ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 4, № 4 (2003) С. 648-652

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 4, № 4 (2003) P. 648-652

УДК: 539.216.2, 539.213, 537.32

ISSN 1729-4428

В.І. Присяжнюк, О.Г. Миколайчук

# Структурні особливості, кінетика кристалізації та фізичні властивості плівок сполуки $GdFe_2$

*Львівський національний університет ім. І. Франка,*
*фізичний факультет, кафедра фізики металів,*
*вул. Кирила і Мефодія 8а, Львів, 79005, тел. 96-43-06, E-mail: prysyazhnyuk@wups.lviv.ua*

Одержано аморфні та кристалічні плівки сполуки $GdFe_2$. Проведено дослідження впливу технологічних умов одержання на структуру плівок і кінетики кристалізації аморфних плівок. Отримано температурні залежності електропровідності та термоелектрорушійної сили аморфних плівок $GdFe_2$.

**Ключові слова:** плівка, термічне напилення, аморфний, кінетика кристалізації, структура, електропровідність, термоелектрорушійна сила.

*Стаття поступила до редакції 19.05.2003; прийнята до друку 23.10.2003.*

В системі Gd-Fe існує 4 сполуки [1,4], для проведення структурних та електрофізичних досліджень було вибрано сполуку $GdFe_2$. Плівки даної сполуки одержували на ситалові та NaCl-підкладки за допомогою термічного випаровування у вакуумі. Структура, термічна стійкість та кінетика фазових перетворень плівок сполуки $GdFe_2$, вивчались на електронографі ЭГ-100 та електронному мікроскопі УЭМВ-100К. Товщина плівок становила 500 і 1000 А для структурних і електрофізичних досліджень відповідно.

В масивному стані сполука $GdFe_2$ має кубічну гранецентровану структуру типу $MgCu_2$ (рис. 1). Просторова група – Fd3m, параметр ґратки – 7,394 А, кількість атомів гадолінію в елементарній комірці – 8, заліза – 16. За допомогою комп'ютерної програми PowderCell побудовано рентгенівську штрих-діаграму цієї сполуки (рис. 2). Для побудови використано геометрію Брегг-Брентано і випромінювання мідної трубки.

Спочатку досліджувались плівки сформовані на підкладках, що знаходились в процесі осадження при кімнатній температурі. Як показали електронографічні дослідження, при таких умовах осадження формуються аморфні плівки. Максимуми на кривій електронного розсіяння знаходяться при $S = 2{,}28$ і $3{,}12$ $A^{-1}$.

Термічна стійкість та кінетика кристалізації аморфних плівок сполуки $GdFe_2$ вивчалась безпосереднім нагрівом їх зі швидкістю 10 К/хв в колоні мікроскопа з використанням приставки ПРОН-2. При дослідженнях фіксувались температура появи найбільш інтенсивних дифракційних ліній на фоні дифузних гало, яка відповідає початку зародження кристалічної фази (рис. 3). Встановлено, що кристалізація $GdFe_2$ плівок починається при температурі 720 К. При цій температурі на електронограмах на фоні розмитих дифузних гало з'являється дифракційна лінія при $S = 2{,}89$ $A^{-1}$, що відповідає міжплощинній віддалі $d = 2{,}17$ А. При температурі 770 К на електронограмах з'являються додаткові дифракційні лінії при $S = 3{,}37$ $A^{-1}$ і $S = 4{,}33$ $A^{-1}$ з міжплощинними віддалями $d = 1{,}86$ А і $d = 1{,}45$ А, відповідно. Всі ці дифракційні лінії відповідають віддалям між площинами (311), (400), (511) кубічної гранецентрованої ґратки $GdFe_2$.

Плівки $GdFe_2$, одержані при $T_п = 500$ К, були аморфно-кристалічні. На електронограмах поряд з широкими дифузними гало від аморфної фази наявні рефлекси полікристалічної фази. В результаті проведеного аналізу, встановлено, що близько

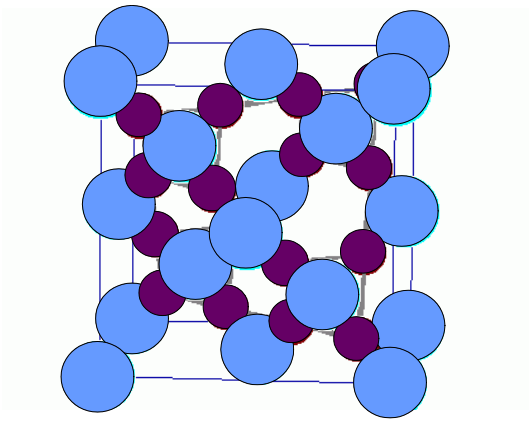

**Рис. 1.** Структура сполуки $GdFe_2$
(великі кульки – Gd, малі кульки – Fe).

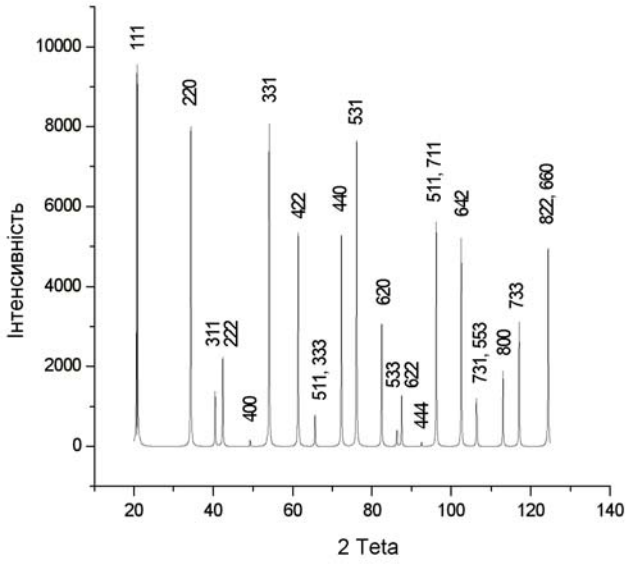


**Рис. 2.** Х-променева штрих-діаграма сполуки $GdFe_2$.

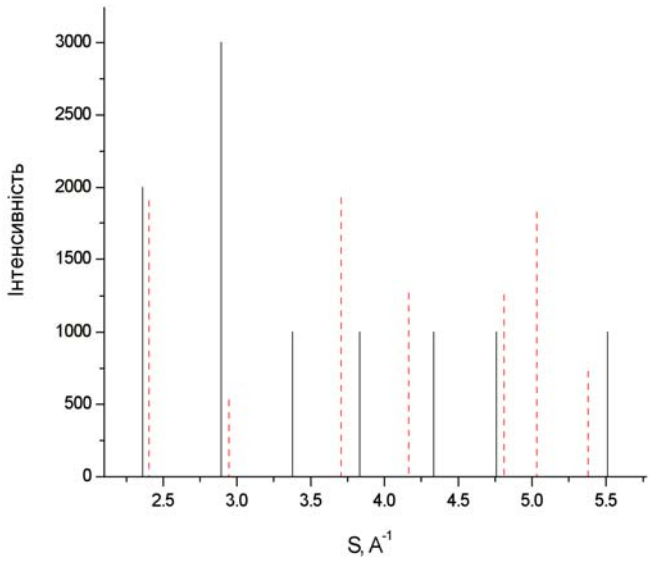


**Рис. 4.** Розшифрування структури плівок $GdFe_2$ (суцільні лінії – дифракційні максимуми на електронограмах плівок, пунктирні лінії – ГЦК структура масивного $GdFe_2$ дані PowderCell).

половини об'єму плівки становить аморфна фаза, а решту – полікристалічна, структура якої відповідає характерній для масивного стану $GdFe_2$ кубічній структурі з гранецентрованою ґраткою (рис. 4).

Електропровідність аморфних плівок визначається, в основному, трьома видами розсіяння носіїв струму: електрон-фононне розсіяння, вплив розмірних ефектів (товщини плівок стають співмірними з довжиною вільного пробігу електронів) і розсіянням носіїв на границях зерен [3]. Впливом розмірних ефектів можна знехтувати, оскільки товщини наших плівок були 1000 А і більше. Також, температурні залежності питомого електроопору плівок сполук перехідних металів з РЗМ мають свої особливості, зумовлені наявністю d-зони перехідного металу, яка утворюється електронами незаповненої d-оболонки, s-p-гібридизацією, а також незаповненою f-оболонкою РЗМ [5].

Температурні залежності електропровідності аморфних плівок $GdFe_2$ мають напівпровідниковий характер (рис. 5), енергія термічної активації та температурний коефіцієнт опору відповідно дорівнюють $1{,}22\ 10^{-2}$ еВ і $-1{,}83\ 10^{-3}\ K^{-1}$. Значення термоелектрорушійної сили до і після відпалу становили -0,97 і -1,90 мкВ/К. На рис. 6 приведено температурні залежності термоелектрорушійної сили для плівок $GdFe_2$. Встановлено, що довготривала витримка при кімнатній температурі в атмосфері повітря (протягом 1 року) не призводить до суттєвих

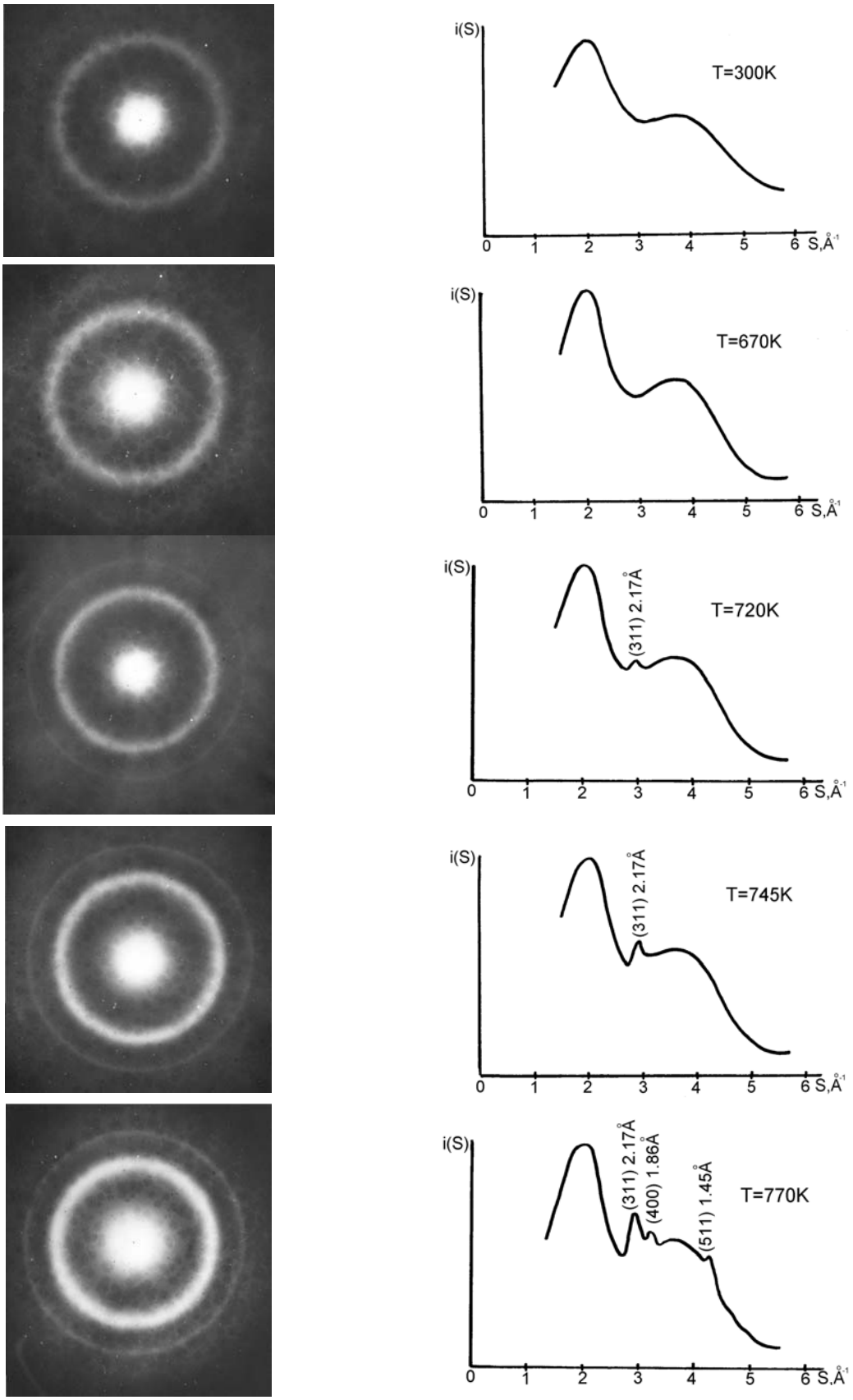


**Рис. 3.** Кінетика кристалізації плівок $GdFe_2$.

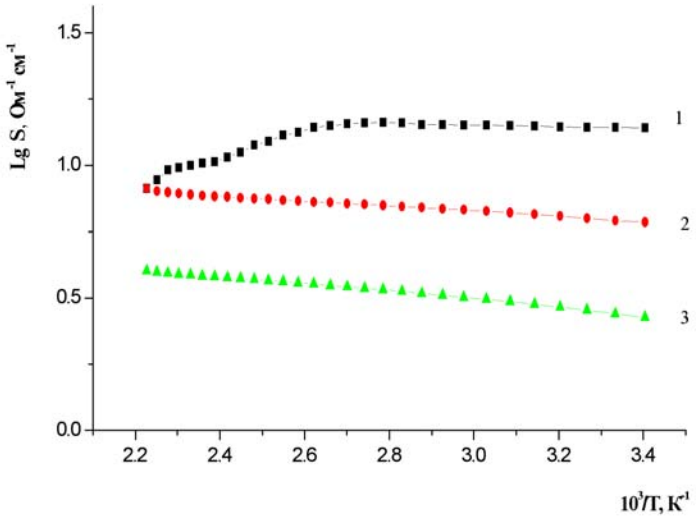


**Рис. 5.** Температурні залежності питомої електропровідності плівок сполуки $GdFe_2$ (1 – нагрівання зразка, 2 – охолодження зразка,3 – зразок після відпалу)

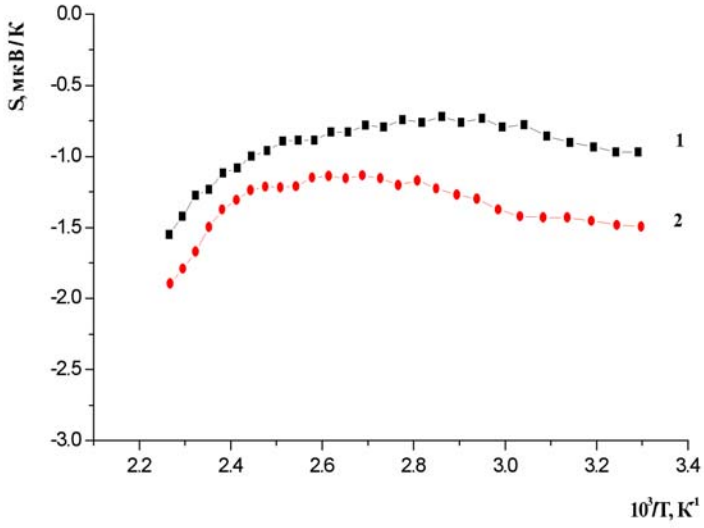


**Рис. 6.** Температурні залежності термоелектрорушійної сили для плівок $GdFe_2$ (1 – до відпалювання, 2 – після відпалювання).

змін у значеннях і характері температурних залежностей електропровідності та термоелектрорушійної сили.

[1] Ф.Е. Люборского под ред. *Аморфные металлические сплавы*. Металлургия, М., 584 с. (1987).
[2] В.А. Лагунов, А.Б. Синани. Компьютерное моделирование формирования кристаллической структуры при переходе из аморфного состояния // *Физика твердого тела,* **4**(42) сс. 1087-1091 (2000).
[3] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах.* Мир, М., (1-2), 662 с. (1982).
[4] *Физика и химия редкоземельных элементов.* Справочник под ред. К. Гшнайдера, Л. Айринга. Металлургия, М., 336 с. (1982).
[5] А.П. Шпак, Ю.А. Куницкий, В.Л. Карбовский. *Кластерные и наноструктурные материалы.* Академпериодика, К., 587 с. (2001).

V.I. Prysyazhnyuk, O.G. Mykolaychuk

# Structural Features, Kinetics of Crystallization and Physical Properties of $GdFe_2$-films

*'Ivan Franko' L'viv National University,*
*Physical Department, Chair of Physics of metals,*
*8a, Kyryla & Mephodiya Str., L'viv, 79005, tel. 96-43-06, e-mail: prysyazhnyuk@wups.lviv.ua*

Amorphous and crystalline films of $GdFe_2$-compounds were obtained. Influence of the technology of receiving on a films structure and the kinetics of crystallization for amorphous films is investigated. The temperature dependences of conductivity and thermoelectric power for $GdFe_2$-amorphous films are obtained.