

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Cu_xZrSe_2

Постников М.С.^{1,2*}, Шкварин А.С.², Меренцов А.И.¹, Титов А.А.²,
Шкварина Е.Г.², Упоров С.А.³, Титов А.Н.^{1,2}

¹Уральский федеральный университет. г. Екатеринбург, Россия

²Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

³Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mithanya0403@gmail.com

CRYSTAL STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF Cu_xZrSe_2

Postnikov M.S.^{1,2*}, Shkvarin A.S.², Merentsov A.I.¹, Titov A.A.², Shkvarina E.G.²,
Uporov S.A.³, Titov A.N.^{1,2}

¹Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Yekaterinburg, Russia

³IMET UB RAS, Yekaterinburg, Russia

Samples of the Cu_xZrSe_2 system were obtained in the interval $x = 0-0.3$. The properties of the crystal structure and such physical properties as magnetic susceptibility and electrical conductivity were investigated.

Слоистые дихалькогениды переходных металлов являются объектом изучения уже много лет. Система Cu_xZrSe_2 привлекает интерес как аналог системы Cu_xTeSe_2 , в которой наблюдается состояние с волной зарядовой плотности и сверхпроводимость. Синтез образцов Cu_xZrSe_2 (при $0.05 \leq x \leq 0.3$) производился при комнатной температуре твердофазным методом с использованием металлической меди и матрицы ZrSe_2 . Согласно результатам рентгеноструктурного анализа система Cu_xZrSe_2 во всем исследованном интервале индексируется в группе $R\bar{3}m1$, тригональной сингонии. В этом концентрационном интервале в основном заполняются тетраэдрические позиции что говорит о доминировании связи интеркалант-халькоген, в отличие от соединения с титаном, где доминирует связь интеркалант-переходный металл и заполняются исключительно октаэдрические позиции

Как независимый метод изучения локального окружения атомов меди используют метод рентгеновской абсорбционной спектроскопии (XAS). Cu L2.3 спектры для составов $\text{Cu}_{0.1}\text{ZrSe}_2$ и $\text{Cu}_{0.3}\text{ZrSe}_2$ имеют одинаковую форму и энергетическое положение. Для состава $\text{Cu}_{0.2}\text{ZrSe}_2$ происходит изменение формы линии, один из пиков уширяется, меняется соотношение интенсивностей этого пика по отношению к остальным, а также меняется его энергетическое положение. Анализ спектров показал, что это обусловлено вкладом двух типов меди – в окто и тетра окружении, что хорошо согласуется со структурными данными.

Температурная зависимость электропроводности образцов измерена в интервале температур 10–100 К. Вблизи концентрации 0.2 характер зависимости

меняется с активационного на металлический. Это хорошо согласуется с выводом о ковалентном характере химической связи меди с решёткой, сделанном на основе анализа кристаллической структуры. Так же полученная зависимость сопротивления для $ZrSe_2$ хорошо согласуется с литературой данными. [1]

Температурная зависимость магнитной восприимчивости всех составов Cu_xZrSe_2 описывается как восприимчивость паулевского типа, что позволяет рассчитать плотность состояний на уровне Ферми. Падение плотности состояний при интеркаляции меди может быть обеспечено только выходом уровня Ферми в области щели между $Se4p$ -валентной зоной и $Zr4d$ -зоной проводимости

При интеркаляции $ZrSe_2$ медью заполнение окта-позиций в области $0 < x < 0,2$ можно связать с термической активацией меди из тетра-позиций, где атом меди участвует в ковалентной связи с селеном, в окта-позиции, где его связь с решёткой имеет ионный характер. Подтверждением этому является практически линейный рост заполнения окта-позиций.

1. S.G. Patel, M.K. Agarwal, N.M. Batra, et al, Bull. Mater. Sci. 21 213–217 (1998).

УПРАВЛЕНИЕ ШИРИНОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ С ПОМОЩЬЮ ИНТЕРКАЛИРОВАНИЯ МЕДИ В $ZrSe_2$

Постников М.С.^{1,2*}, Шкварин А.С.², Меренцов А.И.¹, Титов А.А.²,
Шкварина Е.Г.², Ярмошенко Ю.М.², Титов А.Н.^{1,2}

¹Уральский федеральный университет. г. Екатеринбург, Россия

² Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: mithanya0403@gmail.com

CONTROL OF THE BAND GAP BY INTERCALATING COPPER IN $ZrSe_2$

Postnikov M.S.^{1,2*}, Shkvarin A.S.², Merentsov A.I.¹, Titov A.A.², Shkvarina E.G.²,
Yarmoshenko Yu.M.², Titov A.N.^{1,2}

¹Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²M.N. Miheev Institute of Metal Physics of Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
Yekaterinburg, Russia

The Cu_xZrSe_2 intercalation single crystals have been synthesized and studied in a concentration range of $x = 0-0.3$, in which the semiconductor-metal transition was observed. The evolution of the electronic structure of Cu_xZrSe_2 as a function of the copper content has been studied experimentally using the XPS and XAS methods.

Кристаллическая структура $ZrSe_2$ образована последовательностью слоёв $Se-Zr-Se$, с сильной ковалентной связью между атомами. Между собой такие слои разделены щелью и связаны слабой связью типа ван-дер-Ваальсовой. $ZrSe_2$ является полупроводником с шириной щели около 0.8 эВ. Дополнительный интерес