

## ПРОЕКТУВАННЯ І МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРІВ

### SENSORS DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING

---

---

УДК 541.123:21

#### МОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ СЕЛЕНА

*А. А. Ащеулов, О. Н. Маник, Т. О. Маник, В. Р. Билинский-Слотыло*

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федыковича, Черновцы, Украина  
e-mail: manykto@rambler.ru

#### МОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ СЕЛЕНА

*А. А. Ащеулов, О. Н. Маник, Т. О. Маник, В. Р. Билинский-Слотыло*

**Аннотация.** Методами теории упругости и динамики кристаллической решетки определены особенности формирования химической связи Se, расширяющие возможности решения материаловедческих задач.

**Ключевые слова:** математические модели, химическая связь, силовые постоянные, характеристические частоты и температуры

#### МОЛЕКУЛЯРНА МОДЕЛЬ І ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК СЕЛЕНУ

*А. А. Ащеулов, О. М. Маник, Т. О. Маник, В. Р. Білінський-Слотило*

**Анотация.** Методами теорії пружності та динаміки кристалічної ґратки визначені особливості формування хімічного зв'язку селену, що розширюють можливості вирішення задач матеріалознавства.

**Ключові слова:** математичні моделі, хімічний зв'язок, силові постійні, характеристичні частоти та температури

#### MOLECULAR MODEL AND THE CHEMICAL BOND OF SELENIUM

*A. A. Ashcheulov, O. N. Manyk, T. O. Manyk, V. R. Bilynskiy-Slotylo*

**Abstract.** By methods of theory of elasticity and lattice dynamics were identified peculiarities of the chemical bond formation of selenium that extends the capabilities of solving materials science problems.

**Keywords:** mathematical models, chemical bond, force coefficients, characteristic frequencies and temperatures

## Введение

Современное материаловедение предъявляет всевозрастающие требования к материалам на основе селена, используемых для создания различных элементов сенсорной электроники [1,2].

Селен — химический элемент VI группы периодической системы Менделеева, который встречается в трех модификациях:  $\alpha$ -моноклинный,  $\beta$ -моноклинный и  $\gamma$ -гексагональный. Термодинамически стабильной, при нормальных условиях, является гексагональная модификация селена, а остальные превращаются в гексагональную при нагревании до 560–600 К. Селен является типичным дырочным полупроводником с шириной запрещенной зоны  $\Delta E = 1,8$  эВ. Для него характерно изменение проводимости при освещении, сильно зависящей от частоты переменного тока, что указывает на свойства селена образовывать различные кристаллические структуры (модификации) при изменении внешних условий, сохраняя химический состав [3–6].

Механизм и скорость полиморфных превращений определяются энергетическими характеристиками исходных и конечных структур, зависящих от типа химической связи и способа размещения атомов в структуре. У модификации, устойчивой при более высокой температуре и характеризующейся большой внутренней энергией, меньшие координационные числа, большие межатомные расстояния или иной тип химической связи.

Полиморфные превращения обычно связаны с изменением вторичной координации (быстрые — со смещением атомов, медленные — с перестройкой структуры), с разупорядочением (быстрые — вследствие вращений, медленные — в результате замещений), с изменением первичной координации (быстрые — с расширением, медленные — с перестройкой структуры) и с изменением типа химической связи (обычно медленные) [1].

Такое качественное представление о полиморфных превращениях объясняет некоторые физические свойства селена. Однако, для создания новых материалов с заданными параметрами необходима информация о технологических возможностях этого элемента с учетом зависимости таких преобразований от природы химической связи.

Поэтому целью настоящей работы являются комплексные исследования динамики формирования химической связи селена. Для решения поставленной задачи с помощью созданной молекулярной модели определены силовые и энергетические параметры, позволяющие провести оценку температур формирования составляющих его химической связи.

## Кристаллическая структура и молекулярная модель Se

Установлено [1–3], что параметры решетки селена  $a=4,363 \text{ \AA}$ ,  $c=4,959 \text{ \AA}$ , при  $c/a=1,1366$  и наименьшие расстояния между атомами в цепочках  $3,4496 \text{ \AA}$  и  $2,3121 \text{ \AA}$ . Координационное число  $K=12$ . Селен характеризуется 6 стабильными и 11 радиоактивными изотопами. Электронное строение атомов ( $d^{10} - s^2$ ) определяет кристаллическое строение селена, его полиморфные превращения и фазовые переходы.

Наличие различных межатомных расстояний селена необходимо учитывать при построении молекулярной модели, в которой строго конкретизируется — какие именно и сколько электронов образуют ковалентную и металлическую составляющие связи.

Корректный учет всех перечисленных факторов проводился путем решения обратной задачи: по экспериментальным данным параметров решетки и наименьших межатомных расстояний [1–3], устанавливались координаты атомов элементарной ячейки селена. Результаты расчетов приведены в табл. 1, а обозначения атомов — на рис. 1. Численные значения приведены в декартовой системе координат, начало которой совмещено с центром элементарной ячейки.

Эти результаты позволили определить пространственные углы между направлениями связей селена и установить, что химические связи подразделяются на пять групп, согласно межатомным расстояниям:

$$\varphi_1(R_{01''}=2,396 \text{ \AA}); \varphi_2(R_{01'}=3,575 \text{ \AA});$$

$$\varphi_3(R_{1''1}=3,833 \text{ \AA}); \varphi_4(R_{1'1}=4,0945 \text{ \AA});$$

$$\varphi_5(R_{01}=4,363 \text{ \AA}).$$

Такая особенность обусловлена одновременным проявлением ковалентной и металлической составляющих химической связи Se.

Координаты атомов элементарной ячейки селена

Se	x	y	z	Se	x	y	z
1	0	4,363	0	1'	0,9958	1,7248	2,9687
2	3,778	2,1815	0	2'	0,9958	-1,7248	2,9687
3	3,778	-2,1815	0	3'	-1,9916	0	2,9687
4	0	-4,363	0	1''	-0,667	1,156	-1,9897
5	-3,778	-2,1815	0	2''	1,334	0	-1,9897
6	-3,778	2,1815	0	3''	-0,667	-1,156	-1,9897

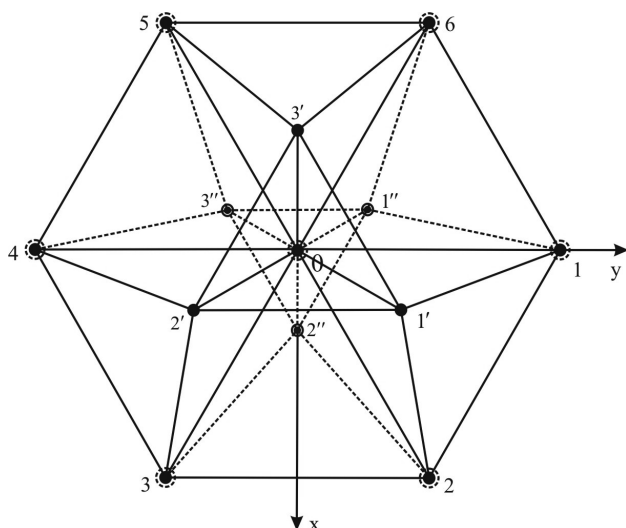


Рис. 1. Проекция элементарной ячейки на плоскость  $XU$  (вид вдоль гексагональной оси симметрии  $C_6$ ). Номера в плоскости  $XU$  0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 обозначают атомы, находящиеся на расстоянии постоянной решетки  $a=4,363 \text{ \AA}$  от центрального атома; 1', 2', 3' – атомы, находящиеся выше плоскости  $XU$  ( $z = 2,9687 \text{ \AA}$ , что соответствует расстоянию  $R' = 3,575 \text{ \AA}$ ); 1'', 2'', 3'' – атомы, находящиеся ниже плоскости  $XU$  ( $z = -1,9897 \text{ \AA}$ , что соответствует расстоянию  $R'' = 2,396 \text{ \AA}$  от центрального атома)

Поскольку координационное число атомов плотноупакованных гексагональных структур намного превышает число валентных электронов, то это не позволяет использовать представление о простой двуцентровой связи. Принятие концепции резонанса валентных связей [6] привело к выводу о том, что образование плотных гексагональных структур происходит в результате перекрытия внешних сферических  $s$ - оболочек, стабилизируемых  $d$ - орбиталями и сопровождается выделением энергии металлической связи  $E_{мет}$ . При этом, металлические связи плотноупакованных структур имеют смешанную  $s$ - и  $d$ - симметрию. Таким образом, образование связей селена сопровождается перераспределением  $d$ - и  $s$ - электронов в гексагональных слоях и образованием  $sp$ - гиб-

ридных орбиталей между слоями так, что все связи элементарной ячейки селена естественно распадаются на пять семейств, переходящих друг в друга под действием элементов симметрии связей. Гибридные атомные орбитали  $\varphi^{(l)}$  ( $1 \leq l \leq 5$ ), характеризующие ковалентную составляющую химической связи и представляющие эти семейства, рассчитанные согласно [7], имеют вид:

$$\varphi^{(1)} = 0,5902 \cdot S + 0,4316 \cdot P_x - 0,2377 \cdot P_y + 0,6395 \cdot P_z; \quad (1)$$

$$\varphi^{(2)} = 0,5902 \cdot S + 0,4315 \cdot P_x - 0,2376 \cdot P_y + 0,6395 \cdot P_z; \quad (2)$$

$$\varphi^{(3)} = 0,5773 \cdot S - 0,3937 \cdot P_x + 0,2493 \cdot P_y + 0,6704 \cdot P_z; \quad (3)$$

$$\varphi^{(4)} = 0,5774 \cdot S - 0,394 \cdot P_x + 0,2491 \cdot P_y + 0,6703 \cdot P_z; \quad (4)$$

$$\varphi^{(5)} = 0,5774 \cdot S - 0,4083 \cdot P_x + 0,7024 \cdot P_y + 0,0812 \cdot P_z. \quad (5)$$

Для невырожденных молекулярных  $\pi$ - орбит, характеризующих металлическую составляющую химической связи, построенных на атомных базисных функциях семейства  $\varphi_1^{(5)}, \varphi_2^{(5)}, \dots, \varphi_6^{(5)}$  находящихся в плоскости  $XU$  (рис. 1), линейные комбинации имеют следующий вид [5]:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\varphi_1^{(5)} + \varphi_2^{(5)} + \varphi_3^{(5)} + \varphi_4^{(5)} + \varphi_5^{(5)} + \varphi_6^{(5)}); \quad (6)$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\varphi_1^{(5)} - \varphi_2^{(5)} + \varphi_3^{(5)} - \varphi_4^{(5)} + \varphi_5^{(5)} - \varphi_6^{(5)}). \quad (7)$$

Аналогично представляются и комбинации для вырожденных орбит [8]. Анализ результатов (1–5) показывает, что в приближении ближайших соседей селен обладает пятью неэквивалентными семействами химических связей, что определяет как его физические свойства, так и технологические особенности получения материалов на его основе.

### Силовые и энергетические параметры селена

При изучении твердофазных превращений особый интерес вызывают структурные изменения элементов при нагреве выше критической и охлаждении до субкритических температур.

Различные представления, используемые при анализе этих процессов, являются полуфеноменологическими [9]. Формирование основ микроскопической теории привело к необходимости расширения базы имеющихся теоретических разработок количественными расчетами с помощью молекулярных моделей, в которых процесс плавления рассматривается как следствие механической неустойчивости.

Первым этапом такого подхода является установление взаимосвязи между теориями упругости [10] и решетки [11] путем сопоставления соответствующих уравнений движения.

Теория упругости рассматривает кристалл как континуум с постоянной плотностью  $\rho$  в недеформированном равновесном состоянии. Его состояние описывается векторным полем смещений  $S(R,t)$ , задающим смещение в момент  $t$  некоторой точки, имеющей в равновесии координату  $R$ . Деформация континуума в этом случае представляется симметричным тензором деформации:

$$\varepsilon_{mn} = \frac{1}{2}(S_{m/n} + S_{n/m}), \quad (8)$$

где  $S_{m/n} = \partial S_m / \partial x_n$  характеризует изменение вектора смещения компонент  $x_n$ . Соотношение между напряжениями и деформациями, согласно закону Гука [10], выражается тензором четвертого ранга:

$$\sigma_{ik} = \sum_{m,n} C_{ik,mn} \varepsilon_{mn}, \quad (9)$$

где  $\sigma_{ik}$  — тензор напряжений;  $C_{ik,mn}$  — тензор упругих постоянных.

Уравнение движения теории упругости при условии равенства сил инерции и сил, заданных напряжениями имеет вид:

$$\rho \ddot{S}_i = \sum C_{ik,mn} S_{m/nk}. \quad (10)$$

Это уравнение сопоставляется с уравнением движения теории решетки:

$$M \ddot{S}_i^m = - \sum_{m,k} \Phi_{ik}^{mn} S_i^n, \quad (11)$$

где  $\Phi_{ik}^{mn} = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^m \partial x_k^n} \right|_{R=R_0}$  — сила, действующая на

атом  $m$  в направлении  $(i)$ , когда атом  $n$  смещен на расстояние  $S$  в направлении  $k$  при условии нахождении других атомов в состоянии равновесия  $R=R_0$ ;  $M$  — усредненная масса.

Заменяя в (11)  $S_i^m$  полем смещений  $S_i(R,t)$  [11]

$$S_i^m = S(\bar{A}m, t), \quad (12)$$

где  $\bar{A}$  — матрица, задающая положение ядра в решетке.

Разлагая  $S_k^n$  в ряд возле точки  $R = \bar{A}m$ , а также вводя плотность  $\rho = M/V_z$ , где  $V_z$  — объем элементарной ячейки, получим:

$$\rho \ddot{S}_i = \sum_{kmn} C_{ik,mn} S_{k/mn}, \quad (13)$$

где  $C_{ik,mn} = -\frac{1}{2V_z} \sum_h \Phi_{ik}^h(\bar{A}h)_m (\bar{A}h)_n$ . (14)

Для случая пружинной связи только между ближайшими соседями с коэффициентом упругости  $f$  силовые матрицы имеют вид:

$$(\Phi_{ik}^{mn})^h = -\frac{f}{D^2} (\bar{A}h + R_\mu - R_\nu)_i (\bar{A}h + R_\mu - R_\nu)_k, \quad (15)$$

для  $|\bar{A}h + R_\mu - R_\nu| = D$ , где  $D$  — расстояние между ближайшими соседями (рис. 2) и, следовательно,

$$C_{ik,mn} = \frac{f}{2V_z D^2} \sum_{h,\mu,\nu} [X_i X_k X_m X_n], \quad (16)$$

где  $X_i$  — проекции межатомных расстояний на оси  $XYZ$  ( $1 \leq i, k, m, n \leq 3$ ) [11].

Анизотропия упругих постоянных такой идеальной модели согласно [11]:

$$C_{33} : C_{11} : C_{12} : C_{13} : C_{44} = 4 : 3,625 : 1,375 : 1 : 1. \quad (17)$$

Оценка упругих постоянных селена и их анизотропии проводилась по экспериментальным данным модуля Юнга, коэффициента Пуассона, модуля сдвига и сжимаемости [1–3]. Была составлена система уравнений для  $C_{ij}$  в зависимости от рассматриваемых параметров и найдены их численные значения. Результаты вычислений приведены в табл. 2. Таким образом, в реальном селене отношение упругих постоянных составляет:

$$C_{33} : C_{11} : C_{12} : C_{13} : C_{44} = 5,51 : 5,8 : 3,76 : 3,73 : 1, \quad (18)$$

что подтверждает наличие двойной гексагональной плотноупакованной кристаллической структуры Se.

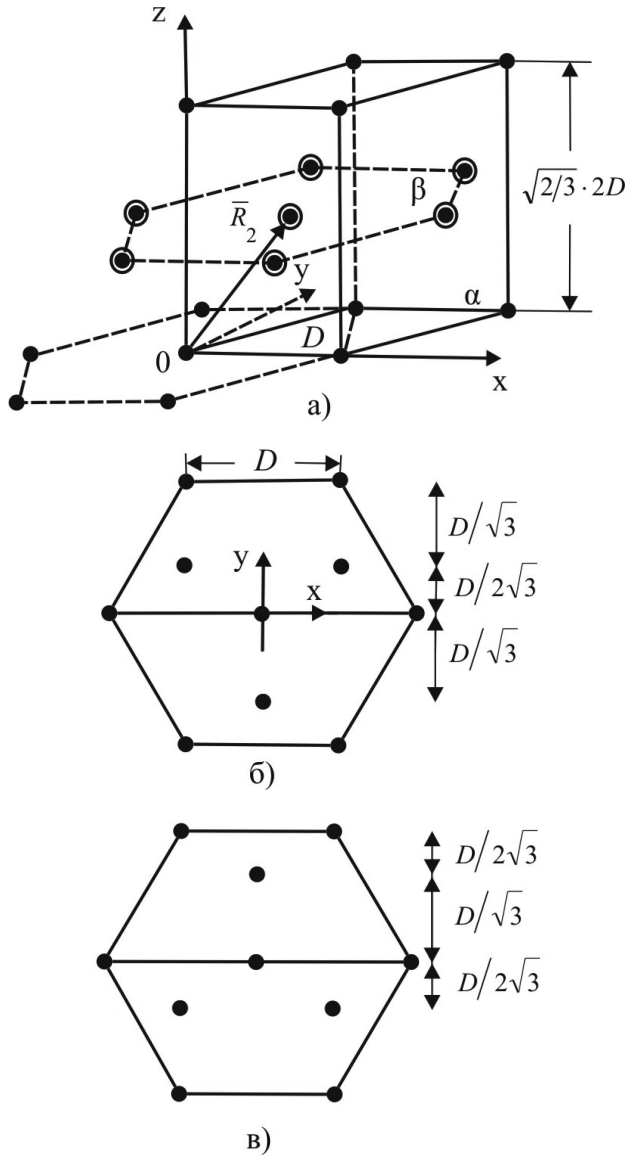


Рис. 2. Плотная гексагональная упаковка: а — структура решетки, б — окружение атома подрешетки 1 (атомы подрешетки 2 лежат выше и ниже на  $\sqrt{2/3}D$ ), в — окружение атома подрешетки 2 (атомы подрешетки 1 лежат выше и ниже на  $\sqrt{2/3}D$ )

Табл. 2

Значения упругих постоянных кристаллов селена

	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{33}$	$C_{44}$
$C_{ij} \cdot 10^{10},$ дин/см <sup>2</sup>	110,3	71,5	70,9	104,84	19,01

Для описания упругих свойств селена использовалось приближение пружинной связи. Это значит, что колебания вдоль межатомных

связей происходят независимо и характеризуются своим коэффициентом упругости  $f^{(l)}$ , где  $1 \leq l \leq 5$ .

Соотношение (16) модифицировалось следующим образом:

$$C_{ik,mn} = \frac{1}{2V_z} \sum_z^{(l)} \Phi_{ik}^{(h)} (Ah_k)_m^l (Ah_k)_n^l, \quad (19)$$

где  $l$  — означает принадлежность к определенному типу неэквивалентных орбиталей (см. рис. 3), а  $h_k$  характеризует переход атомных связей в рамках одного семейства под действием элементов симметрии.

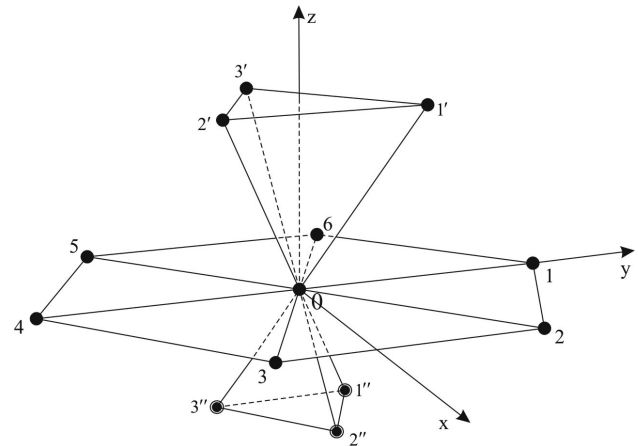


Рис. 3. Молекулярная модель селена

В таком приближении колебания вдоль атомных связей определяются соответствующим коэффициентом упругости  $f^{(l)}$ . При этом величины  $^{(l)}\Phi_{ik}^{(h)}$  связаны с  $f^{(l)}$  соотношением:

$$\|^{(l)}\Phi_{ik}^{(h)}\| = f^{(l)} \|^{(l)}\alpha_{ik}^{(h)}\|, \quad (20)$$

где  $^{(l)}\alpha_{ik}^{(h)} = \cos \varphi_{li}^h \cos \varphi_{lk}^h$  — произведения направляющих косинусов связей  $\varphi_l$  ( $1 \leq l \leq 5$ ) с осями  $x_i$  и  $x_k$  ( $1 \leq i, k \leq 3$ ) атомов элементарной ячейки [7].

Составляя уравнения типа (19), характеризующих взаимосвязь между силовыми матрицами и упругими постоянными Se и решая далее эту систему уравнений относительно  $f^{(l)}$  были определены аналитические выражения и численные значения силовых констант микроскопической теории  $f^{(l)}$ . Необходимые для расчета  $f^{(l)}$  значения упругих констант Se приведены в табл. 2.

При этом аналитические выражения силовых констант имеют вид:

$$\begin{cases} f^{(1)} \cdot a^{-1} = 0,8065 \cdot C_{11} - 0,2804 \cdot C_{12} + \\ + 0,8065 \cdot C_{13} - 0,0172 \cdot C_{33} + 2,0469 \cdot C_{44}, \\ f^{(2)} \cdot a^{-1} = 4,8045 \cdot C_{11} - 1,8211 \cdot C_{12} - \\ - 2,6744 \cdot C_{13} - 0,1026 \cdot C_{33} - 6,2907 \cdot C_{44}, \\ f^{(3)} \cdot a^{-1} = 0,6003 \cdot C_{11} - 0,1327 \cdot C_{12} + \\ + 0,0676 \cdot C_{13} - 0,0647 \cdot C_{33} + 0,1713 \cdot C_{44}, \\ f^{(4)} \cdot a^{-1} = -0,691 \cdot C_{11} + 0,2063 \cdot C_{12} - \\ - 0,0778 \cdot C_{13} + 0,0383 \cdot C_{33} - 0,1965 \cdot C_{44}, \\ f^{(5)} \cdot a^{-1} = -0,1226 \cdot C_{11} + 0,0522 \cdot C_{12} - \\ - 0,0155 \cdot C_{13} - 0,0158 \cdot C_{33} - 0,0394 \cdot C_{44}. \end{cases} \quad (21)$$

Эти результаты использовались в расчетах энергетических параметров Se. В нашем случае это характеристические частоты колебаний атомов отдельных химических связей.

### Расчет характеристических частот

Нахождение частот колебаний атомов кристалла селена заключается в применении уравнений Лагранжа [7]. Записав потенциальную и кинетическую энергии в обобщенных координатах  $x_i$  ( $i=1,2,...n$ ), обозначающих выход рассматриваемой системы  $n$ - частиц из положения равновесия, и подставляя решение колебательного типа в виде

$$x_j = x_{j0} e^{i\omega t}, \quad (22)$$

где  $\omega$  — круговая частота колебаний (обычная частота  $\nu$  — число колебаний в единицу времени, умноженная на  $2\pi$ ), получим:

$$\sum_{j=1}^n (K_{ij} - T_{ij}\omega^2) = 0, \quad (j=1,2,...n), \quad (23)$$

где  $T_{ij}$  — постоянные, зависящие от масс и геометрии равновесной конфигурации, а  $K_{ij}$  — постоянные потенциальной энергии, характеризующие силовую структуру рассматриваемой системы.

Условием решения (23) является равенство нулю определителя

$$\begin{vmatrix} (K_{11} - T_{11}\omega^2) & (K_{12} - T_{12}\omega^2) & \dots & (K_{1n} - T_{1n}\omega^2) \\ (K_{21} - T_{21}\omega^2) & (K_{22} - T_{22}\omega^2) & \dots & (K_{2n} - T_{2n}\omega^2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ (K_{n1} - T_{n1}\omega^2) & (K_{n2} - T_{n2}\omega^2) & \dots & (K_{nn} - T_{nn}\omega^2) \end{vmatrix} = 0. \quad (24)$$

Формулу (24) необходимо привести к более удобному виду, когда  $\omega^2$  входит лишь в диаго-

нальные элементы определителя. Для этого домножаем (23) на коэффициенты, удовлетворяющие условиям:

$$\sum_{\ell} A_{i\ell} T_{\ell j} = \delta_{ij} \begin{cases} 1 & \text{при } \ell = j \\ 0 & \text{при } \ell \neq j \end{cases}. \quad (25)$$

Вводя в дальнейшем коэффициенты

$$D_{ij} = \sum_{\ell} A_{i\ell} K_{\ell j}, \quad (26)$$

представим систему (23) в диагональном виде, при этом преобразованное уравнение (24) приобретает следующий вид:

$$|D_{ij} - \delta_{ij} \omega^2| = 0. \quad (27)$$

Таким образом, расчет характеристических частот сводится к нахождению коэффициентов взаимодействия динамической матрицы  $D_{ij}$ . Для этого, согласно (26), необходимо найти кинематические  $A_{i\ell}$  и динамические коэффициенты  $K_{\ell j}$  при всевозможных значениях индексов  $i, \ell, j$ . Методика их расчета аналогична случаю ромбических кристаллов [7,12].

Аналогично определялись силовые коэффициенты  $K_{ij}$ . Согласно (21), коэффициенты упругости  $f^{(l)}$  связей, соответствующих неэквивалентных орбиталей Se составляли:

$$\begin{aligned} f^{(1)} &= 71,2 \text{ Н/м}; f^{(2)} = 34,8 \text{ Н/м}; f^{(3)} = 25,3 \text{ Н/м}; \\ f^{(4)} &= -29,1 \text{ Н/м}; f^{(5)} = -5,8 \text{ Н/м}. \end{aligned} \quad (28)$$

Полученные результаты использовались для расчета характеристических частот  $\omega_i$  и соответствующих им температур  $T_p$ , приведенных в табл. 3.

Табл. 3

Численные значения характеристических частот  $\omega_i \cdot 10^{12}$ , Гц и температур  $T_p$ , К.

$\omega_i, T_p$	$\Phi_1$	$\Phi_2$	$\Phi_3$	$\Phi_4$	$\Phi_5$
$\omega_i \cdot 10^{12}, \text{ Гц}$	46,7	33,52	25,22	22,5	14,03
$T_p, \text{ К}$	490	475	465,7	462,6	453

Изложенный выше подход дает возможность решения ряда технологических задач, связанных с полиморфными превращениями, а также «тонкой» структурой плавления и кристаллизации Se.

Пользуясь моделью колебаний решетки с единственной характеристической частотой  $\nu_E$ , Линдеманн получил уравнение для температуры плавления [9]:

$$T_{\text{кол}} = c \nu_E^2 V_n^{2/3} M, \quad (29)$$

связывающим характеристическую частоту колебаний в кристалле с температурой колебательного плавления  $T_{кол}$ , молярным объемом  $V_n$  и атомной массой  $M$ .

В дальнейшем оказалось, что эта модель не позволяет построить однофазную теорию колебательного плавления [9]. Однако, принятие концепции колебательного плавления позволяет использовать эту модель для нахождения «эффективных» значений характеристической температуры неэквивалентных химических связей [13].

При этом константа  $c$  определялась из зависимостей, связанных с  $T_{пл}$ . Учитывая, что селен, при температуре 453 K становится хрупким, что свидетельствует о начале полиморфных превращений, оценка температурного интервала проводилась так, чтобы этот интервал охватывал всевозможные полиморфные превращения. Численные значения характеристических температур, вычисленных исходя из этих предположений, даны в табл. 3.

Как следует из приведенных данных, полиморфные превращения селена происходят не только при 453 K, но и при иных значениях температур, что приводит к изменениям химической связи, кристаллической структуры и соответственно его физических свойств.

### Выводы

Проведены комплексные исследования динамики формирования химической связи кристаллов селена:

— построена молекулярная модель селена и приведена схема описания составляющих его химических связей;

— установлено наличие 5-ти семейств неэквивалентных гибридных орбиталей;

— создана математическая модель, позволяющая провести расчеты основных характеристик селена — силовых постоянных микроскопической теории, характеристических частот и соответствующих им характери-

стических температур, обусловленных тонкой структурой плавления и кристаллизации, а также полиморфными превращениями селена, ведущим к реальной возможности выбора ряда технологических решений получения новых материалов с заданными свойствами.

### Список литературы

1. Энциклопедия неорганических материалов. Т.2 Киев: Главная редакция Украинской советской энциклопедии. 1977. — 819 с.
2. Дриц Н. Е. Свойства элементов. М.: Металлургия, 1985. — 672 с.
3. Баранский П. И., Ключков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. Справочник. К.: Наукова думка, 1975. — 704 с.
4. Григорович В. К. Металлическая связь и структура металлов. М.: Наука, 1988. — 296 с.
5. Горелик С.С., Дашевский М. Я. Материаловедение полупроводников и диэлектриков. М.: «Мисис», 2003. — 480 с.
6. Сайто К. и др. Химия и периодическая таблица. М.: Мир, 1982. — 320 с.
7. Маник О. М. Багатофакторний підхід в теоретичному матеріалознавстві. Чернівці: Прут, 1999. — 432 с.
8. Хохитрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. М.: Мир, 1968. — 384 с.
9. Уббелюде А. Р. Расплавленное состояние вещества. М.: Металлургия, 1982. — 376 с.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. — 248 с.
11. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М. — Л.: Госиздат, 1963. — 312 с.
12. Ащеулов А. А., Гуцул И. В., Маник О. Н., Маник Т. О. Особенности оптимизации материалов на основе CdSb // Сенсорная электроника и микросистемные технологии. — 2010. — Т.1, № 7. — С.64–70.
13. Ащеулов А. А., Гуцул И. В., Маник О. Н., Маник Т. О., Маренкин С. Ф. Химическая связь в низкосимметричных кристаллах CdSb, ZnSb,  $Cd_xZn_{1-x}Sb$  и особенности их технологии // Неорганические материалы. — 2010. — Т.46, № 6. — С.649–655.