

представляются интересными и стимулируют проведение дальнейших исследований магнитоупругого поведения данной системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований (№ 94-02-05231).

### Список литературы

- [1] Звездин А.К., Матвеев В.М., Мухин А.А., Попов А.И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М. (1985). 294 с.
- [2] Kazei Z.A., Kolmakova N.P., Levitin R.Z., Mill B.V., Moshchalkov V.V., Orlov V.N., Snegirev V.V., Zoubkova J. J. Magn. Magn. Mater., **86**, 124 (1990).
- [3] Пауков И.В. Автореф. канд. дисс. Троицк (1994). 18 с.
- [4] Зоубкова Я., Крынецкий И.Б., Левитан Р.З., Орлов В.Н., Снегирев В.В. ФТТ **34**, 1371 (1992).
- [5] Del Moral A., Ibarra M.R., Algarabel P.A., Arnaudus J.I. Physica C **161**, 48 (1989).
- [6] Колмакова Н.П., Крынецкий И.Б. ФТТ **35**, 377 (1993).

УДК 539.32

© Физика твердого тела, том 37, № 7, 1995  
Solid State Physics, vol. 37, N 7, 1995

## УПРУГИЕ СВОЙСТВА ПОЛИТИПОВ КАРБИДА КРЕМНИЯ

*С.Ю. Давыдов, С.К. Тихонов*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
194021, Санкт-Петербург, Россия  
(Поступило в Редакцию 20 декабря 1994 г.)

Карбид кремния существует в виде более чем 250 политипов, отличающихся упаковкой слоев вдоль  $C$ -оси. Единственный кубический политип —  $\beta$ -SiC (или  $3C$ -SiC), имеющий структуру цинковой обманки ( $ZB$ ). Гексагональная (вюрцитная —  $W$ ) структура также существует в чистом виде и обозначается  $2H$ -SiC. Остальные гексагональные и ромбоэдрические политипы образуются комбинациями этих двух структур, их коллективно обозначают как  $\alpha$ -SiC [1].

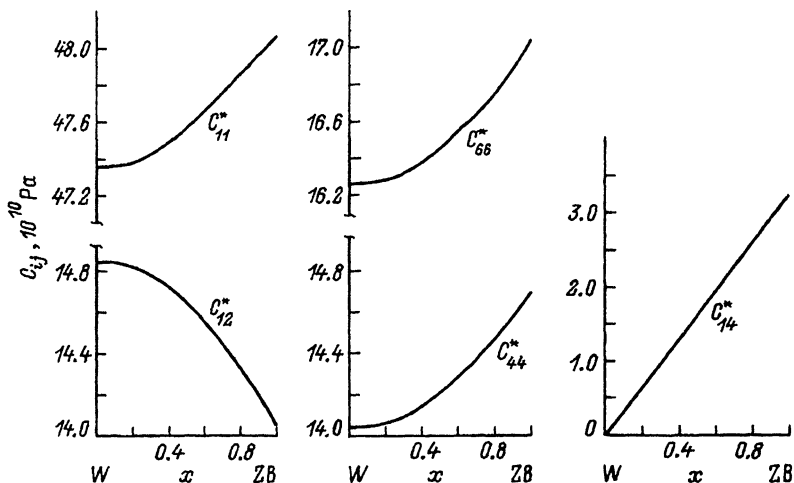
В последнее время возрос интерес к карбиду кремния как к материалу, используемому в микромеханике [2,3]. Поэтому представляет интерес исследовать, как упругие свойства политипов зависят от соотношения структур  $W/ZB$ , что в принципе позволит целенаправленно варьировать упругие характеристики материала.

Теория, позволяющая описать изменение упругих постоянных  $C_{ij}^*$  кристаллов смешанной вюрцитно-сфалеритной структуры, была развита в [4], а в работах [5,6] была обобщена на упругие податливости  $S_{ij}^*$ . Для упругих постоянных в [4] были получены следующие выражения:

$$C_{11}^* = \bar{C}_{11} - (1 - x^2)\Delta^2 \bar{C}_s / A,$$

$$C_{12}^* = \bar{C}_{12} + (1 - x^2)\Delta^2 \bar{C}_s / A,$$

$$C_{44}^* = \bar{C}_{44} - (1 - x^2)(\Delta^2 / \bar{C}_s) [1 + x^2 \Delta^2 / A],$$



Зависимости упругих постоянных  $C_{ij}$  политипов карбида кремния от фазового состава вюрцит/сфалерит  $x$ .

$$\begin{aligned}
 C_{66}^* &= \bar{C}_{66} - (1 - x^2)\Delta^2 \bar{C}_s / A, \\
 C_{14}^* &= -x\Delta[1 + (1 - x^2)\Delta^2 / A], \\
 C_{13}^* &= \bar{C}_{13}, \quad C_{33}^* = \bar{C}_{33}, \\
 \bar{C}_s &= (\bar{C}_{11} - \bar{C}_{12})/2, \quad A = \bar{C}_{44}\bar{C}_s - x^2\Delta^2.
 \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $x = 1$  описывает сфалеритную структуру,  $x = 0$  — вюрцитную,

$$\bar{C}_{ij} = (C_{ij}^1 + C_{ij}^2)/2, \quad \Delta_{ij} = (C_{ij}^1 - C_{ij}^2)/2, \quad (2)$$

где верхние индексы 1 и 2 относятся к двум стандартным вюрцитным ориентациям. Способ нахождения  $C$  и  $\Delta$  описан в [7], где, однако, формула (15) ошибочна и соответствующая матрица должна иметь вид [4]

$$Q = \frac{1}{3\sqrt{2}} \|1 - 1 - 2\|. \quad (3)$$

Воспользовавшись значениями упругих констант  $\beta$ -SiC, приведенными в [8] ( $C_{11} = 41.05$ ,  $C_{12} = 16.43$  и  $C_{44} = 19.38$  в ед.  $10^{10}$  Па), мы рассчитали зависимости  $C_{ij}^*(x)$  (см. рисунок). Для чисто вюрцитной структуры ( $x = 0$ ) были получены следующие значения (в ед.  $10^{10}$  Па):  $C_{11} = 47.36$ ,  $C_{12} = 14.83$ ,  $C_{44} = 14.02$ ,  $C_{66} = 16.26$ ,  $C_{13} = 11.72$ ,  $C_{33} = 50.48$ . При малых  $x$  константы  $C_{11}^*$ ,  $C_{12}^*$ ,  $C_{66}^*$  и  $C_{44}^*$  меняются как  $1 - x^2$ , а  $C_{14}^* \sim x$ . Хотя изменения упругих констант невелики, определенные их комбинации, отвечающие реакции кристалла на приложенное напряжение, могут быть значительными.

Важной характеристикой упругих свойств кристаллов является температурная зависимость упругих постоянных. Зная зависимость от температуры упругих постоянных карбида кремния для кубической структуры и используя формулы (1), можно найти температурную зависимость упругих постоянных для других политипов. Для селенида

пинка подобный расчет был проведен в [9] и дал хорошее согласие с экспериментом. Нет основания полагать, что в случае карбида кремния ситуация будет иной.

Отметим, что из выражения (1) следует, что комбинации  $C_{11}^* + C_{12}^* = \bar{C}_{11} + \bar{C}_{12}$ ,  $C_{13}^*$  и  $C_{33}^*$  являются инвариантами для всех политипов, т.е. не зависят от  $x$ . Легко показать [4,7], что

$$\begin{aligned} C_{11}^* + C_{12}^* &= 2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})/3, \\ C_{13}^* &= (C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44})/3, \\ C_{33}^* &= (C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})/3, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $C_{ij}$  — упругие постоянные  $ZB$ -структуры. Если ввести температурные производные упругих констант  $\alpha_{ij}^* = \partial C_{ij}^*/\partial T$  и  $\alpha_{ij} = \partial C_{ij}/\partial T$ , то для них могут быть записаны выражения, аналогичные формулам (4).<sup>1</sup> Таким образом, вышеприведенные комбинации упругих постоянных не зависят от соотношения вюрцитной и сфалеритной фаз и одинаково зависят от температуры. Это свойство может быть использовано в приложениях.

Работа выполнена при частичной поддержке министерства обороны США.

#### Список литературы

- [1] Davis R.F. In: Silicon Carbide and Related Materials. Proc. of the Fifth Conf. / Ed. M.G. Spencer. Institute of Physics Conf. Ser. Bristol and Philadelphia (1993). N 137. P. 1.
- [2] Matus L.G., Tong L., Mehregany M. Ibid. P. 185.
- [3] Fekade K., Su Q.M., Spencer M. Ibid. P. 189.
- [4] Губанов А.И., Давыдов С.Ю. ФТТ 17,5, 1463 (1975).
- [5] Даньков И.А., Кобяков И.Б., Давыдов С.Ю. ФТТ 24, 12, 3613 (1982).
- [6] Давыдов С.Ю., Кобяков И.Б. ЖТФ 53, 2, 377 (1983).
- [7] Martin R.M. Phys. Rev. B6, 12, 4546 (1972).
- [8] Никаноров С.П., Кардашов Б.К. Упругость и дислокационная неупругость кристаллов. М. (1985). 250 с.
- [9] Давыдов С.Ю., Марголин В.И. Изв. вузов, 4, 106 (1988).

<sup>1</sup> В [8] в формуле для  $\alpha_{13}^*$  допущена опечатка: в последнем члене вместо  $\alpha_{44}^*$  должно стоять  $2\alpha_{44}^*$ .