

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ МЕДИ И СЕРЕБРА

Л.В. Цыганкова¹, Н.Н. Биккулова¹, Г.Р. Акманова², А.Р. Курбангулов¹

¹Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа

blv-str@mail.ru

Аннотация

В работе проведены исследования динамики решетки халькогенидов меди и серебра Cu₂Te и Ag₂Te представлены результаты компьютерных расчетов динамики решетки данных соединений полученных с использованием программного пакета Quantum Espresso.

Введение

Изучение механизма ионного переноса в суперионных проводниках на основе детального исследования динамики решетки, кристаллической структуры, электронной зонной структуры представляет интерес, как с практической, так и фундаментальной точки зрения.

Постановка задачи и методика исследования

Исходными материалами для получения халькогенидов меди и серебра служили теллур (марки ХЧ), медь и серебро чистотой 99,99 %. Взвешивание элементов производилось с точностью 0,0001 г, масса навесок составляла примерно 15 г. Синтез проводился прямым спеканием соответствующих эквимольных количеств элементов в кварцевых ампулах, вакуумированных до давления 10⁻³ Па. Полученная шихта растиралась и затем в агатовой ступке отжигалась для гомогенизации. Метод неупругого рассеяния медленных нейтронов позволяет получить экспериментальные данные по динамике ионной решетки. Эксперименты по неупругому рассеянию нейтронов проводились на двойном времяпролетном спектрометре прямой геометрии ДИН-2ПИ в Лаборатории Нейтронной Физики им. И.М. Франка ОИЯИ (г. Дубна).

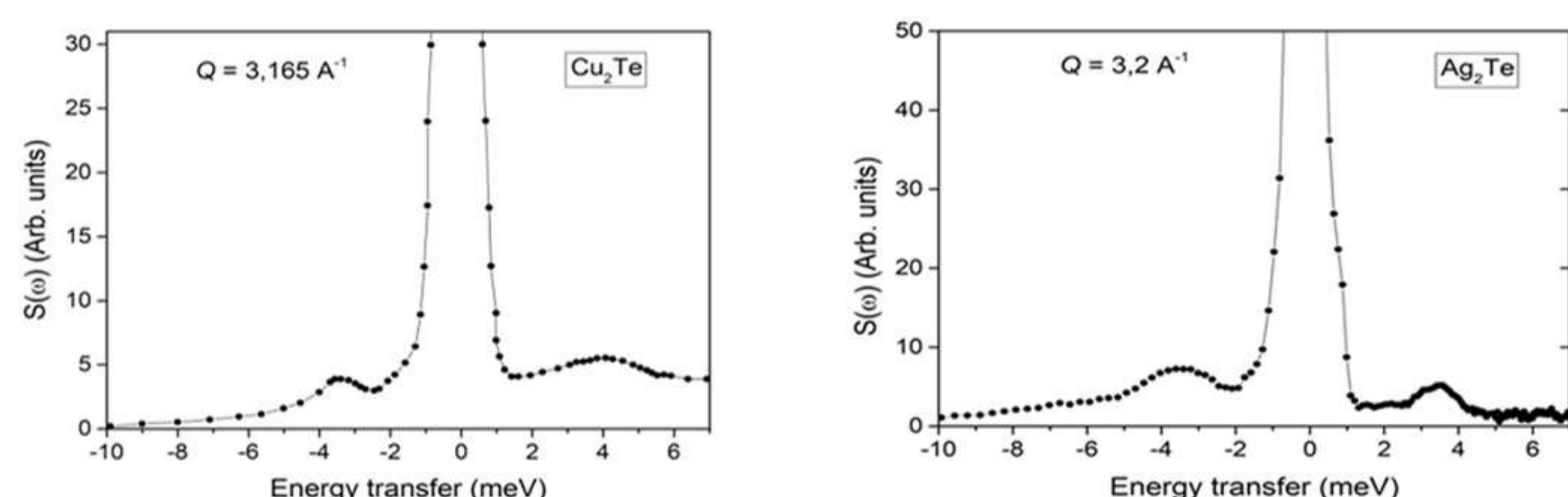


Рис.1. Динамический структурный фактор соединений Cu₂Te (а), Ag₂Te (б) при температуре 300 К

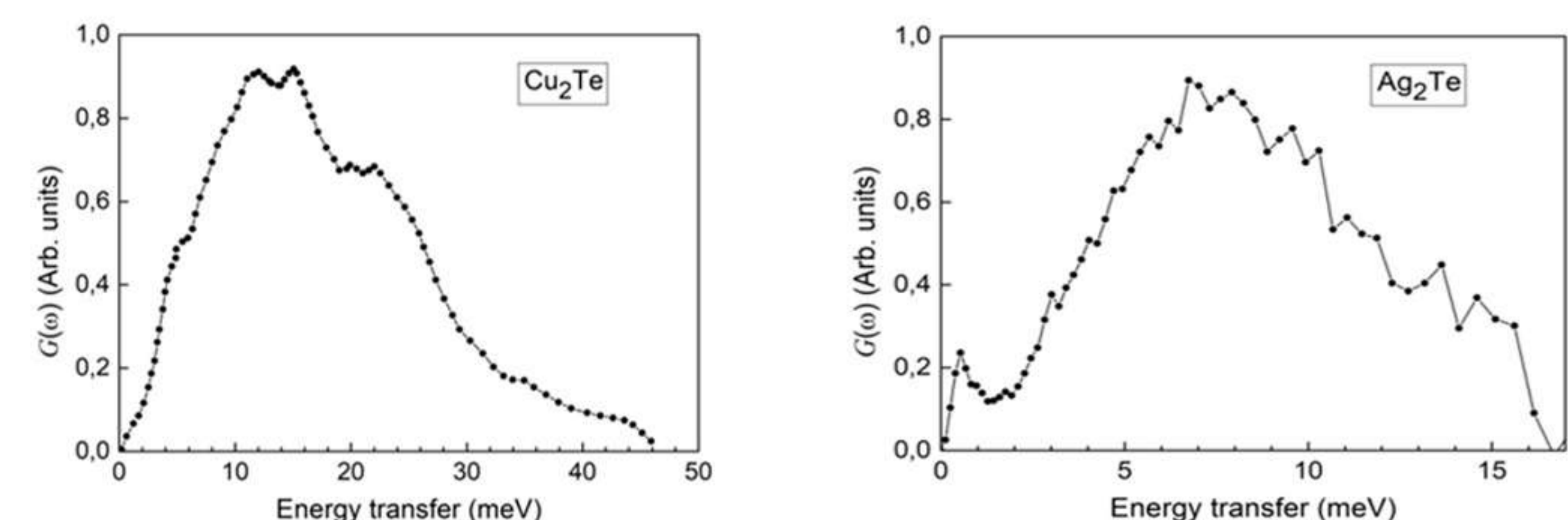


Рис.2. Плотность фоновых состояний G(omega) при комнатной температуре соединения Cu₂Te (а) и Ag₂Te (б)

Динамический структурный фактор и обобщенные спектры неупругого рассеяния нейтронов при температуре 300 К в зависимости от переданной энергии ϵ приведены на рис. 1, 2 для соединений Cu₂Te(а) и Ag₂Te(б) соответственно.

Результаты

Результаты исследования динамики решетки соединения Cu₂Se были ранее опубликованы в [1]. Для всех халькогенидов при комнатной температуре в несуперионной фазе наблюдаются низкочастотные колебания с энергиями $\epsilon \approx 3-5$ мэВ, соответствующие акустическим фононам.

Впервые исследованы обобщенные плотности фоновых состояний $G(\omega)$ для смешанных ионно-электронных проводников в зависимости от состава при комнатной температуре. Установлено, что в несуперионной фазе наблюдается высокая плотность фононов и линейная зависимость $G(\omega)$ от частоты в области малых частот.

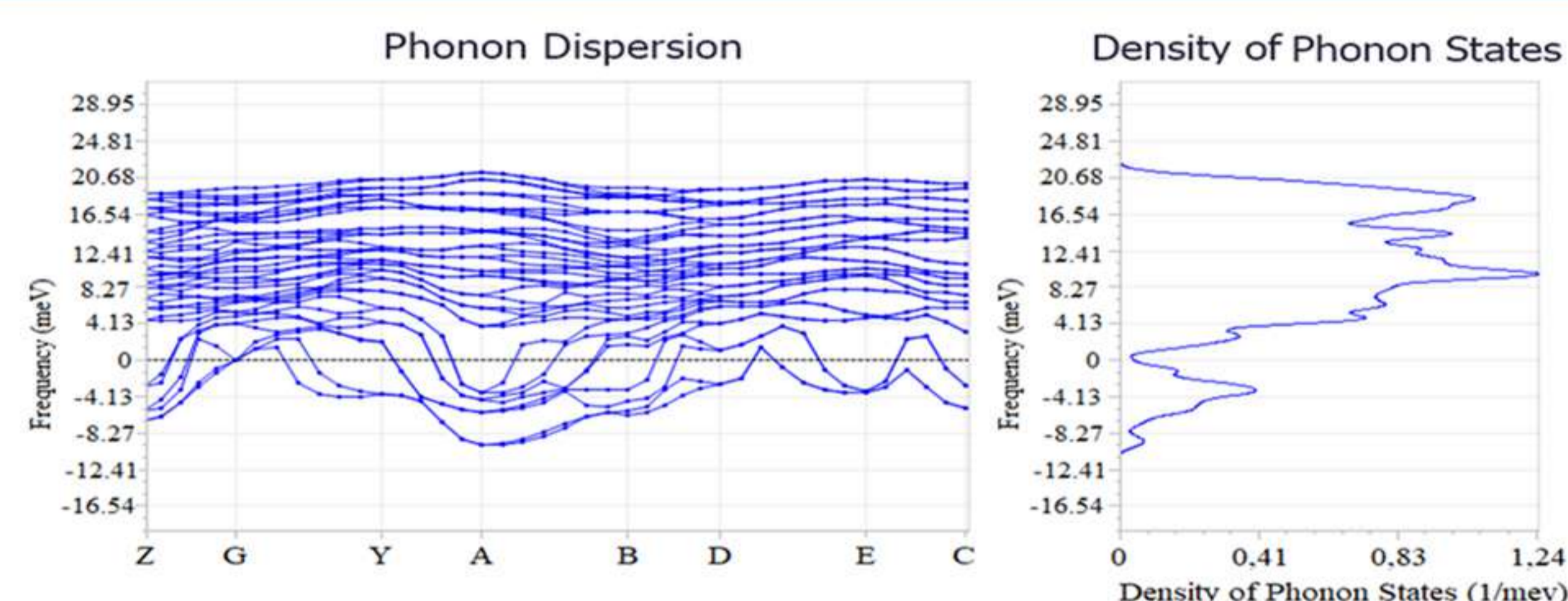


Рис.3. Фононный спектр соединения Ag₂Te

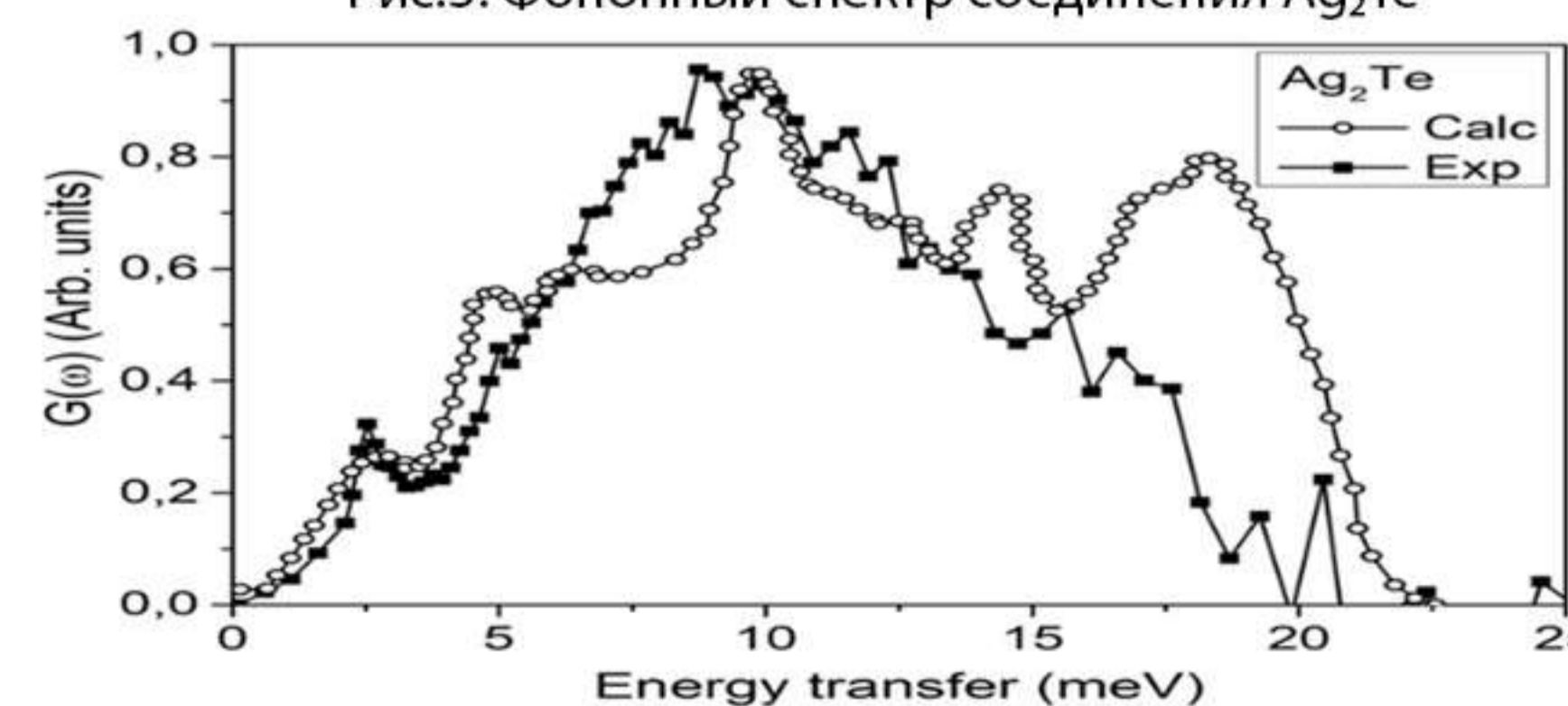


Рис.4. Расчетная и экспериментальная плотности фоновых состояний G(omega) при комнатной температуре соединения Ag₂Te

Вид фононного спектра в несуперионном состоянии определяется совместным влиянием локального окружения атомов и взаимодействием подвижной и жесткой подрешеток, находящихся в динамическом равновесии и обусловлено ангармонизмом колебаний.

Аннотация

1. Биккулова Н.Н., Степанов Ю.М., Давлетшина А.Д., Биккулова Л.В. // Письма о материалах. 2013. Т. 3. № 2. С. 87–90.
2. Биккулова Н.Н., Бескровный А.И., Ядровский Е.Л., Скоморохов А.Н., Степанов Ю.М., Миколайчук А.Н., Сагдаткиреева М.Б., Каримов Л.З. // Кристаллография. 2007. Т. 52. № 3. С. 474–476.
3. Bikkulova N.N., Goremychkin E.A., Akmanova G.R., Kurbangulov A.R., Bikkulova L.V., Safargaliev D.I., Nigmatullina G.R., Alymov M.I. Lattice Doklady Physics. 2021. V. 66. № 9. P. 249–252.