

ТЕРМИЧЕСКИЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИСТЕМЕ Cu_xZrSe_2

*Постников М.С.^(1,2), Шкварин А.С.⁽¹⁾, Титов А.А.⁽¹⁾,
Шкварина Е.Г.⁽¹⁾, Титов А.Н.^(1,2)*

⁽¹⁾ Институт физики металлов УрО РАН
620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18

⁽²⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Слоистые дихалькогениды переходных металлов представляют собой последовательность двумерных слоев с интересными свойствами в зависимости от типа переходного металла и халькогена. Атомы внутри слоя связаны более сильно, чем эти слои между собой, что дает возможность обратимого внедрения различных атомов или молекул в межслоевое пространство (интеркаляции). Система Cu_xZrSe_2 была выбрана потому, что медь очень подвижна, а это дает возможность производить интеркаляцию при температурах вплоть до комнатной.

Известно, что при интеркаливании меди в ZrSe_2 происходит повышение уровня ферми вплоть до выхода его в зону проводимости, так же предполагается, что происходит переход из полупроводникового в металлическое состояние [1]. А это в свою очередь возбуждает интерес к данной системе с точки зрения оптических свойств, для которых необходимы монокристаллы. Так как в данной системе возможны фазовые переходы, то остается открытым вопрос о возможности выращивания кристаллов Cu_xZrSe_2 . В рамках данной работы была поставлена задача изучить фазовую диаграмму при нагреве *in situ* системы Cu_xZrSe_2 . Синтез образцов произведен методом твердофазной реакции.

Эксперимент по изучению фазовых диаграмм при нагреве *in situ* произведен на линии MCX, Elettra Synchrotron. Нагрев произведен от комнатной температуры до 700°C, дифрактограммы снимали при 25–700 (с интервалами 50°C) градусах Цельсия для составов с $x = 0.3; 0.5; 1$. Установлено, что при температурах от 25 до 350°C устойчива фаза с кристаллической решеткой $P\bar{3}m1$. При дальнейшем нагреве наблюдается появление новой фазы, предположительно ромбоэдрической модификации $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$. Дальнейший нагрев приводит к увеличению ее содержания, а при больших концентрациях меди ($x=1$) начинает доминировать кубическая модификация $\text{Cu}_{0.5}\text{ZrSe}_2$.

Впервые исследована фазовая диаграмма системы Cu_xZrSe_2 и обнаружен переход из гексагональной в ромбоэдрическую и кубическую фазу, что, возможно, связано с конкуренцией вкладов конфигурационных энтропий, связанных с заполнением тетраэдрических и октаэдрических позиций

1. Shkvarin A.S., Merentsov A.I., Yarmoshenko Yu.M. et al. // Journal of Physical Chemistry C. 2019. V. 123. P. 410–416.

Работа выполнена в рамках Государственного задания «Спин», г.р. No AAAA-A18-118020290104-2.