

ВЛИЯНИЕ ИНТЕРКАЛАЦИИ ХРОМА НА СТРУКТУРУ И ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ДИСЕЛЕНИДА НИОБИЯ

Топорова Н.М., Шерокалова Е.М., Баранов Н.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В настоящее время значительный интерес представляет исследование материалов со слоистой структурой, таких как дихалькогениды переходных металлов TX_2 (Т - металл, Х - халькоген), которые представляют собой упаковки трехслойных блоков Х–Т–Х. Характерной особенностью этих соединений является слабая связь между блоками, что допускает интеркаляцию (внедрение) различных атомов в межблочное пространство. В случае интеркаляции атомов, обладающих магнитным моментом, в интеркалированных соединениях M_xTX_2 в зависимости от концентрации и сорта M атомов может наблюдаться широкий спектр магнитных состояний от спинового и кластерного стекла до антиферромагнетизма или ферромагнетизма.

Представляемая работа посвящена изучению влияния интеркаляции хрома на структуру и тепловые свойства диселенида ниобия.

В данной работе в качестве исследуемых материалов использовались поликристаллические образцы, которые представляют собой спеченные прессы мелкозернистых порошков. Синтез соединений Cr_xNbSe_2 ($x = 0, 0.1, 0.33$) был проведен по одно- и двухстадийной методике твердофазных реакций в вакуумированных кварцевых ампулах при температуре 800 °С в течение 120 часов. Далее производилась рентгенографическая аттестация на дифрактометре Bruker D8 Advance с целью изучения кристаллической структуры полученных образцов. После аттестации и уточнения кристаллографических параметров были проведены измерения теплоемкости на установке DynaCool 9T.

В работе установлено, что структура соединения NbSe_2 принадлежит пространственной группе $R\bar{6}_3/mmc$ и обладает следующими параметрами элементарной ячейки: $a = 3.441 \text{ \AA}$, $c = 12.534 \text{ \AA}$. Рентгеновская аттестация соединений Cr_xNbSe_2 ($x = 0.1, 0.33$) показала, что полученные соединения являются однофазными и могут быть использованы для дальнейшего изучения тепловых свойств. Так, например, соединение $\text{Cr}_{0.33}\text{NbSe}_2$ имеет пространственную группу $R\bar{6}_322$ и следующие кристаллографические параметры: $a = 5.979 \text{ \AA}$, $c = 12.686 \text{ \AA}$.

Как следует из исследования тепловых свойств для полученных образцов, интеркаляция хрома приводит к росту температуры Дебая, что указывает на увеличение жесткости решетки. В случае соединения $\text{Cr}_{0.1}\text{NbSe}_2$, обладающего магнитным состоянием типа спинового стекла, выявлен дополнительный линейный по температуре вклад в низкотемпературную теплоемкость. Как следует из анализа низкотемпературной теплоемкости, интеркаляция атомов хрома не привела к заметному изменению коэффициента электронной теплоемкости, а, следовательно, плотности электронных состояний на уровне Ферми по сравнению с исходным соединением NbSe_2 .