

УДК 546.196; 546.681

Т.О. Маник¹, О.М. Маник², В.Р. Білинський-Слотило²¹Буковинський державний фінансово-економічний університет,
вул. Штерна, 1, Чернівці, 58000²Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,
вул. Коцюбинського, 2, Чернівці, 58012

e-mail: manykto@rambler.ru, manykto@ukr.net, slotulo@mail.ru

ОСОБЛИВОСТІ ХІМІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ $FeSe_{1-x}Te_x$

Проведено дослідження особливостей хімічних зв'язків кристалів $FeSe_{1-x}Te_x$ ($0 \leq x \leq 1$) за допомогою динамічної молекулярної моделі в якій: визначено силові постійні хімічних зв'язків досліджуваних матеріалів методами мікроскопічної теорії та теорії пружності, шляхом розв'язання обернених задач з використанням експериментальних значень найменших міжатомних відстаней та пружних модулів; обчислені характеристичні частоти коливань атомів окремих хімічних зв'язків методами теорії коливань в гармонічному та ангармонічному наближеннях з використанням експериментальних значень енергії дисоціації; враховано вплив прецесійно-обертального руху нееквівалентних гібридних орбіталей навколо їх рівноважних положень шляхом використання моделі жорсткого ротатора.

Ключові слова: хімічний зв'язок, характеристичні частоти, надпровідність.

Вступ

Сучасне матеріалознавство має багато спільного з фізикою і опирається на її досягнення. Однак, різниця між ними в тому, що фізика вивчає явища в існуючих матеріалах, а матеріалознавство ставить перед собою завдання отримати ці матеріали. Тому в даній роботі розглядаються ті фізичні явища, які використовуються матеріалознавством для створення нових матеріалів з екстремальними експлуатаційними властивостями. Насамперед, до них відносяться явища, пов'язані з фазовими перетвореннями. Розкриття природи та механізмів цих перетворень з позицій хімічного зв'язку, дозволяє збагатити знання фізичних процесів, що відбуваються в складних конденсованих системах.

Розв'язання цієї задачі передбачає узагальнення стандартних підходів коливного плавлення, методів розрахунку силових та енергетичних параметрів хімічного зв'язку на випадок ангармонічних коливань атомів вздовж хімічного зв'язку та прецесійно-обертальних рухів самих нееквівалентних орбіталей навколо своїх рівноважних положень. Саме такий підхід дозволяє прослідкувати динаміку формування хімічного зв'язку від рідкого стану

до конденсованого з подальшим упорядкуванням кристалічної структури шляхом поліморфних перетворень.

Інтерес до твердих розчинів $FeSe_{1-x}Te_x$ ($0 \leq x \leq 1$) зумовлений перш за все їх надпровідними властивостями. Отримання надпровідних матеріалів уможливорює реалізацію цілої низки проектів, пов'язаних із їх застосуванням в енергетиці (системи генерування, збереження і передачі енергії на відстань), на транспорті (потяги на магнітній подушці), в електроніці та обчислювальній техніці (надпровідні квантові інтерферометри й елементи пам'яті), у фізиці елементарних частинок (надпровідні прискорювачі), у гірничодобувній промисловості (магнітні сепаратори), а також в медицині (надпровідні томографи). Зокрема $FeSe$ володіє найвищим значенням температури надпровідного переходу ($T_c = 37$ К) серед бінарних сполук [1], а $FeTe$ характеризується низькою надпровідністю. Характерною особливістю твердих розчинів потрійних сполук на основі Fe , Se , Te є те, що вміст телуру покращує надпровідні властивості.

З підвищенням ступеня структурної досконалості виявляються нові властивості, що розширюють масштаби та специфіку використання, як окремих надпровідних

матеріалів $FeSe$ і $FeTe$, так і складних сполук на їх основі. При цьому, для створення нових матеріалів із необхідними властивостями потрібна інформація про технологічні параметри з урахуванням природи хімічного зв'язку.

Тому, метою цієї роботи є проведення комплексних досліджень особливостей формування хімічного зв'язку селенідів та телуридів заліза, а також потрібних сполук на їх основі з врахуванням найменших міжатомних віддалей, експериментальних значень пружних модулів та ангармонічних поправок, для дослідження формування хімічного зв'язку в залежності від технологічних умов отримання досліджуваних матеріалів.

Кристалічна структура і модель хімічного зв'язку

Аналіз праць [2-7] показав, що при кімнатній температурі кристали $FeSe_{1-x}Te_x$ ($0 \leq x \leq 1$) характеризуються тетрагональною кристалічною структурою з параметрами ґратки та найменшими міжатомними віддальми, чисельні значення яких приведені в табл. 1.

Таблиця 1

Параметри кристалічної ґратки кристалів $FeSe_{1-x}Te_x$

| Матеріал | $a, \text{Å}$ | $c, \text{Å}$ | Найменші віддалі | |
|------------------------|---------------|---------------|------------------|-----------------|
| | | | $r_1, \text{Å}$ | $r_2, \text{Å}$ |
| $FeSe$ | 3.775 | 5.527 | 2.67 | 2.37 |
| $FeSe_{0.75}Te_{0.25}$ | 3.787 | 5.649 | 2.67 | 2.41 |
| $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ | 3.791 | 5.978 | 2.68 | 2.46 |
| $FeSe_{0.25}Te_{0.75}$ | 3.813 | 6.150 | 2.69 | 2.51 |
| $FeTe$ | 3.827 | 6.294 | 2.71 | 2.56 |

На основі представлених в табл. 1 даних побудовано відповідні молекулярні моделі. Кожна із структур в наближенні найближчих сусідів має п'ять нееквівалентних сімейств хімічних зв'язків. На рис. 1 зображено схему елементарної комірки $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ в якій атоми заліза займають місця у вузлах ґратки, а також верхній та нижній гранях, а на двох взаємно протилежних гранях розташовуються по два атоми селену та телуру. Елементар-

ні комірки інших досліджуваних сполук аналогічні з відповідним вмістом атомів селену та телуру відносно складу.

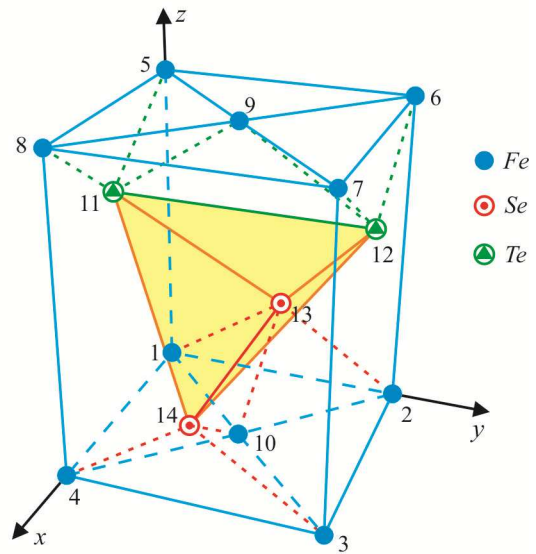


Рис. 1. Схема елементарної комірки $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$.

З допомогою порохованих координат атомів елементарних комірок проведено розрахунки просторових кутів між напрямками зв'язків досліджуваних матеріалів з яких випливає, що ми маємо п'ять нееквівалентних сімейств хімічних зв'язків з міжатомними відстанями, що в свою чергу проявляється як на їх фізичних властивостях, так і технологічних режимах.

Силкові характеристики хімічного зв'язку

Як відомо, методи теорії пружності [8] та мікроскопічної теорії кристалічних ґраток [9] знаходять широке застосування в матеріалознавстві. Для виявлення суті технологічних процесів в досліджуваних матеріалах потрібно виявити механізми та закономірності формування структури фізичних властивостей отриманої речовини. Все це вимагає поєднання методів теорії пружності та теорії ґратки з подальшим створенням на їх основі відповідних математичних моделей досліджуваних систем [10].

Для розрахунку силових постійних хімічного зв'язку використано підхід, в якому встановлювався взаємозв'язок між теорією пружності та теорією ґратки. При такому підході стан кристалу описується

векторним полем зміщень $S(R, t)$, яке задає зміщення в момент часу t деякої точки, що має в рівновазі координату R . Цей опис застосовується тоді, коли зміщення сусідніх атомів майже рівні і представляються неперервним полем зміщень, що повільно змінюються. Деформація континууму описується в кожній точці симетричним тензором деформації:

$$\epsilon_{mn} = \frac{1}{2}(S_{m/n} + S_{n/m}), \quad (1)$$

де $S_{m/n}$ характеризує зміну вектора зміщення в компонентах x_n .

Співвідношення між напруженнями та деформаціями в наближенні закону Гука виражається тензором четвертого рангу:

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,n} C_{ik,mn} \epsilon_{mn}. \quad (2)$$

Виразивши напруження через деформації, за умови рівності сили інерції та сил заданих напруженнями, отримуємо рівняння руху в теорії пружності:

$$\rho \ddot{S}_i = \sum_{m,n,k} C_{ik,mn} S_{m/nk}. \quad (3)$$

Для розв'язання поставленої задачі співставлено рівняння руху в теорії пружності з рівнянням руху в теорії ґратки, що записане у вигляді:

$$M \ddot{S}_i^m = - \sum_{n,k} \Phi_{ik}^{mn} S_k^n, \quad (4)$$

де $\Phi_{ik}^{mn} = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^m \partial x_k^n} \right|_{R=R_0}$ – коефіцієнти розкладу потенціальної енергії Φ в ряд по зміщеннях S (коефіцієнти розкладу Φ_{ik}^{mn} – це сила, що діє на атом m в напрямку i , коли атом n зміщений на віддаль S в напрямку k , в той час як всі інші атоми перебувають у стані рівноваги $R=R_0$).

Вводячи густину $\rho = M/V_z$, де M – усереднена маса, а V_z – об'єм елементарної комірки, маємо рівняння руху теорії

ґратки:

$$\rho \ddot{S}_i = \sum_{k,m,n} \tilde{C}_{ik,mn} S_{k/mn}, \quad (5)$$

а співставлення цих рівнянь руху (3) та (5) дає можливість отримати формулу знаходження силових постійних:

$$\tilde{C}_{ik,mn} = - \frac{1}{2V_z} \sum_h \Phi_{ik}^h (\hat{A}h)_m (\hat{A}h)_n. \quad (6)$$

При описі пружних властивостей виходили з наближення пружинного зв'язку між найближчими сусідами. Це означає, що коливання вздовж міжатомних хімічних зв'язків відбуваються незалежно і характеризуються своїм коефіцієнтом пружності $f^{(\ell)}$, де $1 \leq \ell \leq 5$. Тоді співвідношення (6) прийме вигляд:

$$\tilde{C}_{ik,mn} = - \frac{1}{2V_z} \sum_{h,\ell,h_k} {}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)} (Ah_k)_m^{(\ell)} (Ah_k)_n^{(\ell)}, \quad (7)$$

де ℓ – характеризує належність до певного типу нееквівалентних орбіталей, а h_k – перехід атомних зв'язків у рамках одного сімейства під дією елементів симетрії.

Величини $\Phi_{ik}^{(h)}$ виражаються через коефіцієнти пружності окремих хімічних зв'язків $f^{(\ell)}$ таким чином:

$$\| {}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)} \| = f^{(\ell)} \| {}^{(\ell)}\alpha_{ik}^{(h)} \|, \quad (8)$$

де ${}^{(\ell)}\alpha_{ik}^{(h)} = \cos \varphi_{li}^h \cos \varphi_{lk}^h$ – це добутки направляючих косинусів ℓ -компонент хімічного зв'язку (нееквівалентних гібридних орбіталей) з осями координат x_i та x_k ($1 \leq i, k \leq 3$) атомів елементарної комірки.

За допомогою порахованих координат атомів елементарних комірок, направляючих косинусів та компонент між атомних віддалей встановлено взаємозв'язок між пружними модулями C_{ij} та пружними постійними $f^{(\ell)}$. Підставивши в отримані рівняння уточнені значення пружних модулів C_{ij} знайдено коефіцієнти пружності $f^{(\ell)}$, що відповідають нееквівалентним гібридним орбіталям, чисельні значення яких наведені в табл 2.

Коефіцієнти пружності кристалів $FeSe_{1-x}Te_x$

| Матеріал | $f^{(1)}$, Н/м | $f^{(2)}$, Н/м | $f^{(3)}$, Н/м | $f^{(4)}$, Н/м | $f^{(5)}$, Н/м |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| <i>FeSe</i> | -51.3 | -548.8 | -168 | -57.1 | 43.3 |
| <i>FeSe_{0.75}Te_{0.25}</i> | 158 | 250.5 | -356.2 | -308.6 | -92.9 |
| <i>FeSe_{0.5}Te_{0.5}</i> | 32.9 | 114.4 | -374.1 | -83 | -234.5 |
| <i>FeSe_{0.25}Te_{0.75}</i> | 113.4 | 136.6 | -317 | -89.7 | -283.8 |
| <i>FeTe</i> | -44.7 | -372.4 | -92.6 | -202 | 38.2 |

Їх аналіз показує, що на відміну від ідеальної структури, де сили постійні для всіх ℓ – однакові, в нашому випадку маємо «набір» чисельних значень $f^{(\ell)}$, що вказує на наявність тонкої структури плавлення і кристалізації цих речовин.

Розрахунок поправок до моделі

Розглянуто також модель ротатора (рис. 2), в якій при низьких температурах мають місце крутильні коливання, а з підвищенням температури амплітуда коливань зростає і стають можливими обертання, зумовлені прецесією розглядуваної нееквівалентної орбіталі навколо її рівноважного положення.

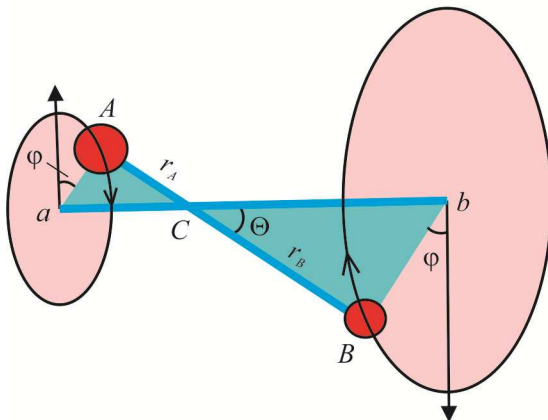


Рис. 2. Модель жорсткого ротатора.

Вказані ускладнення математичних моделей у даній роботі були враховані введенням ангармонійних поправок.

Врахування збільшення моменту інерції коливного ротатора в порівнянні з неколивним (δ -доданок), а також видовження нееквівалентних орбіталей (γ -доданок) проводиться шляхом додавання до логарифму статистичної суми вказаних доданків, а саме

$$\ln Z_\delta = \frac{\delta}{e^u - 1}, \text{ та } \ln Z_\gamma = \frac{8\gamma}{u}, \quad (9)$$

де $u = \frac{h\nu}{kT}$, h – постійна Планка, k – постійна Больцмана, ν – частота коливань, T – температура, $\delta = 6 \frac{B_c}{w_c} \left[\left(\frac{w_c \chi_c}{B_c} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]$,

B_c – коливна постійна, що виражається через момент інерції обчислений для випадку атомів, розміщених на рівноважних відстанях r_c , w_c – хвильове число коливань атомів вздовж хімічного зв'язку, χ_c – ангармонічна постійна, $\gamma = B_c / w_c$. При цьому, чисельні значення поправок до моделі жорсткого ротатора приведені в табл. 3.

Використовуючи отримані вирази, що містять ангармонічні поправки та розраховані поправки коливного ротатора χ_c , δ і γ отримано відповідні вирази для теплоємності, що дали можливість, шляхом розв'язання оберненої задачі, врахувати вплив вказаних ефектів на процес формування хімічних зв'язків досліджуваних матеріалів.

Поправки до моделі жорсткого ротатора кристалів $FeSe_{1-x}Te_x$

| Поправка | | $FeSe$ | $FeSe_{0.75}Te_{0.25}$ | $FeSe_{0.5}Te_{0.5}$ | $FeSe_{0.25}Te_{0.75}$ | $FeTe$ |
|--------------------------|-------------|--------|------------------------|----------------------|------------------------|--------|
| χ_{ci} | χ_{c1} | 0.057 | 0.082 | 0.063 | 0.072 | 0.051 |
| | χ_{c2} | 0.055 | 0.075 | 0.061 | 0.057 | 0.048 |
| | χ_{c3} | 0.029 | 0.103 | 0.090 | 0.090 | 0.042 |
| | χ_{c4} | 0.031 | 0.029 | 0.092 | 0.098 | 0.024 |
| | χ_{c5} | 0.029 | 0.073 | 0.021 | 0.021 | 0.021 |
| δ_i | δ_1 | 0.011 | 0.013 | 0.012 | 0.011 | 0.010 |
| | δ_2 | 0.007 | 0.012 | 0.011 | 0.012 | 0.009 |
| | δ_3 | 0.007 | 0.016 | 0.016 | 0.016 | 0.007 |
| | δ_4 | 0.007 | 0.006 | 0.012 | 0.012 | 0.006 |
| | δ_5 | 0.006 | 0.012 | 0.005 | 0.005 | 0.005 |
| $\gamma_i \cdot 10^{-4}$ | γ_1 | 0.680 | 0.560 | 0.678 | 0.532 | 0.619 |
| | γ_2 | 0.290 | 0.529 | 0.625 | 0.725 | 0.582 |
| | γ_3 | 0.523 | 0.751 | 0.856 | 0.849 | 0.338 |
| | γ_4 | 0.489 | 0.296 | 0.425 | 0.390 | 0.536 |
| | γ_5 | 0.380 | 0.528 | 0.389 | 0.390 | 0.463 |

Енергетичні параметри хімічного зв'язку

Задача знаходження характеристичних частот розв'язана методами теорії коливань в гармонічному та ангармонічному наближеннях. Це зумовило необхідність розгляду в матеріалознавстві ряду питань пов'язаних з фазовими переходами та поліморфними перетвореннями, які в свою чергу зумовлені руйнуванням старих і утворенням нових хімічних зв'язків; різними формами руху самих хімічних зв'язків у рідкому та конденсованому станах від гармонічних коливань вздовж хімічних зв'язків в конденсованих системах до коливально-прецесійно-обертальних видів руху при поліморфних перетвореннях та фазових переходах.

Кінетична та потенціальна енергії системи точок, що здійснюють гармонічні коливання біля положень рівноваги мають вид:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j, \quad V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij} x_i x_j, \quad (10)$$

де T_{ij} – постійні, що залежать від мас частинок та геометрії рівноважної конфі-

гурації, а K_{ij} – постійні потенціальної енергії, що характеризують силову структуру коливної системи.

Підставляючи вирази кінетичної та потенціальної енергій в рівняння Лагранжа та застосовуючи розв'язок коливного типу отримуємо рівняння повної енергії системи матеріальних точок

$$\sum_{j=1}^n (K_{ij} - T_{ij} \omega^2) x_j = 0. \quad (11)$$

Умовою розв'язку цієї системи рівнянь є рівність нулю визначника:

$$|K_{ij} - T_{ij} \omega^2| = 0, \quad (12)$$

що є шуканим рівнянням n -го степеня відносно ω^2 – вікове (секулярне) рівняння. Форма вікового рівняння незручна тим, що всі елементи визначника містять невідоме ω^2 . Однак його можна привести до більш зручного виду, коли ω^2 буде входити лише в діагональні елементи визначника. Тому вводяться коефіцієнти $A_{\ell i}$ та $D_{\ell j}$, що відповідають умовам:

$$\sum_i A_{\ell i} T_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } \ell = j, \\ 0 & \text{при } \ell \neq j, \end{cases} \quad D_{\ell j} = \sum_i A_{\ell i} K_{ij}, \quad (13)$$

отримуємо перетворене вікове рівняння, умовою розв'язку якого є:

$$|D_{\ell j} - \delta_{ij} \omega^2| = 0. \quad (14)$$

Таким чином, розрахунок характеристичних частот зводиться до знаходження коефіцієнтів взаємодії динамічної матриці $D_{\ell j}$. Для цього розраховані кінематичні $A_{\ell i}$ і динамічні K_{ij} коефіцієнти при різних значеннях індексів i, ℓ, j , розрахунок яких проводився за допомогою силових характеристик моделі хімічного зв'язку (коефіцієнтів пружності $f^{(\ell)}$).

Підставляючи $A_{\ell i}$ та K_{ij} знайдено елементи динамічної матриці, а саме характеристичні частоти в кристалах $FeSe_{1-x}Te_x$ (табл. 4).

Використовуючи рівняння Ліндемана [11], яке зв'язує характеристичну частоту коливань кристала ν з температурою коливного плавлення $T_{\text{кол}}$, молярним об'ємом V_n , атомною масою M та постійною c

$$T_s = cMV^{\frac{2}{3}}\nu^2, \quad (15)$$

знайдено характеристичні температури нееквівалентних хімічних зв'язків досліджуваних матеріалів (табл. 4).

Таблиця 4

Чисельні значення характеристичних частот та температур кристалів $FeSe_{1-x}Te_x$

| Матеріал | $\omega_i, 10^{13}$ Гц | | | | | T_i, K | | | | |
|---|------------------------|------------|------------|------------|------------|-----------------|-------|-------|-------|-------|
| | ω_1 | ω_2 | ω_3 | ω_4 | ω_5 | T_1 | T_2 | T_3 | T_4 | T_5 |
| <i>FeSe</i> | 16.14 | 15.79 | 8.34 | 8.86 | 8.16 | 1348 | 1292 | 360 | 407 | 345 |
| <i>FeSe_{0.75}Te_{0.25}</i> | 19.66 | 16.63 | 13.44 | 9.84 | 9.56 | 1309 | 937 | 612 | 328 | 309 |
| <i>FeSe_{0.5}Te_{0.5}</i> | 15.19 | 13.44 | 11.77 | 12.04 | 7.06 | 1267 | 1049 | 756 | 894 | 274 |
| <i>FeSe_{0.25}Te_{0.75}</i> | 15.79 | 13.82 | 11.73 | 12.76 | 6.96 | 1227 | 940 | 677 | 801 | 238 |
| <i>FeTe</i> | 12.84 | 12.15 | 10.52 | 6.18 | 5.31 | 1187 | 1062 | 796 | 275 | 203 |

Отримані результати вказують на те, що причина анізотропних властивостей досліджуваних матеріалів криється у природі кристалу, а саме в анізотропії характеристичних частот окремих зв'язків, а поліморфні перетворення в кристалах твердих розчинів $FeSe_{1-x}Te_x$ відбуваються при вказаних вище значеннях температури, внаслідок чого виникають зміни хімічного зв'язку, кристалічної структури, а відповідно і фізичних властивостей досліджуваних матеріалів.

Висновки

Проведено розрахунки силових постійних, коефіцієнтів кінематичної взаємодії $A_{\ell i}$, постійних K_{ij} та характеристичних температур формування хімічних зв'язків. Викладений підхід дає можливість розв'язати ряд технологіч

них задач, пов'язаних з процесами плавлення та кристалізації досліджуваних матеріалів з позицій хімічного зв'язку.

Показано, що вибір температур відпалу дає можливість в широких межах керувати формуванням певних складових хімічного зв'язку для отримання монокристалів $FeSe_{1-x}Te_x$ з необхідними властивостями [12]. Так, якщо матеріал призначений для деталей напівпровідникової електроніки, то слід проводити відпал при температурах утворення другої та третьої складових хімічного зв'язку, а для підвищення механічної міцності – при температурах утворення четвертої та п'ятої складових. Отримані результати значно розширюють технологічні можливості мікро- і нанотехнологій при створенні різних напівпровідникових, надпровідних і магнітних матеріалів електронної техніки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Margadonna S., Takabayashi Y., Ohishi Y., at all. Pressure evolution of the low-temperature crystal structure and bonding of the superconductor FeSe ($T_c=37$ K) // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol.80. – 064506.
2. Горелик С.С., Дашевский М.Я. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. – М.: Мисис, 2003. – 480 с.
3. Phelan D., Millican J.N., Thomas E.L., at all. Neutron scattering measurements of the phonon density of states of FeSe_{1-x} superconductors // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol.79. – 014519.
4. Hsu Fong-Chi, Luo Jiu-Yong, Yeh Kuo-Wei, at all. Superconductivity in the PbO-type structure alpha-FeSe // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.* – 2008. – Vol.105, No.38. – P. 14262–14264.
5. Yeh K.W., Hsu H.C., Huang T.W., at all. Superconducting FeSe_{1-x}Te_x single crystals grown by optical zone-melting technique // *Crystal Growth & Design.* 2009. – Vol.9, No.11. – P. 4847–4851.
6. Subedi A., Zhang L., Singh D.J., Du M.-H. Density functional study of FeS, FeSe, and FeTe: Electronic structure, magnetism, phonons, and superconductivity // *Phys. Rev. B.* – 2008. – Vol.78. – 134514.
7. Mizuguchi Y., Tomioka F., Tsuda S., at all. Substitution effects on FeSe superconductor // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2009. – Vol.78. – 074712.
8. Федоров Ф.И. Теория упругих волн в кристаллах. – М.: Наука, 1965. – 386 с.
9. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. – М.-Л.: Гос.издат. физ.-мат. лит., 1963. – 312 с.
10. Маник О.М. Багатофакторний підхід в теоретичному матеріалознавстві. – Чернівці: Прут, 1999. – 432 с.
11. Уббеллоде А.Р. Расплавленное состояние вещества. – М.: Металлургия, 1982. – 376 с.
12. Пат. 67792 Україна, МПК С30В 9/00, С30В 29/26, Н01L 29/00, С30В 31/20. Процес отримання монокристалічних злитків FeSe, FeTe та твердих розчинів FeSe_xTe_{1-x} / Ащеулов А.А., Маник О.М., Маник Т.О., Білинський-Слотило В.Р., Савчук А.Й. – Опубл. 12.03.12. Бюл.№5.

Стаття надійшла до редакції 03.03.2014

T.O. Manyk¹, O.M. Manyk², V.R. Bilynskij-Slotylo²

¹Bukovyna State University of Finance and Economics, Shterna Str., 1, Chernivtsi, 58000

²Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Kotsyubynskogo Str., 2, Chernivtsi, 58012

PECULIARITIES OF FeSe_{1-x}Te_x CHEMICAL BONDS

The investigation of peculiarities of FeSe_{1-x}Te_x ($0 \leq x \leq 1$) chemical bonds was conducted using the dynamic molecular model in which: the force constants of chemical bonds of studied materials were defined by the methods of microscopic theory and the theory of elasticity by inverse problem solving using the experimental values of smallest interatomic distances and elastic modules; characteristic frequencies of atomic vibrations of individual chemical bonds were calculated by the theory of vibrations in the harmonic and inharmonic approximation using the experimental values of the dissociation energy; the influence of precession and rotational motion of non-equivalent hybrid orbitals around their equilibrium positions was found by the rigid rotor model using.

Key words: chemical bond, characteristic frequencies, superconductivity.

Т.О. Маник¹, О.Н. Маник², В.Р. Билинский-Слотыло²

¹Буковинский государственный финансово-экономический университет,
ул. Штерна, 1, Черновцы, 58000

²Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича,
ул. Коцюбинского, 2, Черновцы, 58012

ОСОБЕННОСТИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$

Проведено исследование особенностей химических связей кристаллов $\text{FeSe}_{1-x}\text{Te}_x$ ($0 \leq x \leq 1$) с помощью динамической молекулярной модели, в которой: определены силовые постоянные химических связей исследуемых материалов методами микроскопической теории и теории упругости путем решения обратных задач с использованием экспериментальных значений наименьших межатомных расстояний и упругих модулей; вычислены характеристические частоты колебаний атомов отдельных химических связей методами теории колебаний в гармоническом и ангармоническом приближениях с использованием экспериментальных значений энергии диссоциации; учтено влияние прецессионного-вращательного движения неэквивалентных гибридных орбиталей вокруг их равновесных положений путем использования модели жесткого ротатора.

Ключевые слова: химическая связь, характеристические частоты, сверхпроводимость.