

**Исследование структурных изменений в кристалле InAs под давлением,  
возрастающим от нормального до 24 ГПа**

**Джелаухова Мария Сергеевна**

*студентка первого курса магистратуры*

*Южный Федеральный Университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия*

*e-mail: mdjel@rambler.ru*

В настоящее время установлено, что с ростом давления до 24 ГПа кристалл Арсенида Индия (InAs) переходит от структуры цинковой обманки к более плотно упакованным структурам, таким как NaCl (переход осуществляется при давлении 7-9 ГПа) и впоследствии предположительно к  $Srsm$ -структуре (переход при  $\sim 14$  ГПа). Применение рентгенодифракционных методов анализа не позволяет однозначно определить тип кристаллической структуры, свидетельствуя лишь о наличии сильных локальных структурных искажений. Поэтому для анализа таких искажений используется метод рентгеновской спектроскопии поглощения, который позволяет количественно исследовать структурные превращения с ростом давления. Для анализа изменения структуры кристалла InAs с ростом давления используются As K-XAFS спектры кристалла, измеренные под давлениями 11, 17, 19 и 24 ГПа. При каждом из исследуемых давлений данные о межатомных As-In и As-As расстояниях, а также о числе атомов In, координирующих атомы As, определяются с помощью методов Фурье-трансформационного анализа [1]. Применение такого подхода позволило установить характер локальных структурных искажений при каждом из изучаемых давлений, и в частности, определить, что координация атома As с ростом давления меняется следующим образом:

1. При давлении 11 ГПа радиальное распределение шести координирующих атомов In относительно атома As соответствует NaCl-структуре, искаженной согласно модели 1+4+1 (1 атом на  $R_{As-In} = 2.55 \text{ \AA}$ , 4 атома на расстоянии  $R_{As-In} = 2.73 \text{ \AA}$ , 1 атом на  $R_{As-In} = 2.92 \text{ \AA}$ ).
2. При давлении 17, 19, 24 ГПа радиальные распределения атомов In соответствует  $Srsm$ -симметрии, искаженной согласно модели 2 атома In на расстоянии  $\sim 2.54 \text{ \AA}$  и 4 атома In на расстоянии  $\sim 2.72 \text{ \AA}$ .

Установлено, что начиная с давления 19 ГПа, наблюдается приближение 2-х атомов As к координирующим атомам In.

[1] L.Bugaev, J.A.van Bokhoven, A.Sokolenko et al J.Phys.Chem.B, 2005, v.109, 10771-10778.