

Section 1. Fundamental problems of physics, chemistry and ecology

складові (криві Гауса) з різними параметрами (рис.1). Дві криві знаходяться в домішковій області з енергетичним положенням максимумів $h\nu \approx 1,41 \text{ eV}$ та $h\nu \approx 1,51 \text{ eV}$ (рис.1). За утворення цих максимумів можуть бути відповідальними як ізольовані домішкові центри, так і скупчення домішкових центрів біля протяжних дефектів.

Залежність коефіцієнта поглинання світла в області краю власних оптичних переходів монокристаллами $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$ при $T \approx 300 \text{ K}$, добре описується правилом Урбаха [7]. Така поведінка коефіцієнта поглинання світла свідчить про участь хвостів щільності станів, обумовлених дефектністю кристалічної ґратки, у формуванні оптичних переходів. Оцінене із спектрів поглинання світла значення ширини забороненої зони становило $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$. Значення $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$ добре узгоджується з положенням максимуму фотопровідності. $E_g \approx 1,53 \text{ eV}$ визначалося при коефіцієнті поглинання світла $k \approx 300 \text{ cm}^{-1}$.

Список літератури

1. Verger L., Boitel M., Gentet M.C. Characterization of CdTe and CdZnTe detectors for gamma-ray imaging applications. *Nucl. Instr. Meth. Physics Res. A*. 2001. Vol. 458. №1-2. P. 297–309.
2. Miyajima Satoshi, Sakuragi Hideaki, Matsumoto Masao. Extraction of mean free path of charge carriers in CdZnTe crystals from measured full-energy peaks. *Nucl. Instr. Meth. Physics Res. A*. 2002. Vol. 485. №3. P. 533–538.
3. Christian Scheiber, George C. Giakos. Medical applications of CdTe and CdZnTe detectors. *Nucl. Instr. Meth. Physics Res. A*. 2001. Vol. 458, №1-2. P. 12–25.
4. Rogalski A. Infrared Photon Detectors. Bellingham. WA: SPIE Optical Engineering Pres. 2002. 568 p.
5. Божко В.В., Новосад О.В., Давидюк Г.С., Парасюк О.В., Герасимик О.Р. Електричні, оптичні та фотоелектричні властивості монокристалів $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$ ($x=0,04$). *Наук. вісн. Вол. нац. ун-ту ім. Лесі Українки: Фіз. науки*. 2012. №. 16. С. 34–39.
6. Новосад О., Божко В., Богданюк М., Божко Н. Фоточутливість та механізми проходження струму в поверхнево-бар'єрних структурах оксид- $\text{Cd}_{0,96}\text{Zn}_{0,04}\text{Te}$. *Наук. вісн. Східноєвроп. нац. ун-ту ім. Лесі Українки: Фіз. науки*. 2015. №. 10. С. 8–13.
7. Studenyak I., Kranjec M., Kurik M. Urbach Rule in Solid State Physics. *International Journal of Optics and Applications*. 2014. Vol.4. № 3. P. 76-83.

КОРЕЛЯЦІЙНІ МОДЕЛІ АНТИДИФУЗІЙНИХ І КОМУТАЦІЙНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ Fe-Ni-Cr

Кречун Марія Миколаївна, Маник Орест Миколайович

*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58002, Україна, e-mail: krechun.mariia@chnu.edu.ua*

Термоелектричні матеріали (ТЕМ) на основі потрійних систем Bi-Sb-Te р-типу та Bi-Te-Se n-типу мають широке застосування при виготовленні термоелектричних генераторів та охолоджувачів. Зростає потреба в термоелектричних модулях охолодження з робочою температурою вище $200 \text{ }^\circ\text{C}$ [1]. Створення таких модулів вимагає вирішення ряду матеріалознавчих і технологічних питань. Одним з важливих етапів при виготовленні таких модулів є створення надійних комутаційних структур. Дана робота присвячена вирішенню проблем комутації з позиції хімічного зв'язку. Це дозволяє встановити закономірності утворення контактів на молекулярному рівні; оптимізувати потребу зменшення дифузії припою в напівпровідниковий матеріал гілок термоелемента. У якості антидифузійних і комутаційних структур було вибрано систему Fe-Ni-Cr.

Результати теоретичних досліджень особливостей хімічного зв'язку заліза (Fe) приведені в роботі [2]. Аналіз різнобічної інформації про кристалічну структуру, термодинамічні та квантові закономірності Fe дав можливість встановити теоретичну модель хімічного зв'язку, визначити постійні мікроскопічної теорії, характеристичні температури, що необхідно враховувати при виборі технологічних рішень при синтезі нових матеріалів, до складу яких входить Fe.

Section 1. Fundamental problems of physics, chemistry and ecology

Наступний елемент потрібної системи Fe-Ni-Cr – нікель [3]. Ni – сріблясто-білий метал, дуже ковкий і тягучий, феромагнітний. За звичайних умов на повітрі не окислюється, стійкий проти дії атмосферних газів, сірки, галогенів. У сполуках буває дво- і тривалентним. Легко утворює комплекси різних модифікацій. Фізична природа їх виникнення ще не визначена.

Завершує розгляд вихідних компонент досліджуваної потрібної системи – хром [3]. Це сталеве-сірий, блискучий, твердий та крихкий метал, що має високу температуру плавлення. У вільному вигляді хром – сірий метал з кубічною об'ємно-центрованою ґраткою, $a = 0,28845 \text{ \AA}$ нм. Це єдина елементарна тверда сполука, яка виявляє антиферомагнітні властивості при кімнатній температурі. При температурі вище 38°C він перетворюється на парамагнетик. Хром – найтвердіший із чистих металів.

Для опису залежності температур первинної кристалізації від складу подвійних систем використовувались діаграми стану Fe-Ni, Fe-Cr, Ni-Cr, приведені на рис. 1, де введено наступні позначення:

- | | |
|--|--|
| α – тверда фаза на основі Fe; | β – тверда фаза на основі Ni; |
| γ – тверда фаза на основі Cr; | σ – тверда фаза на основі Fe-Cr; |
| Δ – тверда фаза на основі Fe-Ni; | λ – тверда фаза на основі Ni-Cr; |
| θ – тверді фази на основі проміжної сполуки Fe-Ni-Cr. | |

Із аналізу приведених на рис. 1 діаграм стану Fe-Ni [4] слідує, що дані відносно перитектичних рівноваг в різних роботах відрізняються внаслідок утворення метастабільних структур, що змінюються в широких межах в залежності від складу і термообробки, а також внаслідок малої швидкості дифузії при температурах нижче 500°C . Встановлено також, що перетворення в залізі при нагріві і охолодженні носить характер бездифузійного мартенситного типу, для якого характерний взаємозв'язок низькотемпературної поліморфної модифікації кристалічної ґратки і високотемпературної. Що стосується кристалічної структури сплавів Fe-Ni, то крім упорядкованої фази FeNi_3 зі структурою Cu_3Au , були виявлені лише об'ємно-центрована кубічна (ОЦК) із структурою типу A2 і ґране-центрована кубічна (ГЦК) зі структурою типу A1. Вимірювання періоду ґратки показали, що введення Ni в Fe веде до розширення ґратки.

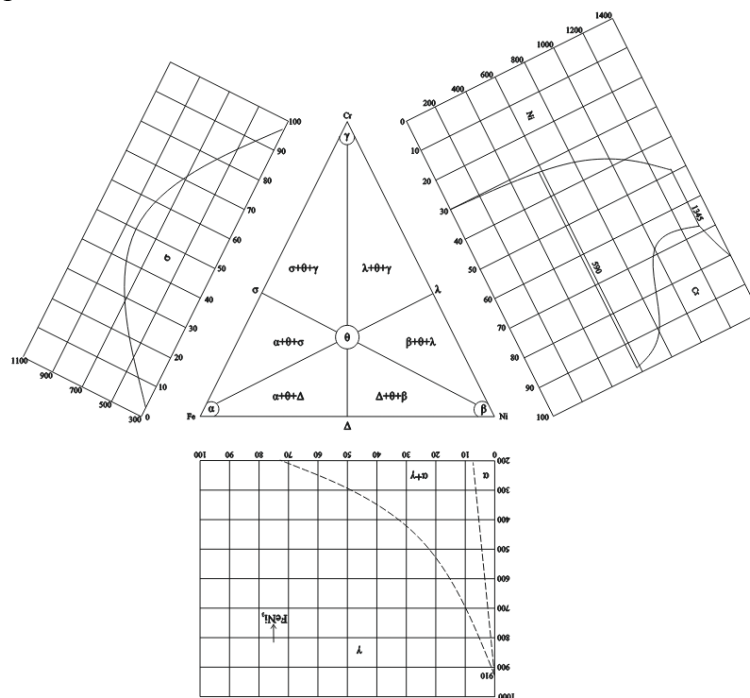


Рис. 1. Схема розподілу фазових областей у твердому стані Fe-Ni-Cr.

Section 1. Fundamental problems of physics, chemistry and ecology

Значна кількість досліджень була присвячена системі Fe-Cr через її технологічну важливість, часто пов'язану з появою інтерметалічної топологічно щільно упакованої σ -фази Франка-Каспера. Завдяки крихкості та широкому потенціалу розчинності для різних елементів утворення σ -фази, як відомо, має вирішальне значення для властивостей матеріалів [1, 2].

Відповідно до діаграми Ni-Cr, при складах, близьких до $\text{Ni}_{40}\text{Cr}_{60}$, утворюється евтектика в системі Ni-Cr. Це означає, що в сплавах такого складу проявляється схильність до поділу фаз. При складах, близьких до $\text{Ni}_{68}\text{Cr}_{32}$, проявляється тенденція до впорядкування. Цей висновок випливає з того факту, що хімічна сполука Ni_2Cr з орторомбічною ґраткою утворюється при 590 °C і нижче. Досліджували сплав $\text{Ni}_{40}\text{Cr}_{60}$, в якому, згідно фазової діаграми Ni-Cr, спостерігається тенденція до розшарування фаз та сплав $\text{Ni}_{68}\text{Cr}_{32}$, в якому при температурах нижче 590 °C спостерігається тенденція до впорядкування [12].

Приведений вище аналіз результатів експериментальних досліджень вихідних компонентів для створення антидифузійних бар'єрів та діаграм стану бінарних систем на їх основі дозволили зробити співставлення отриманих результатів з потрійними системами TEM (Bi-Sb-Te) p-типу та (Bi-Se-Te) n-типу провідності і прийти до висновку, що цілий ряд технологічних проблем в них вирішується на різних температурних інтервалах і не пов'язані між собою. В той же час приведені ізотермічні перерізи не дають можливість відділити межі рівноваги фаз для діаграм евтектичного та перитектичного типу, оптимізувати технологічні режими отримання нових матеріалів для створення антидифузійних бар'єрів на TEM у високотемпературних інтервалах роботи.

У зв'язку з цим, були проведені теоретичні розрахунки параметрів хімічного зв'язку в системі Fe-Ni-Cr в залежності від міжатомних відстаней. Це дало можливість виявити донорний ефект на окремих хімічних зв'язках, як у вихідних елементів (Fe, Ni, Cr), так і в хімічних зв'язках Fe-Ni, Fe-Cr, Ni-Cr), встановити чисельні значення ефективних зарядів Δq_i , ефективних радіусів R_{U_i} міжатомної взаємодії та енергії дисоціації $D(\varphi_i)$. Результати розрахунків для сполук Fe-Ni приведені в таблиці 1. Аналогічні розрахунки були проведені для Fe-Cr, Ni-Cr.

Таблиця 1

Ефективні заряди (Δq_i), ефективні радіуси (R_{U_i}) і енергії дисоціації $D(\varphi_i)$ в залежності від міжатомних відстаней d_i Fe-Ni.

φ_i Параметри	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8	φ_9	φ_{10}	φ_{11}
$d_i(\text{\AA})$	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3,0	3,1	3,2	3,3	3,4	3,5
$R_{UFe}(\text{\AA})$	1,24	1,28	1,34	1,39	1,44	1,49	1,54	1,59	1,64	1,69	1,74
$R_{UNi}(\text{\AA})$	1,26	1,32	1,36	1,41	1,46	1,51	1,56	1,61	1,66	1,71	1,76
$\Delta q_i(\varphi_i)$	0,0595	-0,1134	-0,2824	-0,4453	-0,6024	-0,7542	-0,901	-1,043	-1,181	-1,349	-1,445
$D(\varphi_i)(\text{eV})$	1,9354	1,8904	1,7887	1,728	1,6683	1,6128	1,5775	1,512	1,466	1,423	1,3826

Результати розрахунків підтверджують експериментально встановлений факт, що вихідні елементи Fe, Ni, Cr можуть мати різні ступені окиснення, а в сполуках ступінь окиснення може приймати значення від -3 до +6. Отримані розрахунки параметрів хімічного зв'язку дозволили підтвердити тонку структуру хімічного зв'язку, визначити

гістерезисні закономірності як окремих елементів (наприклад в залізі), так і в інтерметалідах проміжних сполук вихідних елементів.

Отримані результати можуть бути використані для створення антидифузійних бар'єрних шарів для пригнічення взаємодифузії в сполуках з традиційними контактними з'єднаннями на основі Cu, Pb, Sn.

Список літератури

1. Anatyshuk L. I. Thermoelectric power converters. Institute of Thermoelectricity, Kyiv: Naukova Dumka, 2003.
2. Ащеулов А. А., Маник О. М., Маник Т. О., Білинський-Слотило В. Р. Особливості структури хімічного зв'язку заліза. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2011. Т. 12, № 4. С. 960-965.
3. The periodic table of the elements. URL: <https://www.webelements.com/> (Last accessed: 10.05.2025).
4. Massalski T.B., Okamoto H., Subramanian P.R., Kacprzak L. Fe-Ni (Iron-Nickel), Binary Alloy Phase Diagrams: 2nd ed., ASM International, Materials Park, OH, 1990. P. 1735-1738.
5. Jacob A., Povoden-Karadeniz E., Kozeschnik E. Revised thermodynamic description of the Fe-Cr system based on an improved sublattice model of the σ phase. *Calphad*. 2018. Vol. 60. P. 16-28.
6. Turchi P. E. A., Kaufman L., Liu Z.-K. Modeling of Ni-Cr-Mo based alloys: Part I-phase stability. *Calphad*. 2006. Vol. 30, Issue 1. P. 70-87.

РОЗРАХУНОК ОПТИЧНИХ СТАЛИХ ДВОШАРОВОЇ СТРУКТУРИ, ЯКА ВКЛЮЧАЄ В СЕБЕ ТОНКИЙ СЛАБОПОГЛИНАЛЬНИЙ ШАР

Кушнір О. П., Мягкота С. В.

Львівський національний університет ветеринарної медицини
та біотехнологій імені С.З. Гжицького,
кафедра інженерної механіки,
вул. В.Великого, 1, Дубляни, Львівська обл.
oleg.p.kushnir@gmail.com

На даний час відомо багато різних методів визначення оптичних сталих і товщин шарів одно і двошарових структур з використанням функцій огинаючих спектрів відбивання або пропускання [1-3]. Як відомо застосування функцій огинаючих спектрів для визначення оптичних параметрів тонкої одношарової структури неможливо через відсутність для такої структури інтерференційної картини. Використовуючи аналітичні вирази для огинаючих спектрів відбивання багатошарових структур [4], знайдених раніше, нами розроблено метод визначення оптичних сталих і товщин шарів двошарової структури, яка включає в себе тонкий слабопоглинальний нижній шар і значно товстіший прозорий (допоміжний) верхній шар. Використання такого товстого допоміжного шару забезпечує появу достатньої кількості екстремумів спектру і можливість застосування методу огинаючих екстремумів для розрахунку оптичних сталих. Раніше був запропонований спосіб визначення оптичних констант двошарової структури, показники заломлення шарів якої мають близькі між собою значення [5]. Перевагою нашого методу є можливість застосування його для структури з довільним співвідношенням між показниками заломлення обох шарів. Обмеженням є необхідність достатньої товщини верхнього шару, а також незначне поглинання цілої структури. Останні умови необхідні для отримання інтерференційного спектра з достатньою кількістю екстремумів.

Список літератури

1. Ghezzi M., J. Opt.Soc.Amer. **58**(3), 368 (1968)
2. Swanepoel R., J. Phys. E. **16**, 1214 (1983)
3. Kushnir O. P., Myagkota S.V. J. Phys. Stud. **28**, 3402 (2024)
4. Kushnir O. P., Ukr. J. Phys. Opt. **10**, 82 (2009)
5. [Filippov V. V.](#), Opt. Spektrosk. **101**, 485 (2006)