

УДК 546.196,546.681

ОСОБЕННОСТИ ОПТИМИЗАЦИИ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ CdSb

А. А. Ащеулов, И. В. Гуцул, О. Н. Маник, Т. О. Маник

Черновицкий национальный университет имени Юрия Федыковича, Черновцы, Украина
manykto@rambler.ru

ОСОБЕННОСТИ ОПТИМИЗАЦИИ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ CdSb

А. А. Ащеулов, И. В. Гуцул, О. Н. Маник, Т. О. Маник

Аннотация. Предложены математические модели химической связи, её силовых и энергетических характеристик, позволяющие оптимизировать технологические режимы материалов на основе *CdSb*.

Ключевые слова: математические модели, химическая связь, эвтектика, перитектика, невариантные реакции, силовые постоянные, характеристические частоты

ОСОБЛИВОСТІ ОПТИМІЗАЦІЇ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ CdSb

А. А. Ащеулов, І. В. Гуцул, О. М. Маник, Т. О. Маник

Анотація. Запропоновані математичні моделі хімічного зв'язку, його силових та енергетичних характеристик, що дозволяє оптимізувати технологічні режими матеріалів на основі *CdSb*.

Ключові слова: математичні моделі, хімічний зв'язок, евтектика, перитектика, неваріантні реакції, силові постійні, характеристичні частоти

PECULIARITIES OF MATERIAL OPTIMIZATION BASED ON CdSb

A. A. Ashcheulov, I. V. Gutsul, O. N. Manyk, T. O. Manyk

Abstract. The mathematical models of chemical bond are proposed with its force bearing and energy characteristics which allow to optimize the technological modes of materials based on CdSb.

Keywords: mathematical models, chemical bond, eutectic, peritectic, nonvariant reactions, force coefficients, characteristic frequencies

Введение

Антимонид кадмия является перспективным соединением, служащим основой для создания различных материалов электронной техники [1-7]. Значительная анизотропия кинетических коэффициентов при высокой фоточувствительности и оптической прозрачности в ИК - области спектра создают предпосылки для создания нового поколения приборов и устройств на его основе [2, 3].

При разработке конкретных материалов на основе *CdSb* необходимо учитывать факторы, существенно затрудняющие их получение:

склонность стехиометрического расплава к переохлаждению, приводящего к образованию метастабильных фаз Cd_3Sb_2 и Cd_4Sb_3 ; термическую диссоциацию, в результате которой расплав обедняется кадмием. Исходя из этого созрела необходимость интенсифицировать исследования по улучшению характеристик уже известных, а также поиск и синтез принципиально новых материалов. Запросы на такие материалы постоянно опережают реальные возможности материаловедения. До тех пор, пока исследования проводились с относительно простыми соединениями, классическая схе-

ма давала положительный результат. При этом динамика взаимодействия качественно различных факторов, характеризующих состояние системы, разбивалась на сумму однофакторных экспериментов, и получение новых материалов опиралось на результаты экспериментальных исследований отдельно выбранных свойств. С переходом к сложным соединениям такая схема уже не создает условий появления необходимых свойств с перспективой их корреляции в нужном направлении, поскольку исследуемая система характеризуется сложной нелинейной зависимостью от состава. Для выяснения происходящих процессов необходимо знание закономерности прохождения эвтектико - перитектических реакций [8] с целью их перевода в русло невариантных композиций с заданными свойствами. Это в свою очередь требует объединения экспериментальных результатов с физическими основами межатомных взаимодействий, углубленного изучения молекулярно-кинетических закономерностей формирования кристаллов [9].

Особый интерес вызывают структурные изменения в сплавах при их нагреве выше критической и охлаждения до субкритических температур. Они дают возможность приблизиться к решению проблемы теоретического описания процессов плавления и кристаллизации с позиций химической связи [10]. Следует также отметить, что известные теоретические представления, используемые при анализе этих процессов являются полуфеноменологическими и основываются на “подгонке” определенной интерпретационной модели к результатам экспериментальных исследований. Актуальность темы определяется отсутствием в настоящее время строгой микроскопической теории неупорядоченных систем. Её формирование выявило потребность расширения базы имеющихся теоретических разработок количественными расчетами, проведенными методами теории химической связи. Поэтому целью настоящей работы является решение проблем оптимизации *CdSb* путем построения математических моделей химической связи и силовых постоянных микроскопической теории для решения ряда технологических задач.

Научная новизна работы состоит в решении задач оптимизации с учетом природы химической связи вещества.

Анализ теоретических моделей химической связи

Для получения материалов с заданными свойствами необходимо управлять технологическими режимами в определенном направлении. Количество публикаций содержащих такие исследования весьма ограничено, и носит, в основном, экспериментальный характер. Согласно [11], в зависимости от режима термообработки и способа охлаждения сплавы кадмия с сурьмой кристаллизуются в соответствии со стабильной и метастабильной диаграммами состояния. При этом вызывают интерес структурные изменения в этих сплавах, описываемые различными моделями. Анализируя модели химической связи следует отметить ранние работы [11 - 18], согласно которым антимонид кадмия кристаллизуется в ромбической сингонии; структура *CdSb* рассматривается как сильно деформированная структура алмаза, в которой каждый атом *Sb* тетраэдрически окружен тремя атомами *Cd* и одним атомом *Sb*; химическая связь в *CdSb* осуществляется посредством образования *sp*- гибридных орбиталей.

Общим недостатком всех известных публикаций является упрощенный анализ рассматриваемых вопросов, проводимый с учетом какого-то одного фактора (например, координационной структуры вещества), что привело к качественным моделям, неполно отражающим химическую связь в *CdSb*. Строгое рассмотрение природы химической связи в антимонидах кадмия возможно лишь при всестороннем учете различных факторов, включающих координационную структуру, электронную конфигурацию атомов, межатомные расстояния и углы между направлениями связей в кристалле [19].

С учетом электронного строения атомов, принимающих участие в образовании химической связи, согласно [20] математическая модель атомных орбиталей (АО) χ_i выбиралась в виде линейной комбинации $S_i, P_{x,y,z}$ — гибридных орбиталей в общем виде:

$$\chi_i = a_i S_i + b_i P_x + c_i P_y + d_i P_z, \quad (1)$$

где a_i, b_i, c_i, d_i — коэффициенты разложения гибридных функций χ_i по $S_i, P_{x,y,z}$ — волновых функциях валентных электронов.

Используя методику [20–21] и рассчитанные пространственные углы между связями атомов *Cd* и *Sb* по уточненным экспериментальным данным [22, 23] нами была составлена система

уравнений для нахождения коэффициентов a_i , при этом коэффициенты b_i, c_i, d_i находились из условий ортонормирования функций (1).

В результате проведенных вычислений получены следующие уточненные выражения для гибридных ортонормированных орбиталей атомов Cd и Sb :

$$\begin{aligned}\chi_{Cd_1}^{(1)} &= 0,34S_{Cd} + 0,94P_x^{Cd}, \\ \chi_{Cd_1}^{(2)} &= 0,52S_{Cd} - 0,18P_x^{Cd} + 0,84P_y^{Cd}, \\ \chi_{Cd_1}^{(3)} &= 0,67S_{Cd} - 0,24P_x^{Cd} - 0,47P_y^{Cd} + 0,52P_z^{Cd}, \\ \chi_{Cd_1}^{(5)} &= 0,41S_{Cd} - 0,15P_x^{Cd} - 0,28P_y^{Cd} - 0,86P_z^{Cd}, \quad (2) \\ \chi_{Sb_1}^{(1)} &= 0,56S_{Sb} + 0,83P_x^{Sb}, \\ \chi_{Sb_1}^{(2)} &= 0,31S_{Sb} - 0,21P_x^{Sb} + 0,93P_y^{Sb}, \\ \chi_{Sb_1}^{(3)} &= 0,76S_{Sb} - 0,51P_x^{Sb} - 0,36P_y^{Sb} + 0,193P_z^{Sb}, \\ \chi_{Sb_1}^{(4)} &= 0,15S_{Sb} - 0,1P_x^{Sb} - 0,07P_y^{Sb} + 0,98P_z^{Sb},\end{aligned}$$

где введено обозначение $\chi_{Cd(Sb)_i}^{(j)}$ — гибридная функция i - того атома $Cd(Sb)$ j — орбитали.

Анализ химической связи $CdSb$ [19] привел к возможности разработки молекулярной модели $CdSb$, а также сделать следующие выводы:

— Учет межатомных расстояний кристаллов $CdSb$ показал, что все связи φ_i распределяются на 5 семейств соответственно пяти различным межатомным расстояниям, а именно $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ — соответствуют трем расстояниям $Cd-Sb$ ($R_{Cd-Sb} = 2,81; 2,84; 2,91 \text{ \AA}$); φ_4 — $Sb-Sb$ ($R_{Sb-Sb} = 2,81 \text{ \AA}$) и φ_5 — $Cd-Cd$ ($R_{Cd-Cd} = 2,99 \text{ \AA}$).

— Каждый из атомов Cd и Sb в кристаллах $CdSb$ содержит четырех соседей и образует с ними связи. Поскольку расстояние между атомами различные, то и соответствующие им связи неэквивалентные и не имеет места sp^3 — гибридизация атомных орбиталей.

Таким образом, в данной молекулярной модели $CdSb$ нашли отражения все перечисленные выше факторы, характеризующие химическую связь. При этом вид гибридных орбиталей определяется углами между направлениями химических связей, являющихся экспериментальным критерием типа гибридных атомных орбиталей, формирующих химическую связь. С помощью молекулярной модели проведены расчеты зонной структуры, рассмотрено влияние примесей на свойства $CdSb$ с позиций химической связи. Соответствующие расчеты зонной структуры [24] показали, что

энергетические расстояния между экстремумами в различных подзонах малы, поэтому незначительные изменения в химической связи, вызванные дефектами, легированием, режимами термообработки приводят к существенным изменениям физических свойств $CdSb$, что подтверждается известными экспериментальными данными [3].

Особый интерес в материаловедении $A''B^V$ представляют модели, позволяющие проводить оценку температуры твердофазных превращений, плавления и кристаллизации, переохлаждения и нагрева для формирования химических связей, отвечающих за появление требуемых свойств получаемых материалов.

Создание такой модели нуждается в учете особенностей химической связи и исследовании физических свойств, дающих возможность получения количественных оценок динамических параметров кристаллической решетки. Такими параметрами являются упругие постоянные характеризующие фундаментальные свойства твердого тела, адекватно отображающие природу межатомных связей кристаллической решетки. Они могут служить критерием проверки правильности как модели решетки, так и сил связи между её структурными элементами. Решение таких задач предполагает наличие силовых постоянных. В нашем случае это силовые постоянные микроскопической теории, характеризующие химическую связь между атомами.

Математическая модель силовых постоянных микроскопической теории

В отличие от стандартных методов перехода от теории решетки к теории упругости [25], дающих возможность рассчитать упругие постоянные с позиций микроскопической теории, в [20] решена обратная задача: по экспериментальным данным [26] найдены упругие модули, а затем путем составления и решения последующей системы алгебраических уравнений с помощью молекулярных моделей определены компоненты силовой матрицы, используемые далее в микроскопической теории кристаллических решеток [25].

Для нахождения взаимосвязи между теориями упругости [27] и кристаллической решетки [25] необходимо провести сопоставление соответствующих уравнений движения. Связь

между компонентами тензора упругих модулей $\tilde{C}_{ik, mn}$ и силовыми константами микроскопической теории для кристаллов *CdSb*, согласно [20] имеет вид:

$$\tilde{C}_{ik, mn} = -\frac{1}{2V_z} \sum_{h, \ell, h_k} {}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)} (A_k)_m^\ell (A_k)_n^\ell, \quad (3)$$

где ${}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)}$ — коэффициенты разложения потенциальной энергии Φ в ряд по смещениям атомов от положения равновесия; A — матрица задающая положение ядра в решетке; V_z — объем элементарной ячейки; l — обозначает принадлежность к определенному типу неэквивалентных орбиталей, а h_k — характеризует переход атомных связей (в пределах одного семейства) под действием элементов симметрии.

Упругие свойства в этом случае представля-

лись в приближении пружинной связи, то есть колебания вдоль атомных связей определяются соответствующим коэффициентом упругости $f^{(l)}$. При этом величины ${}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)}$, связаны с $f^{(l)}$ соотношением:

$$\|{}^{(\ell)}\Phi_{ik}^{(h)}\| = f^{(l)} \|{}^{(\ell)}\alpha_{ik}^{(h)}\|, \quad (4)$$

где ${}^{(\ell)}\alpha_{ik}^{(h)} = \cos\phi_{li}^h \cos\phi_{lk}^h$ — произведения направляющих косинусов связей l с осями координат x_i и x_k ($1 \leq i; k \leq 3$) атомов элементарной ячейки.

Подставив (4) в (3) с учетом всех возможных значений индексов i, k, l, m допускаемых группой симметрии кристалла, получаем математическую модель — систему алгебраических уравнений, дающих связь между $C_{ik, mn}$ и $f^{(l)}$. В случае *CdSb* эта система имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} -a\tilde{C}_{11} = 0,124f^{(1)} + 0,013f^{(2)} + 0,00091f^{(3)} + 0,0694f^{(4)} + 0,00067f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{22} = 0,00014f^{(1)} + 0,315f^{(2)} + 0,042f^{(3)} + 0,0135f^{(4)} + 0,088f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{33} = 0,157f^{(1)} + 0,000006f^{(2)} + 0,185f^{(3)} + 0,0831f^{(4)} + 0,1985f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{44} = 0,0466f^{(1)} + 0,0014f^{(2)} + 0,0877f^{(3)} + 0,0335f^{(4)} + 0,113f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{55} = 0,139f^{(1)} + 0,00029f^{(2)} + 0,013f^{(3)} + 0,076f^{(4)} + 0,00986f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{66} = 0,0041f^{(1)} + 0,065f^{(2)} + 0,0061f^{(3)} + 0,031f^{(4)} + 0,0077f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{12} = 0,0039f^{(1)} + 0,0658f^{(2)} + 0,0059f^{(3)} + 0,0296f^{(4)} + 0,0074f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{13} = 0,166f^{(1)} + 0,00029f^{(2)} + 0,013f^{(3)} + 0,076f^{(4)} + 0,0099f^{(5)}, \\ -a\tilde{C}_{23} = 0,0058f^{(1)} + 0,0015f^{(2)} + 0,091f^{(3)} + 0,035f^{(4)} + 0,1173f^{(5)}. \end{array} \right. \quad (5)$$

где a — постоянная решетки [18]. Решая систему (5) относительно $f^{(l)}$ получим зависимость $f^{(l)}$ (C_{ij}) для различных связей ($1 \leq l \leq 5$).

Необходимые для расчета силовых констант

$f^{(l)}$ уточненные значения упругих постоянных C_{ijkl} для *CdSb* приведены в [22]. Результаты расчетов $f^{(l)}$ приведены в табл. 1.

Таблица 1

Силовые постоянные $f^{(l)}$, характеристические частоты ω_l и характеристические температуры колебательного плавления $T_{кол}^{(l)}$ отдельных химических связей в кристаллах *CdSb*.

| $f^{(l)}, \omega_l, T^{(l)}$ | l | Cd-Sb-1 | Cd-Sb-2 | Cd-Sb-3 | Sb-Sb | Cd-Cd |
|----------------------------------|-----|---------|---------|---------|-------|-------|
| $ f^{(l)} * 10^2, \text{ Н/м}$ | | 1,95 | 1,91 | 2,07 | 7,13 | 2,4 |
| $\omega_l * 10^{13}, \text{ Гц}$ | | 4,35 | 4,1 | 4,29 | 8,37 | 4,95 |
| $T_{кол}^{(l)}, \text{ К}$ | | 725,48 | 725,87 | 725,6 | 742 | 733,6 |

Полученные результаты использовались для нахождения коэффициентов K_{ij} динамической матрицы.

Для прогнозирования возможных особенностей плавления и кристаллизации необходимо иметь энергетические параметры, характеризующие химические связи. В нашем случае это характеристические частоты колебаний атомов вдоль химических связей, представленных неэквивалентными гибридными орбиталями.

Математическая модель частот колебаний атомов отдельных химических связей (характеристических частот)

Составление уравнений для характеристических частот сводится к нахождению следующей математической модели — коэффициентов взаимодействия динамической матрицы D_{ij} [20]. Для этого находят кинематические коэффициенты A_{ij} и динамические коэффициенты K_{ij} при всевозможных значениях индексов i, l, j :

$$D_{ij} = \sum_l A_{il} K_{lj}, \quad (6)$$

Решая далее секулярное уравнение:

$$\|D_{ij} - \delta_{ij} \omega^2\| = 0, \quad (7)$$

где $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{при } i = j \\ 0, & \text{при } i \neq j \end{cases}$, ω — частота колебаний,

получим значение квадратов частот колебаний атомов вдоль химических связей. Однако следует отметить, что наличие аномальных углов между связями θ_{13}^{Sb} , θ_{23}^{Sb} и θ_{15}^{Cd} в $CdSb$, отличающихся от угла тетраэдрической связи [19], приводит к тому, что область наибольшего перекрытия соответствующих орбиталей находится под углом к линии связи. Это необходимо учитывать при расчетах динамических коэффициентов K_{ij} и матричных элементов D_{ij} динамической матрицы. С учетом этих замечаний получены численные значения характеристических частот, также приведенные в таблице 1.

Обсуждение результатов

Изложенный выше подход дал возможность решить целый ряд технологических задач, когда плавление рассматривается как следствие механической нестабильности, приводящей к невозможности существования кристалла при температурах выше T_{nl} . В этом случае плавление

рассматривается как результат теплового разрушения кристаллической решетки. Эта идея получила математическое выражение в теории колебательной нестабильности кристаллических решеток [10].

Колебательные теории удобно рассматривать в рамках общей феноменологии плавления. Вывод о том, что плавление включает определенное усиление теплового движения, является следствием атомистической теории материи. Эта идея получила математическое выражение в предложенной Линдеманном теории колебательной нестабильности кристаллических решеток, приводящей к плавлению. Пользуясь простейшей моделью колебаний решетки с единственной характеристической частотой ν_E , введенной Эйнштейном, Линдеманн пришел к выводу, что по мере повышения температуры амплитуда колебаний атомов около равновесных положений должна последовательно возрастать. Он предположил, что, когда размах этих колебаний становится сравнимым с межатомными расстояниями, взаимное “нарушение” колебаний становится заметным и что кристалл теряет механическую стабильность.

Уравнение температуры плавления [10] имеет вид:

$$T_{кол} = c \nu_E^2 V_n^{2/3} M, \quad (8)$$

Оно связывает характеристическую частоту колебаний в кристалле с температурой колебательного плавления $T_{кол}$ и другими физическими величинами, которые для конкретных веществ — известны: молярным объемом V_k и атомной массой M . Предполагалось, что константа c имеет одинаковое значение для кристаллов подобного строения и поэтому ее подсчитывали по температуре плавления какого-либо одного вещества. Многочисленные работы показали, что эта модель по существу не позволяет построить однофазную теорию колебательного плавления, так как не удовлетворяет фундаментальным принципам термодинамики [10]. Однако, это возражение не распространяется на область весьма высоких температур и давлений. Даже в обычных условиях формулу Линдеманна удобно использовать для нахождения зависимостей между различными физическими свойствами твердых тел, связанных с T_{nl} . Одна из причин заключается в том, что энергия позиционного разупорядочения кристалла тесно связана с возвращающими силами, действующими

щими при колебаниях кристаллической решетки; любую из этих величин можно использовать для описания других физических свойств кристалла. Следует также подчеркнуть, что такая модель подобно более сложным моделям колебательного плавления, появившимся за ней, относится к кристаллам простейшего строения, т.е. к плотноупакованным ансамблям атомов.

Кристаллы, в элементарную ячейку которых входят более сложные единицы, например молекулы, отличаются сложностью колебаний, исключая наличие простого предела стабильности решетки, зависящего лишь от амплитуды колебаний относительно центров масс молекул. Однако, в таких структурах повышенной сложности при закритических амплитудах может развиваться неустойчивость определенных видов колебаний.

Проведенный анализ показал, что хотя эта модель по сути и не дает возможности построения теории “однофазного” колебательно-го плавления, однако при этом она позволяет использовать формулу (8) для нахождения “эффективных” значений характеристической температуры отдельных химических связей, являющихся важным параметром динамики колебаний низкосимметричной кристаллической решетки. Принятие такой концепции позволяет объяснить тонкую структуру плавления и кристаллизации $CdSb$, проследить при этом динамику формирования её химической связи.

Однако, прежде чем принять эту концепцию необходимо сделать следующее замечание. Согласно (8) выражение для температуры колебательного плавления содержит постоянные, которые принимают одинаковое значение для кристаллов подобного строения. Поэтому отношение температур $T_{кол}^{(l)}$ будет равняться отношению квадратов характеристических частот. Учитывая, что интервал кристаллизации стабильных и метастабильных состояний $CdSb$ составляет ~ 26 K [11], можно полагать, что в этом интервале будут находиться и все $T_{кол}^{(l)}$ ($1 < l < 5$).

В качестве иллюстрации применения рассматриваемых математических моделей для решения технологических задач в табл. 1 представлены температуры колебательного плавления, рассчитанные с учетом сделанных замечаний.

Приведенные в этой таблице данные подтверждаются технологическими режимами получения конкретных оптических и термоэлектрических материалов на основе $CdSb$ [3].

В первом случае расплав стабилизировался при температуре 743 K. Это позволило получить высокосовременные монокристаллические слитки $CdSb$ с плотностью дислокаций не более 10^2 см⁻² и коэффициентом оптического поглощения $\beta = 0,1 - 0,2$ см⁻¹ в спектральном диапазоне прозрачности 2,9 - 30,0 мкм. Во втором случае температура расплава в процессе кристаллизации слитка периодически изменялась в интервале 730-740 K. Это привело к появлению объемно-периодических слоистых структур $CdSb$, характеризующихся повышенным значением коэффициента поперечной термо ЭДС $\Delta\alpha = 300 - 350$ мкВ в интервале 250-360 K.

Сопоставление результатов табл. 1 с приведенными экспериментальными данными показало, что формирование физических свойств в первом случае происходило при наличии в жидкой фазе связей $Sb-Sb$, а синтез связей $Cd-Cd$ и $Cd-Sb$ происходил в энергетически выгодных условиях уже “сформированных” связей $Sb-Sb$.

Во втором случае образование связей $Cd-Sb$ различной длины происходило уже при наличии связей $Sb-Sb$ и $Cd-Cd$, что привело к росту степени дефектности получаемого материала. Коррекция дефектов проводится с помощью дальнейшего отжига. Таким образом в таком технологическом приеме, как отжиг, получаем важный инструмент для формирования объемных наноструктур с заданными свойствами.

Необходимо также отметить, что существующие колебательные теории распространяются на кристаллические решетки простейших видов (примитивные кубические), а тонкие эффекты процессов плавления здесь просто упускаются. Все это свидетельствует о необходимости построения более реальных моделей процессов плавления. Их создание, на наш взгляд, нуждается в учете особенностей химической связи, исследовании физических свойств и построении математических моделей, дающих возможность получения количественных оценок динамических параметров конкретной кристаллической решетки.

Выводы

Предложены математические модели для расчета параметров химической связи, ее силовых и энергетических характеристик, позволившие провести комплексные исследования динамики её формирования в случае $CdSb$.

Уточнена феноменологическая теория плавления и кристаллизации *CdSb*, путем расчетов технологических параметров (характеристических частот колебаний атомов, температур колебательного плавления отдельных химических связей).

Установлено наличие "тонкой" структуры плавления и кристаллизации *CdSb*, позволяющие формировать объемные структуры с заданными свойствами.

Показано, что при разработке технологических режимов синтеза и кристаллизации новых материалов необходимо учитывать "тонкую" структуру процессов плавления и кристаллизации; условия плавления стабильных и метастабильных фаз путем расчета температурных интервалов формирования необходимых химических связей.

Список литературы

1. Лазарев В. Б., Шевченко В. Я., Гринберг Я. Х., Соболев В. В. Полупроводниковые соединения группы $A^{IV}B^V$. — М.: Наука, 1978. — 256с.
2. Ashcheulov A. A., Manik O. N., Marenkin S. F. Cadmium antimonide: Chemical Bonding and technology // *Inorganic materials*. — 2003. — V.39, №2. — P.559-67.
3. Ашеулов А. А., Воронка Н. К., Маренкин С. Ф., Раренко И. М. Получение и использование оптимизированных материалов из антимонида кадмия // *Неорганические материалы*. — 1996. — Т.32, №9. — С.1049-1060.
4. Снарский А. А., Пальти А. М., Ашеулов А. А. Анизотропные термоэлементы. Обзор // *ФТП*. — 1997. — Т.31, №11. — С.832-841.
5. Ашеулов А. А. Координатно - чувствительные устройства на основе анизотропных оптикотермоэлементов // *Оптический журнал*. — 2008. — Т.75, №5. — С.24-34.
6. Ашеулов А. А., Грицюк Б. Н., Стребежев В. Н. Инфракрасные отрезающие фильтры на основе монокристаллов *CdSb*, *ZnSb* для оптофотоэлектронных устройств // *ТКЭА*. — 2009. — №1. — С.34-39.
7. Ашеулов А. А., Гуцул И. В. Особенности анизотропных оптикотермоэлементов // *ФТП*. — 2006. — Т.40, №8. — С.995-1003.
8. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение. — М.: Атомиздат, 1975. — 472с.
9. Смирнов А. А. Молекулярно-кинетическая теория металлов. — М.: Наука, 1996. — 488с.
10. Уббеллоде А. Р. Расплавленное состояние вещества. — М.: Металлургия, 1982. — 375с.
11. Диаграммы состояния двойных металлических систем Т.1 / Под редакцией акад.РАН Н. П. Лякишева. — М.: Машиностроение, 1996. — С.370-371.
12. Almin K. E. The crystal structure of *CdSb* and *ZnSb* // *Acta Chem. Scand.* — 1948. — №2. — P.400-407.
13. Mooser E., Pearson W. B. The chemical bond in semiconductors // *J. Electronics*. — 1956. — V.1, №6. — P.629-645.
14. Justi E., Lautz G. Über die Störstellen und Eigenleitung intermetallischer Verbindungen // *Z. Naturforsch.* — 1952. — №7a. — P.602-613.
15. Toman K. Anisotropy of chemical bond in *CdSb* Compound // *Czechosl. J. Phys.* — 1963. — V.13, №6. — P.431.
16. Угай Я. А., Домашевская Э. П. Эмиссионные $L_{\beta 2,15}$ спектры кадмия и сурьмы в некоторых полупроводниковых соединениях // *Изв. АН СССР. сер. физ.* — 1964. — Т.28, №5. — С.853.
17. Velicky B., Frey V. The chemical bond in *CdSb* // *Czechosl. J. Phys.* — 1963. — V.13, №8. — P.594-598.
18. Материалы, используемые в полупроводниковых приборах / Под ред. К. Хогарта. — М.: Мир, 1968. — С.214.
19. Маник О. Н. Особенности зонного спектра и химической связи в кристаллах антимонида кадмия / Автореф. дис. канд. физ. — мат. наук. — Черновцы. — 1987.
20. Маник О. М. Багатофакторний підхід в теоретичному матеріалознавстві. — Чернівці: Прут, 1999. — 432с.
21. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. — М.: Высшая школа, 1979. — 407с.
22. Ерьоменко О. И., Маник О. М., Раранський М. Д. Дослідження особливостей хімічного зв'язку в кристалах твердих розчинів системи *CdSb-ZnSb* // *НВ ЧНУ. Фізика. Електроніка*. — 2005. — №268. — С.109-112.
23. Балазюк В. Н., Еременко О. И., Маник О. Н., Раранський Н. Д. Комплексные исследования влияния температуры и состава на упругие свойства монокристаллов твердых растворов *CdSb-ZnSb* // *Термоэлектричество*. — 2008. — №3. — С.50-57.
24. Маник О. Н., Раренко И. М. Исследование зонной структуры *CdSb* // *ФТП*. — 1986. — Т.20, №9. — С.1706-1709.
25. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. — М. — Л.: Госиздат, 1963. — 312с.
26. Балазюк В. Н., Пересада Г. И., Раренко И. М. О зависимости констант упругости *CdSb* от гидравлического давления // *ФТП*. — 1978. — Т.20, №7. — С.2224-2225.
27. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — М.: Наука, 1965. — 204с.