

ГРЫЦИВ В. И., ПАНЧУК О. Э., БЕЛОЦКИЙ Д. П.

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЯ СИСТЕМЫ CdTe — Au

Золото используется как легирующая примесь в CdTe и для создания омических контактов на *p*-CdTe [1], токоотводов для преобразования солнечной энергии в электрическую [2]. Однако в литературе имеются лишь отрывочные сведения о природе химического взаимодействия в системе CdTe—Au [1, 3], не исследована диаграмма состояния.

Целью настоящей работы является изучение методами физико-химического анализа (ДТА, РФА, металлографическим) и термодинамическими расчетами характера взаимодействия между Au и CdTe.

CdTe синтезировали из Cd и Te марки ОСЧ-4-11, взятых в стехиометрическом соотношении. Образцы системы готовили сплавлением навесок CdTe и Au общей массой 1–3 г при температуре на ~70–100° С выше ликвидуса, выдерживали 20 ч и охлаждали в режиме выключенной печи. Для установления режимов синтеза предварительно выборочно снимали кривые охлаждения. Гомогенизирующий отжиг проводили при 800° С в течение 600 ч. Однако он практически не влияет на температуру фазовых превращений и микроструктуру, что указывает на равновесную кристаллизацию при выбранных условиях охлаждения. Исследование литых сплавов проводили по методике [4].

Оценка возможности протекания обменной реакции при сплавлении компонентов проведена на основании рассчитанных значений изобарно-изотермического потенциала  $\Delta G$ . Необходимые для расчетов термодинамические константы взяты из [5, 6], теплоемкость AuTe<sub>2</sub> оценена по методике [5]. Величина  $\Delta G$ , рассчитанная с учетом температурной зависимости энтальпии и энтропии реакции  $2\text{CdTe} + \text{Au} = \text{AuTe}_2 + 2\text{Cd}$ , уменьшается от 184 при 300 до 122 кдж при 1500° К. При вычислении  $\Delta G$  не учитывали энтальпию паробразования Cd.

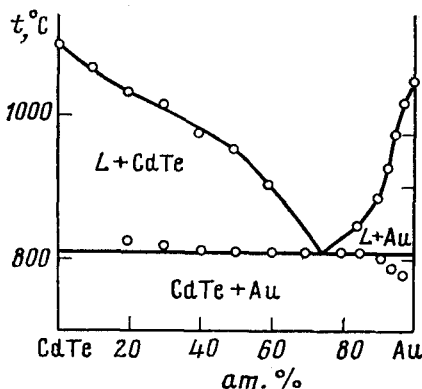
Сплавы синтезировали в ограниченном пространстве, причем объем паровой фазы не превышал трехкратного объема жидкой. Испарение было полностью подавлено и не влияло на энтальпию процесса. Положительное значение  $\Delta G$  в исследуемой области температур свидетельствует о сдвиге равновесия реакции в сторону образования исходных веществ, следовательно, разрез CdTe—Au должен быть квазибинарным.

Диаграмма состояния системы CdTe—Au

Исследование микроструктуры сплавов с различным содержанием Au дало возможность качественно проследить изменения, наблюдаемые в системе. Растворимость Au составляет значительно меньше 1 ат.%, поскольку такой сплав содержит относительно большое количество второй фазы. При дальнейшем увеличении концентрации Au в сплавах наблюдаются те же две фазы. Рентгенофазовый анализ показал наличие рефлексов фаз, соответствующих только CdTe и Au во всей области концентраций. Две фазы на снимках микроструктуры и отсутствие на рентгенограммах рефлексов веществ, отличных от исходных компонентов, свидетельствуют об эвтектическом характере взаимодействия в системе CdTe—Au. В результате ДТА найдены температуры фазовых превращений, а в сочетании с другими физико-химическими методами исследования (РФА, микроструктуры) построена диаграмма состояния (рисунок). Эвтектика состава 75±3 ат.% Au кристаллизуется при 810° С. Таким образом, разрез CdTe—Au тройной системы Au—Cd—Te — квазибинарный. В сплаве, содержащем 30 ат.% Au, исследование микроструктуры указывает на тенденцию к расслаиванию.

Сплавы синтезировали в ограниченном пространстве, причем объем паровой фазы не превышал трехкратного объема жидкой. Испарение было полностью подавлено и не влияло на энтальпию процесса. Положительное значение  $\Delta G$  в исследуемой области температур свидетельствует о сдвиге равновесия реакции в сторону образования исходных веществ, следовательно, разрез CdTe—Au должен быть квазибинарным.

Исследование микроструктуры сплавов с различным содержанием Au дало возможность качественно проследить изменения, наблюдаемые в системе. Растворимость Au составляет значительно меньше 1 ат.%, поскольку такой сплав содержит относительно большое количество второй фазы. При дальнейшем увеличении концентрации Au в сплавах наблюдаются те же две фазы. Рентгенофазовый анализ показал наличие рефлексов фаз, соответствующих только CdTe и Au во всей области концентраций. Две фазы на снимках микроструктуры и отсутствие на рентгенограммах рефлексов веществ, отличных от исходных компонентов, свидетельствуют об эвтектическом характере взаимодействия в системе CdTe—Au. В результате ДТА найдены температуры фазовых превращений, а в сочетании с другими физико-химическими методами исследования (РФА, микроструктуры) построена диаграмма состояния (рисунок). Эвтектика состава 75±3 ат.% Au кристаллизуется при 810° С. Таким образом, разрез CdTe—Au тройной системы Au—Cd—Te — квазибинарный. В сплаве, содержащем 30 ат.% Au, исследование микроструктуры указывает на тенденцию к расслаиванию.



Для изучения природы межмолекулярного взаимодействия рассчитана избыточная энергия смешения вдоль линии ликвидуса, которая увеличивается от 250 при 1340 до 4800 дж при 1120° К. Положительная энергия смешения свидетельствует о преобладающем взаимодействии между атомами Cd и Te в расплаве.

#### Литература

1. *De Nobel D. Philips. Res. Rep.*, v. 14, 361 (1959).
2. *Giriati W., Postepy fizyki*, t. 23, 329 (1973).
3. *Akutagawa W., Thurnbull D., Chu W. K., Mayer J. W. J. Phys. Chem. Solids*, v. 36, 521 (1975).
4. *Панчук О. Э., Щербак Л. П., Панчук И. Э., Антипов И. Н. Ж. неорганич. материалы*, т. 9, 572 (1973).
5. *Верягин У. Д., Маширев В. П., Рябцев Н. Г., Тарасов В. И., Розозкин Б. Д., Коробов И. В. Термодинамические свойства неорганических веществ. М., Атомиздат, 1965.*
6. *Киреев В. А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. М., «Химия», 1970.*

Житомирский педагогический институт  
Черновицкий государственный университет

Поступила  
2 июня 1977 г.