

PACS: 72.20.-i

А.Ю. Моллаев¹, Л.А. Сайпулаева¹, Ю.М. Иванов²

ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИЕ ТОЧКИ И ПАРАМЕТРЫ
ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ
ПРИ ВСЕСТОРОННЕМ СЖАТИИ В *p*-CdTe

¹Институт физики ДНЦ РАН
Россия, 367003, г. Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
E-mail: kamilov@datacom.ru, mollaev@datacom.ru

²Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова РАН
117333, г. Москва, В-333, Ленинский проспект, 59

*В *p*-CdTe на барических зависимостях электросопротивления в области давлений $P = 0-4$ GPa при повышении давления наблюдались два четких фазовых перехода при значениях 1.8 и 3.2 GPa: цинковая обманка–киноварь, киноварь–натрий хлор. При сбросе давления удалось зафиксировать только один фазовый переход при $P = 2$ GPa. На основе собственных экспериментальных данных и теории формирования гетерофазных структур при высоком давлении определены некоторые характеристические точки и параметры фазового перехода. Согласно модели гетерофазная структура–эффективная среда рассчитана динамика изменения исходной фазы I от давления в области фазового перехода.*

Теллурид кадмия – полупроводник группы A^2B^6 – кристаллизуется при нормальных условиях в кубическую структуру цинковой обманки. Поведение CdTe в течение последних 30 лет вызывает непреходящий интерес. В ранних исследованиях были обнаружены фазовые переходы: 1) цинковая обманка–натрий хлор в диапазоне давлений 2.8–3.9 GPa [1–4] и 2) натрий хлор–белое олово [1,5,6] в области давлений 9–12 GPa. В работе [7] показано, что первый переход имеет более сложный характер. В области $P \approx 2.5-4$ GPa имеют место фазовые переходы: 1) цинковая обманка–киноварь, 2) киноварь–натрий хлор. В [8] описаны рентгеноструктурные исследования CdTe при высоком давлении в интервале температур 300–1173 K; в диапазоне давлений 0–3.4 GPa также обнаружены два фазовых перехода.

Нами исследованы зависимости удельного электросопротивления на *p*-CdTe при компрессии и декомпрессии давления в гидростатических условиях при $P \leq 9$ GPa в области комнатных температур. Измерения проводили в аппарате высокого давления типа «тороид» при $P \leq 9$ GPa [9] при подъеме и сбросе давления в области комнатных температур. Устройство представляет

собой аппарат высокого давления, который в целях одновременного измерения удельного электросопротивления и эффекта Холла был помещен в многовитковый соленоид напряженностью магнитного поля $H < < 5$ кОе. В качестве рабочей ячейки используется фторопластовая капсула полезным объемом ~ 80 мм³, имеющая 12 электровыводов, что позволяет одновременно измерять удельное электросопротивление, эффект Холла и контролировать давление во всем измеряемом диапазоне давлений при компрессии и декомпрессии. Манганиновый манометр был предварительно градуирован по реперным точкам (висмут, таллий и т.д.). Так как структура обратимого полиморфного превращения при высоком давлении существенно зависит от степени совершенства образца и условий проведения эксперимента, мы использовали только однородные монокристаллические образцы, которые представляли собой прямоугольный параллелепипед размерами 2.8×0.6×0.5 мм. Основные характеристики измеренных образцов приведены в таблице.

Таблица

Характеристики исследованных образцов *p*-CdTe

Номер образца	p , см ⁻³	ρ , Ω·см	μ , см ² /V·с
1	$1.1 \cdot 10^{16}$	3.9	83
2	$7.4 \cdot 10^{15}$	10	82
3	$1.5 \cdot 10^{14}$	1.5	60
4	$8 \cdot 10^{12}$	40000	23

Большое внимание уделяли режиму подъема и сброса давления и подбору жидкости, передающей давление, в качестве которой была выбрана смесь этанола-метанола в соотношении 4:1, гидростатичная до 10 GPa. Специальные измерения проводили для проверки гидростатичности системы, одновременно измеряли удельное электросопротивление двух идентичных образцов *n*-Ge, расположенных взаимно перпендикулярно. Полученные результаты при компрессии и декомпрессии удовлетворительно совпадают, что свидетельствует об отсутствии осевых напряжений и гидростатичности давлений в их измеряемом диапазоне.

На барических зависимостях электросопротивления в области давлений $P = 0-4$ GPa наблюдались два четких максимума при значениях 1.8 и 3.2 GPa (рис. 1). Согласно [7] мы связываем это с фазовыми переходами: цинковая обманка–киноварь, киноварь–натрий хлор. При сбросе давления удалось зафиксировать только один фазовый переход при $P = 2$ GPa.

На основе собственных экспериментальных данных, теории поведения гетерофазных структур при высоких давлениях и методики, описанной в работе [10], определены характеристические точки и параметры фазового перехода при высоком давлении: P_0 и P'_0 – точка фазового равновесия соответственно в прямом и обратном направлениях (здесь и ниже индекс штрих относится к данным, полученным при сбросе давления); P_{0m} и P'_{0m} – точка метастабильного равновесия соответственно в прямом и обратном направлениях;

$P_{h,t}$ – гистерезис термодинамический; $P_{h,f}$ и $P'_{h,f}$ – гистерезис флуктуационный соответственно при подъеме и сбросе давления.

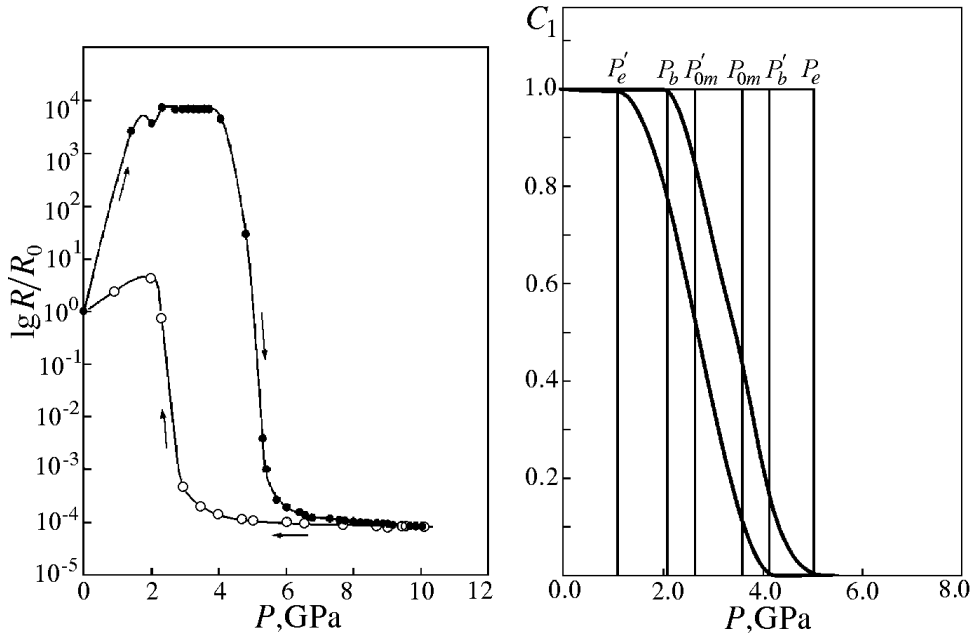


Рис. 1. Зависимость удельного сопротивления в p -CdTe от давления при комнатной температуре

Рис. 2. Зависимость объемной доли фазы C_1 от гидростатического давления при компрессии и декомпрессии в области фазового превращения для образца p -CdTe

Определив из эксперимента значения $P_b = 2.1$ GPa (начала) и $P_e = 5$ GPa (конца фазового превращения) при подъеме давления и $P'_b = 4.1$ GPa, $P'_e = 1.2$ GPa – при сбросе давления, согласно методике [10] рассчитали:

$$P_0 = P'_0 = 0.5(P_b + P'_b) = 0.5(P_e + P'_e) = 3.1 \text{ GPa}; \quad (1)$$

$$P_{0m} = 0.5(P_e + P_b) = 3.55 \text{ GPa}, \quad P'_{0m} = 0.5(P'_e + P'_b) = 2.65 \text{ GPa}; \quad (2)$$

$$P_{h,t} = P_b - P'_e \approx P_e - P'_b \approx P_{0m} - P'_{0m} \approx 0.9 \text{ GPa}; \quad (3)$$

$$P_{h,f} = P_e - P_b = 2.9 \text{ GPa}, \quad P'_{h,f} = P'_b - P'_e = 2.9 \text{ GPa}. \quad (4)$$

Поскольку при сбросе давления нам не удалось обнаружить двух фазовых переходов, как это наблюдалось при подъеме давления, за исходную фазу I здесь и ниже мы принимали фазу киновари.

С целью изучения гистерезиса электрического сопротивления и математического описания области фазового превращения при высоком давлении в терминах C_1 , C_2 и $x = \rho/\rho_1$ (ρ – эффективное удельное сопротивление в точке

P ; ρ_1 – удельное электросопротивление фазы I, экстраполированное к точке P_x , $P_b < P_x < P_e$ из области, предшествующей фазовому превращению) применим модель гетерофазная структура–эффективная среда [10].

Если в дополнение к [10] принять во внимание различие коэффициентов A_i , учитывающих конфигурацию фазовых включений для различных фаз и их зависимость от давления и величины $\alpha = \rho_i/\rho_f$, для области фазового превращения получим соотношение

$$kx^2 + [3(1 - C_1 + \alpha C_1) - (1 + \alpha)k]^x - \alpha(3 - k) = 0, \quad (5)$$

где $k = [C_1(A_1 - A_2) - A_1]$; $\alpha = \rho_2/\rho$; $x = \rho/\rho_1$; $A_1 = 1 + 2(1 - \alpha)C_1$; $A_2 = \alpha + (1 - \alpha)C_1^n$.

По $x(P)$ из уравнения (5) вычислена барическая зависимость объемной доли фазы I $C_1(P)$ для значений подгоночного параметра $n = 15$ (n – подгоночный параметр, учитывающий вероятность формирования бесконечного кластера новой фазы в промежуточной области).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Грант № 02–02–17888.

1. К. Руман, Структурные исследования некоторых окислов и других халькогенидов при нормальных и высоких давлениях, Мир, Москва (1969).
2. G.A. Samara, H.G. Drickamer, J. Phys. Chem. Solids **23**, 457 (1962).
3. J.R. Mei, V. Lemos, Solid State Commun. **52**, 785 (1984).
4. I.Y. Borg, D.K. Smith, J. Phys. Chem. Solids **28**, 49 (1967).
5. М.А. Ильина, ФТТ **27**, 195 (1985).
6. Л.Ф. Верещагин, С.С. Кабалкина, Рентгеноструктурные исследования при давлении, Наука, Москва (1979).
7. M.I. McMahon, R.J. Nelmes, N.G. Wright, D.R. Allan, Phys. Rev. **B48**, 16246 (1993).
8. D. Martínez-García, Y.Le Godec, M. Mézouar, G. Sifosse, J.P. Itié, J.M. Besson, Phys. Status Solidi **B211**, 461 (1999).
9. L.G. Khvostantsev, V.A. Sidorov, Phys. Status Solidi **A64**, 379 (1981).
10. М.И. Даунов, М.С. Буттаев, А.Б. Магомедов, СФХТ **5**, 73 (1992).

A.Yu. Mollaev, L.A. Saypulaeva, Yu.M. Ivanov

CHARACTERISTIC POINTS AND PARAMETERS OF PHASE TRANSITION AT HYDROSTATIC COMPRESSION IN *p*-CdTe

Two clear phase transitions have been observed in *p*-CdTe on baric dependences of electroresistance in the pressure range $P = 0$ –4 GPa: a zinc-blende–cinnabar transition and a cinnabar–rock salt transition at 1.8 and 3.2 GPa, respectively. One phase transition was only fixed when decreasing the pressure down to $P = 2$ GPa. Some characteristic points and parameters of phase transition are defined on the basis of our own experimental data and the

theory of heterophase structures formation at high pressure. In accordance with the heterophase structure–effective medium model the dynamics of the initial phase I versus pressure in the region of phase transition has been calculated.

Fig. 1. Dependence of specific electroresistance in *p*-CdTe on pressure at room temperature

Fig. 2. Dependence of phase volume fraction C_1 on compression and decompression hydrostatic pressure in the region of phase transition for *p*-CdTe