

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ CuFeTe_2 .

Ф.Ю. АЛИЕВ, Г.Г. ГУСЕЙНОВ, А.И. ДЖАББАРОВ, С.К. ОРУДЖЕВ

Институт физики АН Азербайджана 370143 г. Баку, пр.Г.Джавида, 33.

Сумгаитский Индустриальный Институт

Выращены монокристаллы CuFeTe_2 и показано, что структура слоистая, со следующими параметрами тетрагональной ячейки: $a=4,02 \text{ \AA}$, $c=6,04 \text{ \AA}$ пр. гр. симметрии $P4/nmm$, $z=1$. Соединение CuFeTe_2 является изоструктурной рикордита $\text{Cu}_{4-x}\text{Te}_2$ с той лишь разницей, что в CuFeTe_2 оба металлических атома статистически распределены в двукратных позициях. Атомы меди координированы с $4\text{Fe}+4\text{Te}$, образуя тетрагональную призму. $4\text{Cu}+4\text{Fe}+4\text{Te}$ образуют полиэдр в виде пустых октаэдров.

Исследованы температурные зависимости электропроводности (σ) и термо-э.д.с. (α) в температурном интервале $77+400\text{K}$, где наблюдаются максимумы σ и α при $T \approx 360\text{K}$ и минимум аномальных значений α в интервале $160+220\text{K}$.

Известно, что проблема высокотемпературной сверхпроводимости и низкомержного магнитного упорядочения в магнитных материалах привлекают внимание многих исследователей. В частности, очевидно важность понимания механизма формирования в таких материалах магнитного и сверхпроводящего состояний взаимодействием медь-халькоген, железо-халькоген и медь-халькоген-железа [1-4]. В [4] механизм формирования сверхпроводящего состояния в CuFeTe_2 связывается со спин-решеточным взаимодействием и конкуренцией обменных взаимодействий, что аналогично результатам работ [5]. В настоящей работе представлены результаты экспериментального исследования кристаллической структуры, электропроводности и термо-э.д.с. монокристаллов CuFeTe_2 .

1. СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА CuFeTe_2 .

Образцы CuFeTe_2 синтезировали сплавлением бинарных компонентов CuTe и FeTe , взятых в эквимолекулярном соотношении, в откаченной до $P=10^{-2}\text{Па}$ и запаянной кварцевой ампуле. Затем нагрели в односекционной печи со скоростью $100^\circ\text{C}/\text{час}$ до температуры 1000°C . После 40-минутной выдержки температура печи медленно охладилась до комнатной температуры. Синтезированный образец представлял собой слиток бурого цвета компактного состояния с явно наблюдаемыми мелкими кристалликами. Затем синтезированный образец поместили в ампулу и после откачки положили в печь, поднимая температуру до определенной точки*, и выдерживали в течение ~ 25 суток при данной температуре.

В результате проведенного опыта установлено, что вся масса состава CuFeTe_2 полностью закристаллизована в виде монокристалла размерами ($d=7$, $d=16 \text{ мм}$). Выращенные кристаллы слоистые, обладают совершенной спайностью, их поверхности отличаются интерференционными оттенками.

Монокристаллы CuFeTe_2 подвергались детальному рентгенографическому и структурному исследованиям. Получены отражения типа (002) от поверхности слоев и порошковая дифрактограмма на дифрактометре ДРОН-3 (-излуч).

В результате идентификации отражений типа (001) и индентификации экспериментальных межплоскостных расстояний (α) (табл.1) было установлено, что выращенные монокристаллы CuFeTe_2 кристаллизуются в тетрагональной сингонии с периодами решетки $a=4,02$ (1), $c=6,04$ (3) \AA , Пр.гр. $P4/nmm$, $z=1$, $\rho=6,35\text{г}/\text{см}^3$, $V=97,19 \text{ \AA}^3$. Из [6,7] известно, что аналогичными параметрами и симметрией решетки обладает рикордит $\text{Cu}_{4-x}\text{Te}_2$ и исследуемое соединение CuFeTe_2 является его структурным аналогом. Хотя распределение атомов в обоих составах одинаково, однако имеются неко-

торые принципиальные отличия. Которые требуют детализации.

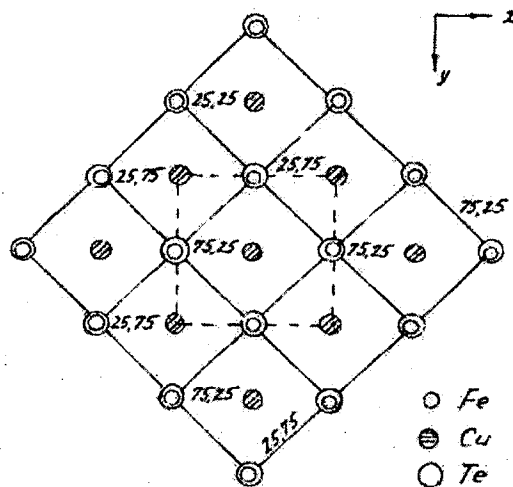


Рис. 1. Идеализированная схема распределения атомов в структуре CuFeTe_2 на плоскости (XY):

Структурная формула рикордита представляется как $2\text{Cu}_{2-x}\text{Te}$ ($x=0,5; 0,6$), где атомы меди находятся в одновалентном и двухвалентном состоянии. Два атома Cu^+ занимают двукратное $2(\alpha)$ положение: (000), Cu^{2+} - статически $2(c)$ положения: (0, $1/2Z$), где $Z=0,269$ (6). Атомы $\text{Te}-2(c)$, где $Z=0,714$ (6), т.е. статическое положение атомов Cu^{2+} образуется за счет дефицита в его составе меди. Поскольку, в решетке находится по одному атому Cu и Fe , то здесь речь идет о позиционной статистике в двукратных положениях. Структуру в полиэдрическом представлении трудно изображать. Пустые октаэдры, образованные из четырех атомов меди и по одной Fe и Te , не дают полную характеристику структуры.

* Значение точки кристаллизации у авторов.

На рис.1 приведено распределение атомов на плоскости (XY). Видно, что атомы меди окружены восьмью атомами (4Fe+4Te) в виде тетрагональной призмы послойно.

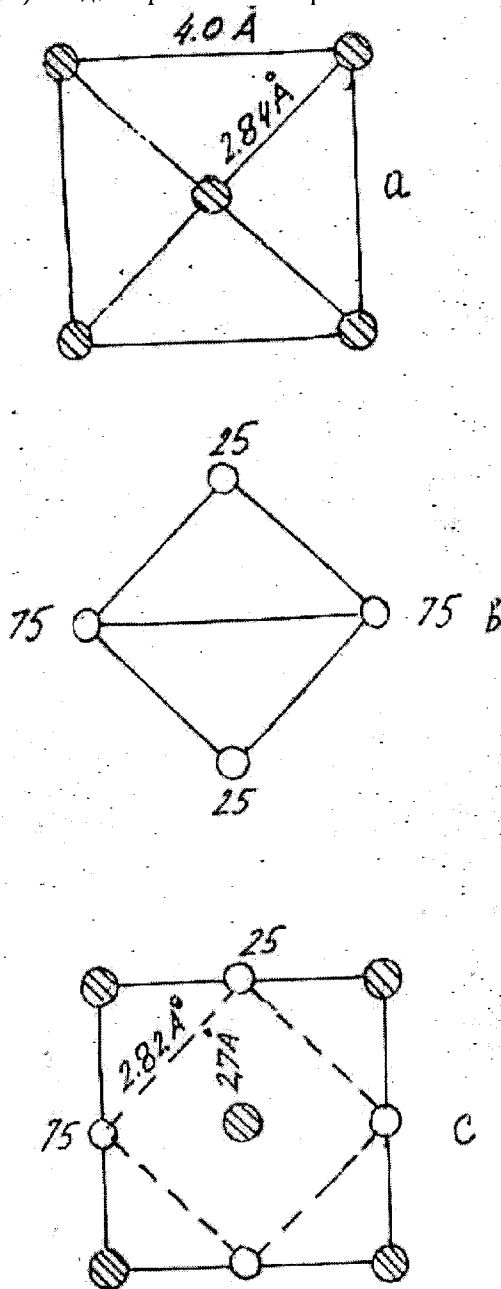


Рис.2. Подрешетки атомов Cu(a), Fe(b) и их взаимодействие (c).

Каждый призматический слой находится от очередных аналогичных призматических слоев на расстоянии $\sim 3 \text{ \AA}$, что придает структуре слоистый характер и совершенную спайность.

Подрешетки Cu, Fe и их взаимодействия представлены на рис.2 (a, b, c).

Подрешетка меди представляет собой центрированный квадрат, где все атомы расположены на двойных осях ре-

шетки на одной плоскости. Расстояния между атомом меди с координатами $(1/2 \ 1/2 \ 0)$ с другими атомами меди одинаковы и составляют примерно $2,84 \text{ \AA}$.

Подрешетка атомов Fe представляет собой пустой тетраэдр. Все Fe-Fe расстояния здесь равны параметру решетки «a». Судя по длине связи, атомы Cu и Fe в подрешетках связаны сильнее, чем в отдельности и составляют в среднем $\sim 2,7 \text{ \AA}$.

Схема чередования призматических слоев меди по направлению оси «с» кристалла такова: ... слой тетрагональных призм ... или же ... A - □ - A.

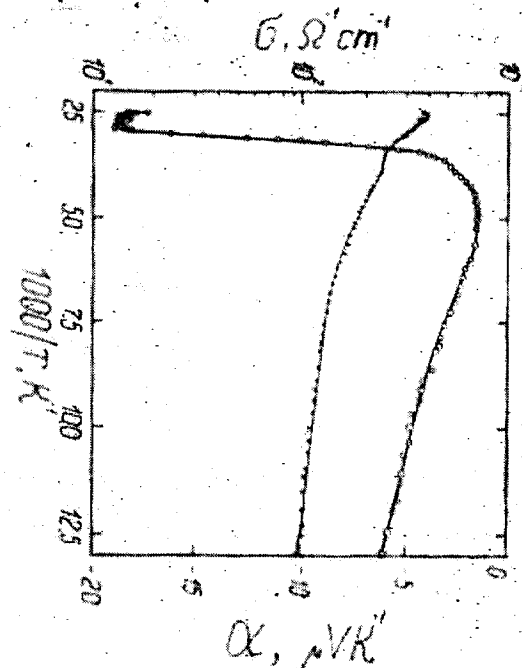


Рис.3. Температурные зависимости электропроводности (σ)-X и термо-Э.Д.С. (α)-0.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Электропроводность и коэффициент термо-эдс. измеряли четырехзондовым методом с точностью до 1%. Омические контакты создавали путем электролитического осаждения меди и проверяли измерением ВАХ при 77 и 360К.

Исследованы температурные зависимости электропроводности (σ) и термо.эдс. (α) монокристаллов CuFeTe_2 в интервале 77-400К. Образцы имели форму параллелепипеда размерами $5,93 \times 4,80 \times 0,93 \text{ мм}^3$, которые отжигались при температуре 450К.

Результате температурных зависимостей $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ показаны на рис.3. Температурные зависимости $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ CuFeTe_2 имеют в области 360К аномалии. Характер зависимости $\sigma(T)$ при 360К меняется от полупроводникового к полиметаллическому. Температурная зависимость $\alpha(T)$ имеет более обширную область перехода. При $T \approx 210\text{K}$ она имеет значения $\alpha_{\min} = -1,50 \text{ \mu V/R}^1$ и возрастает при $T = 360\text{K}$ до $\alpha_{\max} = -19,00 \text{ \mu V/R}^1$, а затем спадает. Во всей температур-

ной области и по измерениям термо-эд.с. проводимость является n типа. Аномалии при температуре $T \approx 360\text{K}$ в зависимостях $\sigma(T)$ и $\alpha(T)$ и связаны с магнитным фазовым переходом.

Для выяснения природы наблюдаемых эффектов и аномалий продолжают экспериментальные исследования магнитных свойств и ЭПР характеристики CuFeTe_2 , о результатах которых сообщим в ближайшем будущем

Таблица 1.

Расчет дифрактограммы железо-рикордита CuFeTe_2

--	--	--	--	--

№	2θ	$J_{\text{отн.}}$	$d_{\text{экс}}$	Hkl
1	1446	10	5981	001
2	2656	10	3305	101
3	2936	8	3032	002
4	3518	6	2551	111
5	4244	5	2106	112
6	4420	9	2042	003
7	4510	10	2011	200
8	5040	6	1803	103
9	5140	5	1684	211
10	6120		1510	004
11	6620		1408	220

- [1] T. Teranisti. J.Phys.Soc., Japan 16, 1881-1889, 1961. [5] П.А.Петраковский и др. ФТТ, 1999г., т.41, в.4, с.677-679.
 [2] Д.Воган, Дж.Крейг. Химия сульфидных минералов. – [6] S.A.Jorman, M.A.Reacock. Amer. Mineralogist, 34, 441
 М.Изд. «Мир», 1981г., с.575. (1949)
 [3] Ф.Ю. Алиев, Э.Г. Касумова. Письма в ЖЭТФ, 1973г., [7] Structure Reports. V.22, 109-110 (1958) Epstein, Gmrevitz,
 т.18., в.1, с.3. J. Makovsky, H. Shaked. Phys. Rev. 13, 1970, v.2, №9.
 [4] Ф.Ю. Алиев, Э.Г. Касумова. УФН, 1974г., т.113, в.4, p.3703-3706.
 с.728.

F.Y. Əliyev, Q.H. Hüseyinov, A.İ. Cabbarov, S.K. Orucov

CuFeTe₂ MONOKRİSTALLARININ KRİSTAL QURULUŞU VƏ ELEKTRİK XASSƏLƏRİ

CuFeTe_2 birləşməsinin monokristalları yetişdirilmiş, kristal quruluşu öyrənilmişdir. Quruluş laylı xarakterə malikdir, onun tetraqonal qəfəsinin sabitləri: $a=4,02\text{Å}$; $c=6,004\text{Å}$, f.qr. $P 4/nmm$, $z=1$ -dir. Quruluş rikorditin – $\text{Cu}_4\cdot\text{Te}_2$ quruluşu ilə izostruktur olsa da, ondan metalik Cu və Fe atomlarının ikilik vəziyyətlərdə statistik paylanması ilə fərqlənir. Mis atomları $4\text{Fe}+4\text{Te}$ atomları ilə əhatə olunaraq tetraqonal prizma (Psevda kub) formasında poliedr yaradır. $4\text{Cu}+\text{Fe}+\text{Te}$ boş oktaedrlərdən ibarət poliedr əmələ gətirir.

CuFeTe_2 monokristallarının 77-400K intervalında elektrikkeçirməsinin (σ) və termo e.h.q.-nin temperaturdan asılılığı tədqiq edilmişdir. σ və α – nın $T \sim 360\text{K}$ qiymətində maksimumu və $T \sim 210\text{K}$ də α – nın kəskin sürətdə düşməsi müşahidə olunmuşdur. $T \sim 360\text{K}$ - də müşahidə edilən anomaliyanın CuFeTe_2 – də maqnit nizamlanması ilə əlaqədar olması güman edilir.

F. Yu. Aliyev, G.G. Guseynov, A.I. Jabbarov, S.K. Orujov

CRYSTAL STRUCTURE AND ELECTRIC PROPERTIES OF CuFeTe_2 SINGLE CRYSTALS

There have been grown up single crystals and crystal structure of CuFeTe_2 is determined. The structure is laminated, parameters of tetragonal cell are following: $a=4,02\text{Å}$; $c=6,004\text{Å}$, space group is equal to $P 4/nmm$, $z=1$. CuFeTe_2 is the isostructure of rickardite. The difference is that in CuFeTe_2 both metal atoms are statistically distributed in twofold positions. Cu atoms are coordinated with $4\text{Fe}+4\text{Te}$ forming tetragonal prism.

$4\text{Cu}+\text{Fe}+\text{Te}$ form polyhedron as vacant octahedrons.

In $T=77-400\text{K}$ temperature dependence of electric conduction (σ) and thermo EMF (α) are investigated. There have been observed maximum of σ and α at $T=360\text{K}$ and sharp fall at $T=210\text{K}$.

It is suggested that anomaly at 360K is connected with magnetic ordering in CuFeTe_2 .