УДК 532.7354-165.2669.018

# ОБ ОТКЛОНЕНИИ ОТ ПРАВИЛА ВЕГАРДА ПРИ РОСТЕ ДАВЛЕНИЯ В СПЛАВАХ

## © 2020 г. М. Н. Магомедов\*

Институт проблем геотермии ДНЦ Российской академии наук, пр. Шамиля, 39-а, Махачкала, 367030 Россия

\*e-mail: mahmag4@mail.ru Поступила в редакцию 24.05.2019 г. После доработки 14.04.2020 г. Принята к публикации 20.04.2020 г.

Предложен метод расчета параметра решетки для разупорядоченного бинарного сплава замещения, который учитывает давление (*p*) в сплаве. Методика апробирована на сплавах SiGe и CuAu. Показано, что при p = 0 отклонение от правила Вегарда ( $\Delta l$ ) обусловлено разностью в сжимаемостях и удельных объемах чистых кристаллов. С ростом давления величина  $\Delta l$  увеличивается. Расчеты показали, что для SiGe функция  $\Delta l(p)$  переходит в положительную область при  $p_0 = 0.685$  ГПа.

Ключевые слова: параметр решетки, сплав замещения, давление **DOI:** 10.31857/S0002337X20090122

### **ВВЕДЕНИЕ**

В 1921 г. Вегард, изучая параметры решеток (*l*) в твердых растворах изоструктурных веществ, обнаружил, что если температура постоянна, то изменение величины *l* с составом происходит в первом приближении линейно, т.е.

$$l(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_{C})_{Vegard} =$$
  
= (1 - C) l<sub>A</sub> + C l<sub>B</sub> = l<sub>A</sub> + C (l<sub>B</sub> - l<sub>A</sub>), (1)

где  $l_{\rm A}$  — параметр решетки растворителя,  $l_{\rm B}$  — параметр решетки растворенного элемента, C — атомная концентрация растворенного элемента.

Выражение (1) получило название правила Вегарда. И хотя оно математически противоречит правилу аддитивности молекулярных объемов химически не реагирующих веществ, все же широко используется для изучения смесей различных веществ. Однако даже для сплавов замещения (например, для CuAu или SiGe) в большинстве случаев наблюдается отклонение от правила Вегарда (1) (так же, как и от правила аддитивности молекулярных объемов), характеризуемое величиной

$$\Delta l(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_C) = l(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_C) - l(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_C)_{Vegard}.$$
 (2)

Причем это отклонение может быть как положительным (например, для CuAu), так и отрицательным (например, для SiGe) [1–3]. Несмотря на то что было предложено много теоретических моделей для описания зависимости величины  $\Delta l$ от концентрации растворенного компонента (*C*), природа этой зависимости до конца не ясна даже для бинарных неупорядоченных сплавов замещения [3]. Кроме того, до сих пор не изучено изменение величины  $\Delta l$  с ростом давления (*p*) в твердом растворе.

В данной работе предложен один из возможных вариантов зависимости  $\Delta l(p)$  и показано, как эту зависимость можно использовать для оценки давления в сплаве замещения.

### МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Рассмотрим сплав двух изоструктурных веществ A и B, которые образуют при смешении твердый раствор замещения. Для изучения зависимости l(C) используем приближение "взаимодействия только ближайших соседей", которое также называют "квазихимическим приближением". Пусть  $P_A$  и  $P_B$  – вероятности нахождения в узле смешанной решетки атомов сорта A и B соответственно. Тогда для вероятности одновременного нахождения в соседних узлах решетки атомов одного сорта и атомов разных сортов можно при-

нять:  $P_{AA} = P_A^2$ ,  $P_{BB} = P_B^2$  и  $P_{AB} = 2P_AP_B$ . Число парных связей для пар атомов одного сорта и для пар разных атомов равно:

$$N_{\rm AA} = (k_n/2)NP_{\rm A}^2, \ N_{\rm BB} = (k_n/2)NP_{\rm B}^2,$$
  
 $N_{\rm AB} = k_nNP_{\rm A}P_{\rm B},$ 

где  $N = N_{\rm A} + N_{\rm B}$  – общее число атомов в сплаве,  $k_n$  – первое координационное число, т.е. число ближайших к данному атому узлов решетки. Тогда, учитывая, что общее число всех парных связей в сплаве равно:  $NN = (k_n/2)N$ , для среднего значения параметра решетки сплава можно получить выражение

$$l(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_{C}) = P_{A}^{2}l_{A} + P_{B}^{2}l_{B} + 2P_{A}P_{B}l_{AB},$$
 (3)

где  $l_{AB}$  — параметр решетки, в которой с равной вероятностью можно найти атом А или В из однородно распределенных по решетке атомов обеих сортов, с учетом релаксации такой решетки к минимуму энергии.

При внесении атомов одного сорта в решетку из атомов другого сорта объем общей решетки релаксирует так, чтобы достигался минимум свободной энергии. Поэтому разложим удельную (на атом своей подрешетки) свободную энергию для каждой из подрешеток в ряд по степеням отклонения удельного объема:  $\Delta V_i = V_{AB} - V_{i0}$  при постоянной температуре (*T*) и ограничимся квадратичными членами ряда:

$$F(\mathbf{A}) = F(\mathbf{A})_{0} + \left(\frac{\partial F(\mathbf{A})}{\partial V}\right)_{T,V_{A}} \Delta V_{A} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} F(\mathbf{A})}{\partial V^{2}}\right)_{T,V_{A}} (\Delta V_{A})^{2},$$
  

$$F(\mathbf{B}) = F(\mathbf{B})_{0} + \left(\frac{\partial F(\mathbf{B})}{\partial V}\right)_{T,V_{B}} \Delta V_{B} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^{2} F(\mathbf{B})}{\partial V^{2}}\right)_{T,V_{B}} (\Delta V_{B})^{2}.$$

Таким образом, добавочная удельная свободная энергия решетки, в которой с равной вероятностью можно обнаружить атом любого сорта (т.е. при  $P_A = P_A = 0.5$ ) будет равна:

$$\Delta F_{AB} = -p(\Delta V_A + \Delta V_B) + \frac{1}{2} \left[ \frac{B_A}{V_A} (\Delta V_A)^2 + \frac{B_B}{V_B} (\Delta V_B)^2 \right],$$
(4)

где  $p = -(\partial F(A)/\partial V)_T = -(\partial F(B)/\partial V)_T -$  давление, которое при термодинамическом равновесии одинаково для обеих решеток,  $B_i = V_i (\partial^2 F(i)/\partial V^2)_T =$ =  $-V_i (\partial P/\partial V_i)_T -$  изотермический модуль упругости для *i*-й решетки.

Так как рассматриваемый твердый раствор замещения находится в термодинамическом равновесии, его термодинамический потенциал минимален. Поскольку твердый раствор  $Si_{0.5}Ge_{0.5}$  не имеет полиморфных переходов, будем считать, так же как авторы работ [1–3], что в однородном состоянии он является упорядоченным.

Тогда из условия минимума функции (4)  $(\partial \Delta F_{AB}/\partial V_{AB})_{T,p} = 0$  можно получить выражение для удельного объема смешанной решетки, где с

равной вероятностью обнаруживаются атомы разных сортов, которая находится под давлением:

$$V_{\rm AB} = \frac{V_{\rm A} + C_N V_{\rm B}}{1 + C_N} + 2 \frac{p V_{\rm A}}{B_{\rm A} (1 + C_N)},\tag{5}$$

где введена функция, учитывающая разницу в сжимаемостях чистых компонентов:

$$C_N = \frac{B_{\rm B}}{B_{\rm A}} \frac{V_{\rm A}}{V_{\rm B}}.$$
 (6)

Так как для твердого раствора замещения исходные и смешанная решетки имеют одинаковую структуру, то из (5) можно получить выражение для величины параметра решетки эквиатомного состава:

$$l_{\rm AB} = \left[\frac{l_{\rm A}^{3} + C_{\rm N} l_{\rm B}^{3}}{1 + C_{\rm N}} + 2\frac{p l_{\rm A}^{3}}{B_{\rm A}(1 + C_{\rm N})}\right]^{1/3}.$$
 (7)

Заметим, что если изначально полагать p = 0, рассматривать одномерную модель и считать концентрацию атомов произвольной, то вместо формулы (7) аналогичным путем можно получить формулу, полученную *G. Fournet* [1], которая имеет вид:

$$l(\mathbf{A}_{(1-C)}\mathbf{B}_{C}) = \frac{(1-C)l_{A} + Cl_{B}C_{F}}{1-C + CC_{F}}.$$
(8)

Но здесь функция  $C_F$  будет отличаться от функции  $C_N$  из (6):

$$C_F = \frac{B_{\rm B}}{B_{\rm A}} \frac{l_{\rm B}}{l_{\rm A}}.$$
(9)

При p = 0 и C = 0.5 для одномерного случая формулы (7) и (8) совпадают, но значения  $C_F$  и  $C_N$  существенно различаются.

Входящие в уравнение (3) функции  $P_A$  и  $P_B = 1 - P_A$  определим как геометрические вероятности того, что точка, случайно поставленная на линию длиной  $(1 - C)l_A + Cl_B$ , попадет на отрезки  $l_A$  или  $l_B$  соответственно:

$$P_{\rm A} = \frac{(1-C)l_{\rm A}}{(1-C)l_{\rm A}+Cl_{\rm B}}, \ P_{\rm B} = \frac{Cl_{\rm B}}{(1-C)l_{\rm A}+Cl_{\rm B}}.$$
 (10)

Подставляя функции (7) и (10) в формулу (3), получаем выражение, с помощью которого можно рассчитать зависимость параметра решетки сплава исходя из характеристик чистых компонентов. Из (3) также можно получить выражение для расчета коэффициента теплового расширения бинарного сплава в виде:

$$\alpha(\mathbf{A}_{1-C}\mathbf{B}_{C}) = 3\left(\frac{\partial \ln l}{\partial T}\right)_{P} = \frac{P_{\mathbf{A}}^{2}\alpha_{\mathbf{A}}l_{\mathbf{A}} + P_{\mathbf{B}}^{2}\alpha_{\mathbf{B}}l_{\mathbf{B}} + 2P_{\mathbf{A}}P_{\mathbf{B}}\alpha_{\mathbf{AB}}l_{\mathbf{AB}}}{P_{\mathbf{A}}^{2}l_{\mathbf{A}} + P_{\mathbf{B}}^{2}l_{\mathbf{B}} + 2P_{\mathbf{A}}P_{\mathbf{B}}l_{\mathbf{AB}}}.$$
(11)

НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ том 56 № 9 2020

Здесь  $\alpha_i$  и  $\alpha_{AB}$  – коэффициенты теплового расширения для *i*-го компонента и для решетки с равным числом атомов. В соответствии с (5), при p = 0 фукция  $\alpha_{AB}$  имеет вид:

$$\alpha_{AB} = \left(\frac{\partial \ln V_{AB}}{\partial T}\right)_{p} =$$

$$= \frac{1}{1 + C_{N}} [\alpha_{A} + C_{N} \alpha_{B} + (\beta_{B} - \beta_{A}) F_{AB}], \qquad (12)$$

где введены обозначения:

$$\alpha_{i} = \left(\frac{\partial \ln V_{i}}{\partial T}\right)_{p}, \quad \beta_{i} = -\left(\frac{\partial \ln B_{i}}{\partial T}\right)_{p},$$
$$F_{AB} = \frac{B_{B}}{(B_{A} + B_{B})} \left(\frac{V_{A}}{V_{B}} - 1\right).$$

Отметим, что в литературе отсутствуют какиелибо сведения о расчете (аналитическом либо численном) коэффициента теплового расширения твердого раствора, кроме формулы, которая следует из правила Вегарда (1).

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для проверки предложенной методики была рассчитана зависимость параметра решетки для сплава SiGe, имеющего структуру алмаза (сфалерита). Входящие в формулы параметры чистых решеток при T = 300 К и p = 0 брали в виде:

$$l_{\rm Si} = 5.431$$
 и  $l_{\rm Ge} = 5.6575 \left[ 10^{-10} \text{ м} \right] [2],$   
 $B_{\rm Si} = 97.7$  и  $B_{\rm Ge} = 74.9 [\Gamma\Pi a] [4].$ 

Тогда из (6) и (7) получим:  $C_N = 0.678192$  и  $l_{\rm SiGe} = 5.52478 \ [10^{-10} \ {\rm M}].$ 

На рис. 1 показано изменение параметра решетки сплава SiGe в зависимости от концентрации Ge. Точки – это экспериментальные данные из [2], которые были определены при T = 300 K с точностью  $\pm 0.0005$  [ $10^{-10}$  м]. Эти данные были аппроксимированы в [2] квадратичной зависимостью вида

$$l/[10^{-10} \text{ m}] = 5.431 + 0.1992C + 0.02733C^2.$$
 (13)

Наши расчеты при p = 0 практически совпадают с линией (13). Лежащая выше зависимости (13) пунктирная прямая — это расчет по правилу Вегарда:

$$l_{Vegard} / [10^{-10} \text{ M}] = 5.431(1-C) + + 5.6575C = 5.431 + 0.2265C.$$
(14)

Пунктирная кривая, которая лежит ниже экспериментальных данных и зависимости (11), рассчитана по формуле *G. Fournet* (8) с величиной  $C_F$ из формулы (9).

НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ том 56 № 9



**Рис. 1.** Зависимости параметра решетки сплава SiGe от концентрации германия: точки — экспериментальные данные из [2], лежащая выше экспериментальных данных пунктирная прямая — расчет по правилу Вегарда (14), пунктирная кривая, которая лежит ниже экспериментальных данных, рассчитана по формуле (8).

На рис. 2 показано изменение величины отклонения параметра решетки от зависимости, рассчитанной по правилу Вегарда (14):  $\Delta l = l - l_{Vegard}$ . Точки – это экспериментальные данные из [2]. Сплошная кривая 1 – это разница между зависимостями (13) и (14), точечная кривая 2-отклонение расчетов от зависимости (14) при p = 0, пунктирная кривая 3 - разница межлу зависимостью (8) и правилом Вегарда (14), точечная кривая 4 -отклонение расчетов от зависимости, рассчитываемой по правилу Вегарда при p = 0.5 ГПа. Из рис. 1 и 2 видно, что расчеты при p = 0 хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными при этом же давлении. Отметим, что расчеты методом функционала плотности, проведенные в работе [3] при p = 0, показали плохое согласие с экспериментальными данными из [2]. Значение  $|\Delta l(C)|$  в точке максимума, т.е. при C(Ge) = 0.5, B[3] получилось очень большим:  $\Delta l(C = 0.5) = -0.09$ , в то время как в [2] было получено  $\Delta l(C = 0.5) = -0.0069 \pm 0.0005$ , а в наших расчетах  $\Delta l(C = 0.5) = -0.0074 [10^{-10} \text{ M}].$ 

Для изучения барической зависимости функции  $\Delta l = l - l_{Vegard}$  были использованы следующие выражения для изменения параметра решетки и модуля упругости чистых веществ при изотермическом изменении давления:

$$l_{i}(p) = l_{i}(0) \left[ 1 + B'(p)_{i} \frac{p}{B_{i}(0)} \right]^{-1/[3B'(p)_{i}]}, \qquad (15)$$
$$B_{i}(p) = B_{i}(0) + B'(p)_{i}p.$$

Здесь  $B'(p)_i = \partial B_i / \partial p$  — производная модуля упругости по давлению для *i*-решетки. Значения этого параметра для чистых решеток брали из [4]:

2020



**Рис. 2.** Изменение величины отклонения параметра решетки от зависимости, рассчитанной по правилу Вегарда, при изменении концентрации германия в сплаве SiGe: точки и сплошная кривая 1 -экспериментальные зависимости, точечная кривая 2 -расчеты при p = 0, пунктирная кривая 3 -разница между зависимостью (8) и правилом Вегарда (14), точечная кривая 4 -расчеты при p = 0.5 ГПа.



Рис. 3. Зависимости параметра решетки ГЦК-сплава СиАи от концентрации золота: экспериментальная зависимость (17) показана сплошной выпуклой линией, нижняя пунктирная прямая – расчет по правилу Вегарда (18), лежащая выше (17) пунктирная кривая – расчет по формуле (8), рассчитанная нами при p = 0 зависимость показана точечной кривой, лежащей между экспериментальной сплошной кривой и пунктирной прямой, полученной по правилу Вегарда (18).

$$B'(P)_{Si} = 4.16 \pm 0.07$$
 и  $B'(P)_{Ge} = 4.35 \pm 0.06$ .

Таким образом, с использованием (15) было рассчитано изменение функции  $\Delta l(C)$  при различных давлениях. Расчеты показали, что барическая зависимость функции  $\Delta l(C) = l - l_{Vegard}$  в точке максимума, т.е. при C(Ge) = 0.5, с коэффициентом корреляции  $R_{cor} = 0.99967$  аппроксимируется линейной зависимостью следующего вида:

$$\Delta l (C = 0.5) / [10^{-10} \text{ m}] =$$
  
= -0.00734 + 0.01071p/[[[]a]. (16)

Из (16) видно, что при увеличении давления отрицательное отклонение от правила Вегарда для сплава SiGe уменьшается, и выше определенного давления ( $p_0 = 0.685 \ \Gamma \Pi a$ ) величина  $\Delta l(C = 0.5)$  переходит в положительную область. Из (16) также следует, что наше значение  $\Delta l(C = 0.5)$  совпадет с экспериментальным, если допустить, что экспериментально созданный сплав SiGe находился под давлением  $p_s = 0.04 \ \Gamma \Pi a$ . Но если учесть точность измерения величин  $\Delta l$ ,  $B_i$  и  $B'(p)_i$ , то значение  $p_s$  может быть значительно меньше.

Для непрерывного разупорядоченного твердого раствора СиАи с гранецентрированной кубической (**ГЦК**) структурой входящие в формулы параметры чистых решеток при T = 300 К и p = 0брали в виде:

$$l_{\rm Cu} = 3.6149$$
 и  $l_{\rm Au} = 4.0784 \ [10^{-10}$  м] из [5],  
 $B_{\rm Cu} = 133$  и  $B_{\rm Au} = 167 \ [\Gamma\Pi a]$  из [6].

Тогда из (6) и (7) получим  $C_N = 0.874348$ ,  $l_{CuAu} = 3.84506 [10^{-10} \text{ м}]$ .

На рис. 3 показано изменение параметра решетки ГЦК-сплава СиАи в зависимости от концентрации золота. Экспериментально данная зависимость изучалась многими авторами, ссылки на которых даны в обзоре [5]. Эти данные в [5] были аппроксимированы квадратичной зависимостью вида

$$l/[10^{-10} \text{ M}] = 3.6149(1-C) + 4.0784C + 0.11984(1-C)C.$$
 (17)

Зависимость (17) показана на рис. 3 сплошной выпуклой линией. Проходящая снизу пунктирная прямая — это результат расчета по правилу Вегарда:

$$l_{Vegard} / [10^{-10} \text{ M}] = 3.6149(1-C) + + 4.0784C = 3.6149 + 0.4635C.$$
 (18)

Наши расчеты при p = 0 показаны точечной выпуклой кривой, лежащей между линиями из (17) и (18). Проходящая сверху пунктирная кривая рассчитана по формуле (8).

Из рис. 3 видно, что рассчитанная по предложенной методике зависимость l(C) при p = 0 лежит ниже экспериментальной кривой. При использовании выражения (15), а также значений из [6]  $B'(p)_{Cu} = 5.4 \pm 0.2$  и  $B'(p)_{Au} = 6.2 \pm 0.2$  было получено, что наша кривая совпадет с экспериментальной, если допустить, что изучаемый в экспериментах ГЦК-сплав Cu<sub>1 – C</sub>Au<sub>C</sub> находился под давлением  $p_s = 5$  ГПа. Реально ли это?

Экспериментально разупорядоченный твердый раствор СиАи получают путем быстрого охлаждения (т.е. закалки) закристаллизовавшегося сплава из высокотемпературной области 900-1100 К. Это позволяет как сохранить однородность состава, так и избежать фазового перехода (при температуре Курнакова) разупорядоченного твердого раствора в упорядоченное состояние, которое имеет другую структуру и свойства [5]. Легко понять, что такая технология может привести к заметным остаточным закалочным напряжениям в изучаемом при комнатных температурах сплаве. Поэтому значение  $p_s = 5$  ГПа можно считать вполне реальным. Хотя, если учесть точность измерения входящих в формулы величин, эта оценка может быть значительно меньше.

Для расчета коэффициента теплового расширения сплава SiGe входящие в формулы (11) и (12) параметры чистых решеток при T = 300 К и p = 0брали из работы [7] в виде:  $\alpha_{Si} = 7.72$  и  $\alpha_{Ge} = 17.1$ [ $10^{-6}$  K<sup>-1</sup>].

Тогда, полагая  $\beta_{Si} = \beta_{Ge}$ , из (12) получим  $\alpha_{SiGe} = 11.5107 [10^{-6} \text{ K}^{-1}].$ 

На рис. 4 представлено изменение коэффициента теплового расширения сплава SiGe в зависимости от концентрации Ge. Экспериментальные данные из [8] показаны точками и сплошной линией. Пунктирная прямая — расчет по формуле, которая следует из (1):

$$\alpha_{Vegard} = (1 - C)\alpha_{Si} + C\alpha_{Ge}.$$
 (19)

Лежащая ниже зависимости (19) вогнутая точечная линия — это результат расчета по формуле (11). Легко видеть, что наш расчет правильно передает отрицательное отклонение от зависимости (19). К сожалению, в литературе нет более свежих экспериментальных данных зависимости  $\alpha(C)$  для разупорядоченного твердого раствора SiGe, чем оценки из [8], полученные в 1967 г., которые, однако, отклоняются от данных для чистых компонентов из [7].

Исследования последних лет [9–11] показали, что значения  $\alpha$ (SiGe) даже при 300 К имеют большой разброс и зависят от многих факторов: от типа проводимости образца (*n*- или *p*-тип), от условий – при нагреве или при охлаждении проводились измерения, от состояния структуры: наноструктурирование образца увеличивает  $\alpha$ . Поэтому известные из литературы экспериментальные данные для зависимости  $\alpha(C)$  сильно различаются. Например:

$$\alpha(C = 0.2) / [10^{-6} \text{ K}^{-1}] = 10.5 [10];$$
  
12.57 [2]; 23.1 ± 0.45 [11].

Поэтому полученную зависимость  $\alpha(C)$  можно также использовать для выделения вклада электронной подсистемы или вклада наноструктури-



**Рис. 4.** Зависимости коэффициента теплового расширения сплава SiGe от концентрации Ge: экспериментальные данные из [8] показаны точками и сплошной линией, пунктирная прямая — расчет по формуле (19), точечная линия — результат расчета по формуле (11).

рования в величину коэффициента теплового расширения. Отметим также, что предложенный метод изучения зависимости параметра решетки сплава SiGe от концентрации был успешно применен для расчета как температуры Дебая, так и фазовой диаграммы данного твердого раствора в [12]. Кроме этого, данный метод был применен при расчете термодинамических свойств твердого раствора Si<sub>0.5</sub>Ge<sub>0.5</sub> как в макро-, так и в наноструктурном состоянии в [13].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены выражения для расчета параметра решетки и коэффициента теплового расширения твердого раствора замещения, которые учитывают наличие давления в растворе.

Показано, что при p = 0 отклонение от правила Вегарда ( $\Delta l$ ) обусловлено разностью в сжимаемостях и удельных объемах чистых кристаллов. При изотермическом росте давления  $\Delta l$  увеличивается для сплавов как с отрицательным, так и с положительным отклонением от зависимости, полученной по правилу Вегарда. Поэтому по величине  $\Delta l$ можно оценить напряжения в исследуемом разупорядоченном твердом растворе замещения.

Расчеты показали, что разупорядоченный твердый раствор CuAu имеет заметные остаточные напряжения после закалки из высокотемпературной области. Коэффициент теплового расширения твердого раствора замещения SiGe отклоняется в отрицательную сторону от зависимости, которая следует из правила Вегарда.

### БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор благодарит С.П. Крамынина, Н.Ш. Газанову и З.М. Сурхаеву за помощь в работе и полезные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-11013\_мк и Программы Президиума РАН (программа № 6, грант 2-13).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Fournet G*. Étude de la loi de Vegard // J. Phys. Radium. 1953. V. 14. № 6. P. 374–380. https://doi.org/10.1051/jphysrad:01953001406037400
- 2. Dismukes J.P., Ekstrom L., Paff R.J. Lattice Parameter and Density in Germanium-Silicon Alloys // J. Phys. Chem. 1964. V. 68. № 10. P. 3021–3027. https://doi.org/10.1021/j100792a049
- Pulikkotil J.J., Chroneos A., Schwingenschlögl U. Structure of Sn<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> Random Alloys as Obtained from the Coherent Potential Approximation // J. Appl. Phys. 2011. V. 110. № 3. P. 036105(1–5). https://doi.org/10.1063/1.3618671
- 4. *Магомедов М.Н.* О природе ковалентной связи в кристаллах подгруппы углерода // Журн. неорган. химии. 2004. Т. 49. № 12. С. 2057–2067.
- Okamoto H., Chakrabarti D.J., Laughlin D.E., Massalski T.B. The Au-Cu (Gold-Copper) System // Bull. Alloy Phase Diagr. 1987. V. 8. № 5. P. 454–473. https://doi.org/10.1007/BF02893155
- 6. *Holzapfel W.B.* Progress in the Realization of a Practical Pressure Scale for the Range 1–300 GPa // High Press.

Res. 2005. V. 25. № 2. P. 87–96. https://doi.org/10.1080/09511920500147501

- 7. Станкус С.В., Хайрулин Р.А., Тягельский П.В. Термические свойства германия и кремния в конденсированном состоянии // Теплофизика высоких температур. 1999. Т. 37. № 4. С. 559–564.
- Электронная база данных: http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/SiGe/thermal.html
- Amano T., Beaudry B., Gschneidner K., Jr., Hartman R., Vining C., Alexander C. High-Temperature Heat Contents, Thermal Diffusivities, Densities, and Thermal Conductivities of *n*-Type SiGe (GaP), *p*-Type SiGe (GaP), and *p*-type SiGe Alloys // J. Appl. Phys. 1987. V. 62. № 3. P. 819–823. https://doi.org/10.1063/1.339712
- 10. Ravi V., Firdosy S., Caillat T., Brandon E., Van Der Walde K., Maricic L., Sayir A. Thermal Expansion Studies of Selected High-Temperature Thermoelectric Materials // J. Electron. Mater. 2009. V. 38. № 7. P. 1433–1442. https://doi.org/10.1007/s11664-009-0734-2
- Pavlova L., Shtern Y., Kirilenko E. Thermal Expansion of Bulk Nanostructured *n*-Type SiGe Nanocomposite from 300 to 1400 K // J. Mater. Sci. 2017. V. 52. № 2. P. 921–934. https://doi.org/10.1007/s10853-016-0387-5
- 12. *Магомедов М.Н.* О вычислении температуры Дебая и температуры фазового перехода кристалл-жид-кость для бинарного сплава замещения // Физика твердого тела. 2018. Т. 60. № 5. С. 970–977. https://doi.org/10.21883/FTT.2018.05.45797.251
- 13. *Магомедов М.Н.* Изменение термодинамических свойств твердого раствора Si–Ge при уменьшении размера нанокристалла // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. № 11. С. 2169–2177. https://doi.org/10.21883/FTT.2019.11.48424.484