

## КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$

Постников М.С.<sup>1,2\*</sup>, Шкварин А.С.<sup>2</sup>, Меренцов А.И.<sup>1</sup>, Титов А.А.<sup>2</sup>,  
Шкварина Е.Г.<sup>2</sup>, Упоров С.А.<sup>3</sup>, Титов А.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет. г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

<sup>3</sup>Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [mithanya0403@gmail.com](mailto:mithanya0403@gmail.com)

### CRYSTAL STRUCTURE AND PHYSICAL PROPERTIES OF $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$

Postnikov M.S.<sup>1,2\*</sup>, Shkvarin A.S.<sup>2</sup>, Merentsov A.I.<sup>1</sup>, Titov A.A.<sup>2</sup>, Shkvarina E.G.<sup>2</sup>,  
Uporov S.A.<sup>3</sup>, Titov A.N.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

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

<sup>3</sup>IMET UB RAS, Yekaterinburg, Russia

Samples of the  $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$  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  $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$  привлекает интерес как аналог системы  $\text{Cu}_x\text{TeSe}_2$ , в которой наблюдается состояние с волной зарядовой плотности и сверхпроводимость. Синтез образцов  $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$  (при  $0.05 \leq x \leq 0.3$ ) производился при комнатной температуре твердофазным методом с использованием металлической меди и матрицы  $\text{ZrSe}_2$ . Согласно результатам рентгеноструктурного анализа система  $\text{Cu}_x\text{ZrSe}_2$  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 окта 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.<sup>1,2\*</sup>, Шкварин А.С.<sup>2</sup>, Меренцов А.И.<sup>1</sup>, Титов А.А.<sup>2</sup>,  
Шкварина Е.Г.<sup>2</sup>, Ярмошенко Ю.М.<sup>2</sup>, Титов А.Н.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уральский федеральный университет. г. Екатеринбург, Россия

<sup>2</sup> Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [mithanya0403@gmail.com](mailto:mithanya0403@gmail.com)

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

Postnikov M.S.<sup>1,2\*</sup>, Shkvarin A.S.<sup>2</sup>, Merentsov A.I.<sup>1</sup>, Titov A.A.<sup>2</sup>, Shkvarina E.G.<sup>2</sup>,  
Yarmoshenko Yu.M.<sup>2</sup>, Titov A.N.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2</sup>M.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