

UOT: 548.736.3

YÜKSƏK TEMPERATURLARDA $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ BİRLƏŞMƏSİNDƏ QURULUŞ FAZA KEÇİDLƏRİ

Y.İ. Aliyev^{1,2}, Y.Q. Əsədov¹, A.O. Daşdəmirov², S.H. Cabarov^{1,2}

¹AMEA, H.B. Abdullayev adına Fizika İnstitutu,

²Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

sakin@jinr.ru

Xülasə: Yüksək temperaturu rentgen difraksiyası metodu ilə $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin kristal quruluşu tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ otaq temperaturunda Cu_2Te , AgCuSe və kubik fazadan ibarət üç fazalı sistemdir. $T = 444$ K-də hər iki ortorombik faza kubik fazaya çevrilmişdir.

Açar sözlər: rentgen difraksiyası, kristal quruluş, $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$.

1. Giriş

Gümüş və mis tərkibli yarımkəçirici materiallar son zamanlarda ən çox tədqiq edilən birləşmələrdəndir. Bu birləşmələrin böyük marağ doğurmasının əsas səbəbi, müxtəlif quruluş (ortorombik, monoklin, kubik) və fiziki xassələrinin (yarımkəçirici, fotoelektrik) göstərmələridir. Yüksək temperaturu oblastında bir neçə quruluş fazasının olması, müxtəlif çevicilərin alınması zamanı bu materiallardan istifadə imkanları yaradır [1-3]. Quruluş tədqiqatları zamanı AgCuSe birləşməsi üçün müxtəlif quruluş fazaları alınmışdır. Bəzi tədqiqatlar zamanı Ag_2Se və Cu_2Se fazalarından ibarət, bəzilərinə isə $a = 4.083$ Å, $c = 6.30$ Å qəfəs parametrlili $P4/nmm$ fəza qruplu tetraqonal fazalı, bəzilərinə $a = 4.105$ Å, $b = 20.350$ Å, $c = 6.310$ Å qəfəs parametrlili $Pmnm$ fəza qruplu ortorombik fazalı, son zamanlarda aparılmış tədqiqatlarda isə $a = 6.1295$ Å qəfəs parametrlili $Fm-3m$ fəza qruplu kubik fazalı kristal quruluşu alınmışdır [4].

Göründüyü kimi, bu birləşmələrdə müxtəlif quruluş fazaları mövcud olur. Bu işdə, AgCuSe birləşməsində Se atomlarının qismən Te atomları ilə əvəzləmələri aparılması ilə alınmış $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsi sintez edilmiş, $T = 273-573$ K yüksək temperaturu oblastında onun kristal quruluşu tədqiq edilmişdir.

2. Təcrübələr

2.1. Sintez. $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsi uzunluğu 10 sm və diametri 1 sm olan kvarts ampulada sintez edilmişdir. Stexiometrik miqdarda Ag, Cu, Se, S və Te ampulaya yerləşdirildikdən sonra $P = 10^{-3}$ Pa vakuum alınmışdır. Ampula yüksək temperaturu sobaya yerləşdirilmiş, əvvəlcə S-in ərimə temperaturuna qədər ($T = 391$ K), sonra Se-in ərimə temperaturuna qədər ($T = 493$ K), sonda isə Te-un ərimə temperaturuna qədər ($T = 725$ K) qızdırılmış və bu temperaturda 4 saat saxlanılmışdır. Sonra temperatur 50 K/saat sürəti ilə AgCuSe birləşməsinin ərimə temperaturuna ($T = 1039$ K) qədər qızdırılmış və bu temperaturda 3 saat saxlanılmışdır. Sonra temperatur $T = 400$ K-ə qədər aşağı salınmış və bu temperaturda 200 saat saxlanılmışdır. Yekunda alınmış birləşmənin rentgen difraksiyası metodu ilə faza analizi aparılmışdır.

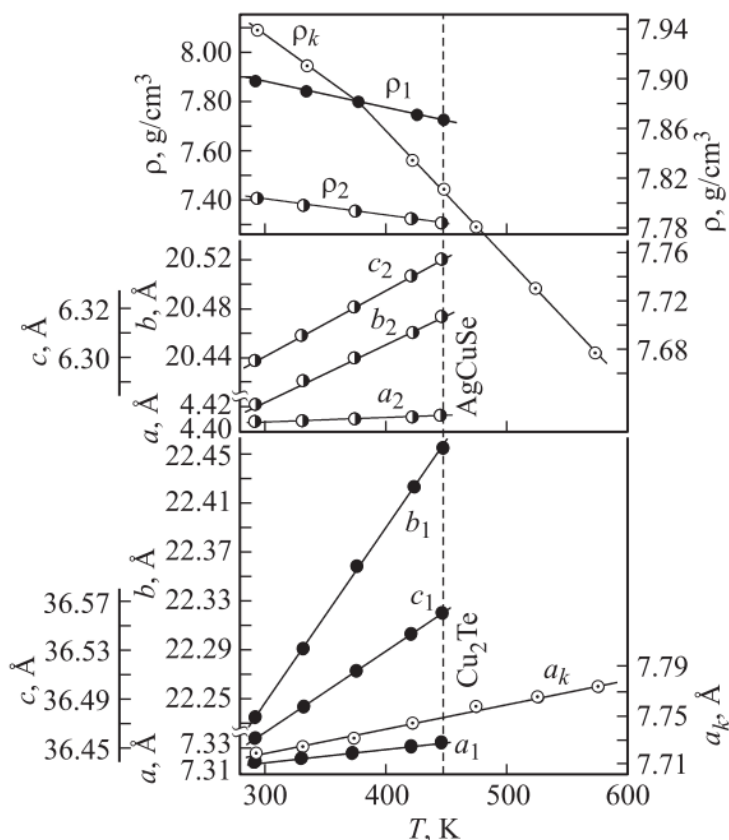
2.2. Rentgen difraksiyası. Yüksək temperaturu oblastında $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin quruluş tədqiqatları, kristal quruluşu malik olan bərk cisimlərdə quruluş tədqiqatları üçün ən mükəmməl metodlardan biri olan rentgen difraksiyası metodu ilə aparılmışdır. Bu metod, kristal quruluşda

qəfəs parametrlərinin və atom koordinatlarının təyin edilməsinə imkan verir. Təcrübələr $\text{CuK}\alpha$ -şüalanma, $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ dalğa uzunluqlu, Ni filtrli DRON-3M rentgen difraktometrində həyata keçirilmişdir. Yüksək temperaturların ($T = 273\text{-}573 \text{ K}$) alınması üçün $P = 10^{-2} \text{ Pa}$ vakuumda URVT-2000 qurğusundan istifadə edilmişdir. Rentgen difraksiyası spektrləri $\Delta\theta = 0.1^\circ$ addımı ilə $\sim \pm 0.02^\circ$ dəqiqliyi ilə ölçülmüşdür. Hər bir rentgen difraksiyası spektri 40 dəqiqə ərzində alınmışdır.

3. Nəticələrin müzakirəsi.

$\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin otaq temperaturunda və normal şəraitdə alınmış rentgen difraksiyası spektrlərində $10 \leq 2\theta \leq 90^\circ$ intervalında 22 difraksiya maksimumu müşahidə edilmişdir. Bu difraksiya mənzərəsi 3 fərqli quruluş fazasına uyğun gəlir: I. Cu_2Te birləşməsinə uyğun gələn $a = 7.319 \text{ \AA}$, $b = 22.236 \text{ \AA}$, $c = 36.458 \text{ \AA}$ qəfəs parametrləri $P6/nmm$ fəza qruplu ortorombik faza, II. AgCuSe birləşməsinə uyğun gələn $a = 4.107 \text{ \AA}$, $b = 20.412 \text{ \AA}$, $c = 6.299 \text{ \AA}$ qəfəs parametrləri $P4/nmm$ fəza qruplu ortorombik faza, III. AgCuSe birləşməsinə uyğun gələn $a = 7.715 \text{ \AA}$ qəfəs parametrləri $Fd3m$ kubik faza. $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsində eyni zamanda 3 müxtəlif quruluş fazasının mövcud olması, Se,Te anionlarının və Ag,Cu kationlarının paylanması ilə əlaqədar baş verir.

Yüksək temperaturlarda quruluş tədqiqatları $\Delta T = 50 \text{ K}$ addımı ilə həyata keçirilmişdir. $T = 444 \text{ K}$ temperaturda alınmış rentgen difraksiyası spektrlərində 22 maksimumdan 6-sı müşahidə edilmişdir. Kristalloqrafiyadan məlumdur ki, spektrlərdə maksimumların sayının azalması, simmetriyanın yüksəlməsi ilə əlaqədardır. Analiz nəticəsində məlum olmuşdur ki, $T = 444 \text{ K}$ -də hər iki ortarombik faza kubik fazaya keçir. Qəfəs parametrlərinin temperatur asılılıqları şəkil 1-də verilmişdir.



Şək. 1. Yüksək temperaturlarda $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin qəfəs parametrləri və sıxlığı: Cu_2Te ortorombik faza (a_1, b_1, c_1, ρ_1), AgCuSe monoklin faza (a_2, b_2, c_2, ρ_1), kubik faza (a_k, ρ_k).

Şəkil 1-dən göründüyü kimi, qəfəs parametrlərinin qiymətləri yüksək temperaturalar oblastında xətti olaraq artırlar. Qəfəs parametrlərinin artması hesabına elementar qəfəsin həcmində genişlənmə baş vermişdir ki, ona görə də ümumilikdə materialın sıxlığı azalmışdır. Şəkil 1-də müxtəlif fazalarda $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin sıxlığının temperatur asılılıqları da verilmişdir. Asılılıqlardan görünür ki, kubik fazada sıxlığın azalma sürəti ortorombik fazalara nəzərən daha çox olur ki, bu da qəfəs parametrlərində olduğu kimidir.

4. Nəticə

Rentgen difraksiyası metodu ilə yüksək temperaturalar oblastında aparılmış quruluş tədqiqatları nəticəsində məlum olmuşdur ki, $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsinin kristal quruluşu normal şəraitdə və otaq temperaturunda 3 müxtəlif fazadan ibarət olur. Hər bir quruluş fazası üçün qəfəs parametrləri və sıxlıq təyin edilmiş, temperaturdan asılı olaraq onların dəyişmə mexanizmi müəyyən edilmişdir. Göstərilmişdir ki, $T = 444$ K-də quruluş faza keçidi baş verir və $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ birləşməsi birfazalı kubik fazaya çevrilir.

Ədəbiyyat

1. Y.I. Aliyev, T.M. Ilyasli, A.O. Dashdemirov, M.R. Allazov, A.V. Trukhanov, Y.G. Asadov, S.H. Jabarov, N.T. Dang, The structural and vibrational properties of ni-doped chalcopyrite CuFeS_2 , Journal of Ovonic Research, 2018, V.14, No.2, pp.165-169.
2. Y.I. Aliyev, A.G. Babaev, Yu.G. Asadov, G.F. Ganizade, R.D. Aliyeva, S.G. Jabarov, A.V. Trukhanov, Temperature-Induced structural phase transformations in $\text{Cu}_{1.50}\text{Zn}_{0.30}\text{Te}$ and $\text{Cu}_{1.75}\text{Cd}_{0.05}\text{Te}$ single crystals, Crystallography Reports, 2017, V.62, No.2, pp.610-617.
3. Y.I. Aliyev, Yu.G. Asadov, A.G. Babaev, G.F. Ganizade, R.D. Aliyeva, S.G. Jabarov, A.V. Trukhanov, Influence of cation substitution on the polymorphic transformation in $\text{Ag}_{2-x}\text{Cu}_x\text{S}$ ($x = 0.45, 0.8, \text{ and } 1.07$) crystals, Crystallography Reports, 2017, V.62, pp.610-617.
4. Yu.G. Asadov, Yu.I. Aliyev, A.G. Babaev, Polymorphic transformations in Cu_2Se , Ag_2Se , AgCuSe and the role of partial cation-cation and anion-anion replacement in stabilizing their modifications, Physics of Particles and Nuclei, 2015, V.46, No.3, pp.452-474.

СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СОЕДИНЕНИЕ $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Ю.И. Алиев, Ю.Г. Асадов А.О. Дашдамиров, С.Х. Джаббаров

Резюме: Методом высокотемпературной рентгеновской дифрактометрии проведено исследование кристаллов состава $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$. Показано, что состав $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ при комнатной температуре трехфазный, включает Cu_2Te , AgCuSe и кубическую фазу. При 444 К обе орторомбические фазы одновременно превращаются в алмазоподобную кубическую фазу.

Ключевые слова: рентгеновская дифракция, кристаллическая структура, $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$

STRUCTURAL PHASE TRANSITION OF $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ COMPOUND AT HIGH TEMPERATURE

Y.I. Aliyev, Y.G. Asadov, A.O. Dashdemirov, S.H. Jabarov

Absrtact: The high-temperature X-ray diffraction technique is used to study $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ crystal structure. It is shown that, at room temperature, the $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$ composition consists of three phases,

specifically, Cu_2Te , AgCuSe , and a cubic phase. At 444 K, both orthorhombic phases simultaneously transform into a cubic phase.

Key words: rentgen diffraction, crystal structure, $\text{AgCuSe}_{0.5}\text{Te}_{0.5}$.