $18,5 \text{ nm}^{-1}$ , а при 343(+К) – роздвоюється (перший його пік знаходиться при  $15,8 \text{ nm}^{-1}$ , а другий – при  $20,7 \text{ nm}^{-1}$ ). Півширина першого піка приблизно дорівнює  $1,5 \text{ nm}^{-1}$ , тобто він сформований як інтерференційна лінія від кристалічного об'єкта. В області другого максимуму істотні аномалії не спостерігаються. Незначні відмінності структурних факторів спостерігаються в інтервалі  $42 - 46 \text{ nm}^{-1}$ . В області третього максимуму структурні фактори повністю збігаються.

На рис. 2 наведено криві радіального розподілу атомів (КРРА) селену при температурі його кристалізації.

Аналізуючи ці криві, ми визначили площі під максимумами та їх положення. Площа під максимумами дає координаційне число  $n$ , тобто кількість атомів, що міститься в сферичній оболонці радіусом  $r$  і товщиною  $dr$ . Відстань максимуму від початку координат дає змогу зробити висновки про радіус координаційної сфери  $r$  [9].

Кількісні параметри ближнього порядку аморфного селену, які визначені з кривих радіального розподілу (рис. 2), наведені у таблиці.

#### Кількісні параметри ближнього порядку аморфного селену

T, K	r, nm			n		
	1	2	3	1	2	3
343(-)	0,238	0,370	0,475	2,07	6,5	9,8
343(+)	0,238	0,373	0,475	2,07	6,2	10,6

Аналіз отриманих результатів показує, що при істотній зміні кривої інтенсивності розсіяння рентгенівського випромінювання в області першого максимуму (рис. 1), крива радіального розподілу має незначні зміни (рис. 2). Дійсно параметри ближнього порядку для першої і другої координаційних сфер практично не відрізняються, а відмінними є параметри для третьої координаційної сфери (див. таблицю), які демонструють збільшення ступеня кристалічності аморфного селену.

Отже, результати наших досліджень показали, що криві інтенсивності розсіяння рентгенівського випромінювання (структурні фактори) як первинна інформація є чутливіші до зміни структури ближнього порядку при переході речовини з аморфного в кристалічний стан, що, своєю чергою, свідчить на користь застосування дифракційних методів для визначення області переходу аморфний стан – кристал.

1. Schlaich H, Lindner GG, Felmann J, Gobel EO, Reinen D. *Inorg Chem.* – 2000. – 39(13). – P. 2740 – 2746.

2. Hiroaki Ohtani, Toshio Yamaguchi, Fumiko Yonezawa. *RIKEN Review June.* – 2000. – 29. – P. 103 – 105.

3. Warren W. W., Dupree Jr., Dupree R. *Phys. Rev.* – 1980. – B 22. – P. 2257.

4. Endo H., *Non-Cryst J. Solids.* – 1993. – 156. – P. 667.

5. Ohtani H. et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* -1998. – 67. – P. 2807.

6. Займан ДЖ. *Модели беспорядка.* – М., 1982.

7. Липатов Ю.С., Шилов В.В., Гомза Ю.П., Кругляк Н.Е. *Рентгенографические методы изучения аморфных систем.* – К., 1982.

8. Татарінова Л.И. *Структура твердых аморфных и жидких веществ.* – М., 1983.

9. Дутчак Я.И. *Рентгенография жидких металлов.* – Львов. 1977.