

Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> KRİSTALININ AŞAĞI TEMPERATURLARDA İSTİLİK TUTUMU

A.M. ABDULLAYEV, M.C. NƏCƏFZADƏ, A.İ. ƏHMƏDOV, İ.N. İBRAHİMOV

Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu

H. Cavid pr. 131, AZ-1143 Bakı, Azərbaycan

E-mail: [aqaadil@gmail.com](mailto:aqaadil@gmail.com)

Tel: 050-353-99-19

İndiki işdə Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> kristalının 2–306K temperatur intervalında ölçülən aşağı temperaturda istilik tutumunun tədqiqatının nəticələri təqdim edilmişdir.  $\frac{C_p}{T}$  (T<sup>2</sup>) asılılığından istilik tutumunun elektron əlavəsinin  $\gamma$  xarakteristikası hesablanmışdır ( $\gamma \approx 0.0041 \frac{J}{mol \cdot K^2}$ ). İstilik tutumunun təhlili nəticəsində xarakteristik Debay temperaturu təyin olunmuşdur ( $\theta_D \approx 230K$ ).  $\theta_D$  parametri istilik tutumunun eksperimental asılılığının ən yaxşı təsviri şərti ilə seçilir. Göstərilmişdir ki, fonon halının izotrop sıxlığına əsaslanan bir xarakterik  $\theta_D$  temperaturuna malik Debay modelinin tətbiqi müəyyən məhdudiyətə malikdir. Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün xarakterik temperaturun  $\theta_D(T)$  asılılığı hesablanmışdır. Kristal qəfəsin istilik tutumunu təsvir etmək üçün istifadə olunan müxtəlif nəzəri yanaşmaların təhlili aparılmışdır. İstilik tutumunun müxtəlif əlavələrini aşkar etməkdən ötrü Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün  $\frac{C_p(T)}{T^3}$  ifadəsinin T<sup>2</sup>-dan asılılığı qurulmuşdur. Aşağı temperaturda maksimumun olması Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsinin istilik tutumuna Eynşteyn əlavəsinin ( $C_E$ ) göstərir. İki Debay əlavəsinin ( $C_{D1}, C_{D2}$ ) nəzərə alınması Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> kristal qəfəsinin mürəkkəbliyi ilə əlaqədardır. Beləliklə, Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsinin istilik tutumunun temperaturdan asılılığının qənaətbəxş təsviri  $\theta_{D1}, \theta_{D2}, \theta_E$  xarakterik temperaturların fərqli qiymətlərində Debay və Eynşteyn əlavələrinin müxtəlif birləşmələrinin köməyi ilə əldə edilə bilər. Entropiyanın temperatur dəyişməsi hesablanmışdır.

**Açar sözlər:** İstilik tutumu; Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub>; Debay temperaturu; Entropiya

**PACS:** 65.40.Ba, 65.40.Gr

## Giriş

LaFeAsO<sub>1-x</sub>F<sub>x</sub> maddəsində ifratkeçiriciliyin kəşfi [1] dəmir əsaslı yüksək temperaturlu ifratkeçiricilərə (Fe-HTS) əhəmiyyətli marağı stimullaşdırmışdır. İndiyə qədər bir neçə Fe-HTS aşkar edilmişdir. Onları iki sinfə ayırmaq olar. Birinci sinif dəmir pniktid materiallarıdır [1-3]. Digər sinif FeCh (Ch = FeCh-11 tipli xalkogenlər) binar dəmir xalkogenidləridir [4-6]. Əslində, dəmir pniktidlərində ifratkeçiriciliyin kəşfi tezliklə FeSe dəmir xalkogeniddə də aşkar olundu və bu da, nisbi "kimyəvi" sadəliyinə görə bu sistemə böyük maraq doğurdu, baxmayaraq ki, onun ifratkeçirici xüsusiyyətləri (normal şəraitdə) kifayət qədər adidir ( $T_c \sim 8 K$ ). Dəmir xalkogenidləri ilə bağlı ümumi vəziyyət, 30–40 K temperatura qədər yüksəlmiş  $T_c$  qiymətləri olan FeSe əsaslı interkalasiya sistemlərinin meydana gəlməsi ilə kəskin şəkildə dəyişdi. Bu tip ilk sistem  $T_c \sim 30 K$  olan A<sub>x</sub>Fe<sub>2-y</sub>Se<sub>2</sub> (A = K, Rb, Cs) birləşmələri idi [7-11]. Dəmir tərkibli xalkogenid ifratkeçiricilərin ən diqqətəlayiq xüsusiyyətləri kimyəvi qeyri-bircinsliyi və maqnit qarşılıqlı təsirlərə və ifratkeçiriciliyə əhəmiyyətli təsir göstərən ideal stexiometriyadan kənar çıxmasıdır.

(Tl, K, Rb)Fe<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> sistemində Fe vakansiya super qəfəsinin olması antiferromaqnit blokların yaranmasına səbəb olur [11]. Bu yaxınlarda müəyyən edilmişdir ki, K<sub>x</sub>Fe<sub>2-y</sub>S<sub>2</sub> və KFe<sub>1.05</sub>Ag<sub>0.88</sub>Te<sub>2</sub> birləşmələri spin şüşələrinə xas xüsusiyyətlər nümayiş etdirir, KFe<sub>0.85</sub>Ag<sub>1.15</sub>Te<sub>2</sub> birləşməsi isə uzaq maqnit nizamlılığına malikdir [12-14]. Xüsusilə sonuncu materialda sərbəst K və ya Fe-Ag vakansiyaları yoxdur və onun maqnit və keçiricilik xassələri olduqca maraqlıdır. Ag atomları Fe qəfəsinə elə doldurur ki, kristal strukturun

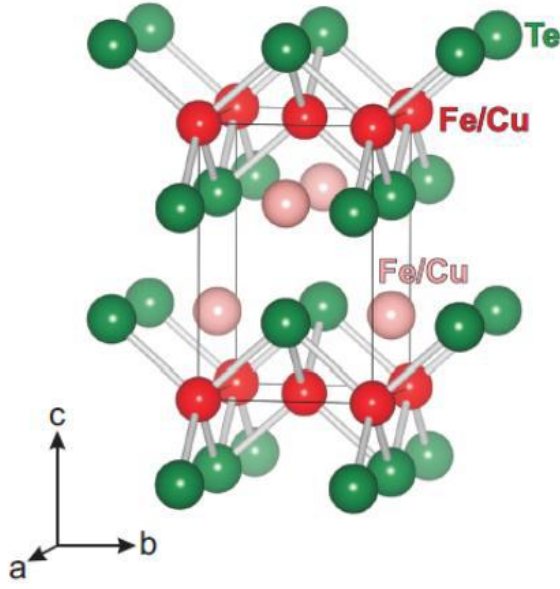
Fe-Ag düyünlərində vakansiyalar olmasın. Beləliklə, Fe<sup>2+</sup> ionlarının maqnit halları, tərkibində sərbəst Fe vakansiyaları olmayan *I4/mmm* fəza qrupuna aid olan materiallarda tədqiq edilə bilər, bu A<sub>x</sub>Fe<sub>2-y</sub>Se<sub>2</sub> ifratkeçirici birləşmələrin fəza qrupu ilə eynidir [15-17].

Bu işdə kristalların qəfəs istilik tutumunu və mümkün fəza keçidlərinin termodinamik xüsusiyyətlərini təsvir etmək üçün istifadə olunan müxtəlif nəzəri yanaşmaları təhlil etmək məqsədi ilə Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> birləşməsinin istilik tutumu öyrənilmişdir. Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsinin istilik tutumu 2 - 306 K intervalında Quantum Design PPMS (Physical Property Measurement System) sisteminin kommersiya cihazında ölçülmüşdür [14].

## Nəticə və müzakirələr

CuFeTe<sub>2</sub> monokristalları ilk dəfə Vaipolin və b. tərəfindən sintez edilmişdir [18, 19, 20]. Yetiştirilmiş kristalların rentgen analizi göstərdi ki, birləşmə elementar özəyin parametrləri  $a = 3.934 \pm 0.004 \text{ \AA}$  və  $c = 6.078 \pm 0.004 \text{ \AA}$  olan tetraqonal simmetriyaya (fəza qrupu *P4/nmm*) malikdir ki, bu da ifratkeçirici "1111" Fe-Pn birləşmələrin fəza qrupu ilə eynidir [1]. Kristal strukturu PbO strukturu ilə eyni olan, lakin Cu/Fe-Te tetrahedra arasında əlavə düyünləri olan Cu<sub>2</sub>Sb tipli defekt struktura malik olduğu bildirildi (şəkil 1). Cu və Fe atomları (qırmızı rənglə işarələnmiş)  $2a(0\ 0\ 0)$  düyünlərində yer tutur, bu atomların hər biri üçün təxminən 50% doldurulma ilə, Te atomları isə (yaşıl rənglə işarələnmiş)  $2c(0\ \frac{1}{2}\ z)$  düyünlərində yer tutur.  $[2c' - (0\ \frac{1}{2}\ z')]$  əlavə düyünləri (çəhrayı rənglə

ilə işarələnmiş) qismən 15%-dən az doldurulma ilə Cu və Fe atomları doldurur [20].



Şəkil 1. CuFeTe<sub>2</sub> maddəsinin kristal quruluşu.

Əvvəlki işdə [20], elementlərin stexiometrik nisbəti ilə hazırlanmış CuFeTe<sub>2</sub> nümunələrinin bəzələri olmadıqı aşkar edilmişdir. Bu səbəbdən nominal tərkibli Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> monokristalları yetişdirildi (sadelik üçün nümunələri “CuFeTe<sub>2</sub>” və ya CFT kimi işarə edirik).

Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> polikristalları 10<sup>-4</sup> mm c. sūt. qalıq təzyiqdə vakuumba komponentlərin birbaşa qarşılıqlı təsiri ilə ampula texnologiyası ilə sintez edilmişdir. Ampulanın divarları ilə qarşılıqlı təsirin qarşısını almaq üçün daxili divarlar pirolitik karbonla örtülmüşdür. Ərintilər soyuma zamanı müsbət istilik genişlənmə əmsalına malikdir və oksidləşmənin qarşısını almaq üçün ikiqat ampula istifadə edilmişdir. Sintez üçün əsas maddənin ən azı 99,999% saflığı olan Cu, Fe, Te elementlərindən istifadə edilmişdir. Maddə ilə dolu ampula 4-5K/dəq sürətlə 1170 K temperatúra kimi qızdırılır, bu temperaturda 2 saat saxlanılır və soba söndürülərək soyudulur. Kütləsi 30 q olan Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> monokristalları ikiqat ampulalardan istifadə edilərək istiqamətlənmiş kristallaşma yolu ilə yetişdirilmişdir. Ampulanın hərəkət sürəti 1,5 mm/saat olmuşdur. Bizim tərəfimizdən alınmış Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> monokristallarının rentgen difraksiya təhlili (rentgenostruktur analizi) göstərdi ki, birləşmə elementar özəyin  $a = 3.97 \text{ \AA}$   $c = 6.11 \text{ \AA}$  parametrləri ilə tetraqonal quruluşa malikdir (sp. gr.  $P4/nmm$ ), bu da öz növbəsində ədəbiyyat məlumatları ilə yaxşı uyğunlaşır [20].

Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> monokristalının sabit təzyiqdə  $C_p(T)$  istilik tutumunun tədqiqinin nəticələri şəkil 2-də göstərilmişdir. Şəkil 2-dən görüldüyü kimi, Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün  $C_p(T)$  asılılığında maqnit faza keçidləri üçün xarakterik olan aşkar anomalialar yoxdur.

Alınan məlumatlar Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsinin

əşağı temperaturalarda yüksək istilik tutumuna malik olduğunu göstərir. Artıq 160K temperaturda  $C_p(T)$  klassik qiymətə çatır  $C_p = 12R = 100 \frac{\text{C}}{\text{mol}\cdot\text{K}}$ . Bu onu göstərir ki, Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsində temperaturun artması ilə atomlar arasındakı kimyəvi əlaqə nəzərəcar-pacaq dərəcədə zəifləyir və əlavə olaraq, strukturun defektliliyinin istilik tutumuna əlavəsi nəzərə alınmalıdır.

Hamarlanmış  $C_p(T)$  asılılığın mütləq sifra yaxınlaşması  $C_p(T) \cong C_v(T) = \gamma T + \alpha T^3$  ifadəsi ilə həyata keçirilmişdir, burada birinci hədd Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün sərbəst elektronların istilik tutumuna əlavəsi, ikinci hədd isə qəfəs əlavəsidir.  $\alpha$  və  $\gamma$  əmsallarını  $\frac{C_p}{T}$  ifadəsinin  $T^2$ -dan asılılığının  $\left(\frac{C_p}{T} = f(T^2)\right)$  qrafikindən tapmaq olar.  $\gamma$  kəmiyyəti  $\frac{C_p}{T}(T^2)$  qrafikinin yaxınlaşmasını verən düz xəttin ordinat oxu ilə kəsişməsinin koordinatı ilə təyin edilir.

Elektron istilik tutumunun  $\gamma$  əmsalı elektron alt-sisteminin mühüm parametrini – Fermi səviyyəsində halın sıxlığını təyin etməyə imkan verir:

$$\gamma = \frac{2}{3} \pi^2 k_B^2 \left( \frac{dn}{dE} \right)_{E=E_F},$$

$k_B$ – Bolsman sabitidir.  $\alpha$  əmsalı absis oxuna nəzərən düz hissənin meyl bucağının tangensinə bərabərdir.

Bir çox birləşmələr üçün, məlum olduğu kimi [21, 22],  $C_p(T) \sim \alpha T^3$ , yəni  $T = \frac{\theta_D}{50}$ -dən əşağı temperaturalarda, qəfəsin istilik tutumuna əlavəsi Debay yaxınlaşması ilə qənaətbəxş şəkildə təsvir edilir, burada  $\theta_D$  xarakterik Debay temperaturudur. Bu halda  $C_p(T)/T$  ifadəsinin  $T^2$  asılılığından  $\left(\frac{C_p}{T} = f(T^2)\right)$  xətti hissəni ayırmaq olar, onun sifra ekstrapolyasiyası maddənin istilik tutumunun qəfəs komponentini təyin etməyə imkan verir. Lakin Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün  $C_p(T)/T$  ifadəsinin  $T^2$  asılılığında xətti hissə çox qısaydır. Bu,  $C_p(T) \sim \alpha T^3$  qanunundan kənara çıxmasını və nəticədə qəfəs rəqslərinin Debay xarakterinə malik olmadığını göstərir. Beləliklə,  $\frac{C_p}{T}(T^2)$  asılılığının qrafikinin sifra ekstrapolyasiyası bizə yalnız elektron əlavəsinin  $\gamma$  ( $\gamma \approx 0.0041 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}^2}$ ) xarakteristikasını təyin etməyə imkan verir.

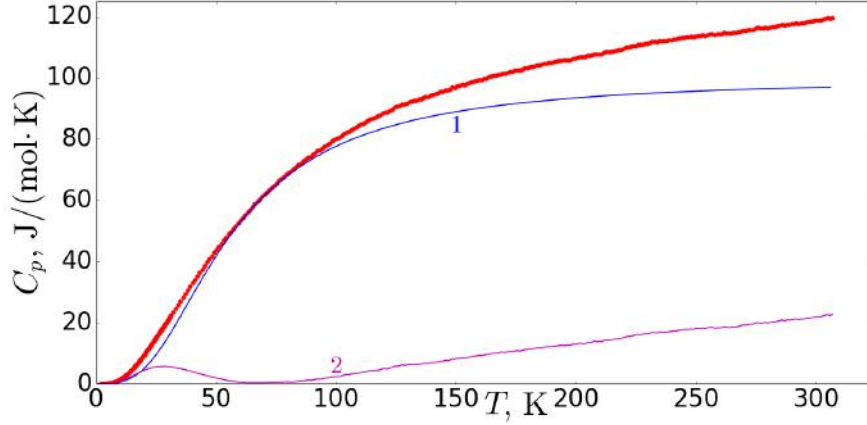
Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> maddəsinin tam istilik tutumu temperaturdan mürəkkəb şəkildə asılı olan müxtəlif əlavələrin cəmindən ibarətdir. Tədqiq olunan temperatur diapazonunun əşağı hissəsində istilik tutumu əşağıdakı kimi göstərilə bilər:  $C_p(T) = \Delta C_p + C_D$ . Burada birinci hədd müxtəlif tərkib hissələrin  $\Delta C_p(T)$  istilik tutumuna əlavəsi, ikincisi isə istilik tutumunun  $C_D$  qəfəs (Debay) komponentidir.

Şəkil 2-də 1 xətti Debay modelində  $C_D = 3nRf_D(T/\theta_D)$  istilik tutumunu göstərir, burada  $n$  formul vahidinə düşən atomların sayıdır (Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> halı üçün  $n = 4$ ),  $R$ – universal qaz sabiti və xarakterik  $\theta_D \approx 230\text{K}$  Debay temperaturu üçün hesablanmış  $f_D(T/\theta_D)$ – Debay funksiyasıdır [21, 22]

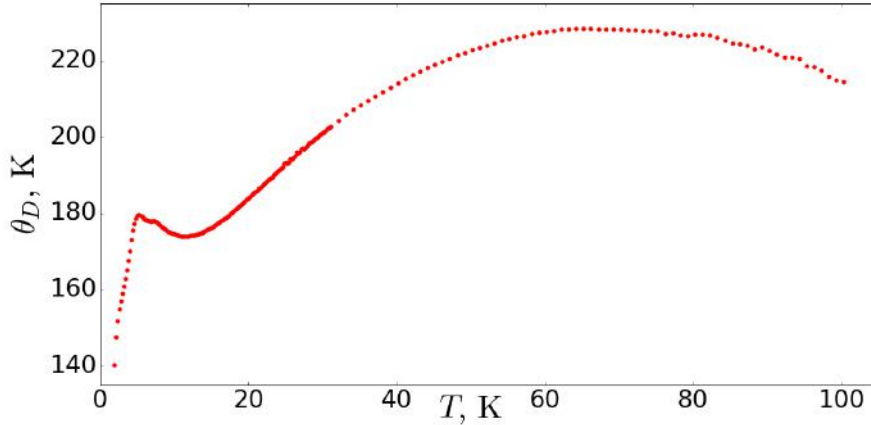
$$F_D(T/\theta_D) = 3(T/\theta_D)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 dx}{(e^x - 1)^2}.$$

$\theta_D$  parametrin qiyməti istilik tutumunun eksperimental asılılığının ən yaxşı təsviri şərtindən seçilmişdir.  $T < 50\text{K}$  və  $T > 90\text{K}$  temperaturlarında eksperimental qiymətlər Debay modeli əyrisindən yuxarıda yerləşir, bu Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> kristalının anizotropiyası

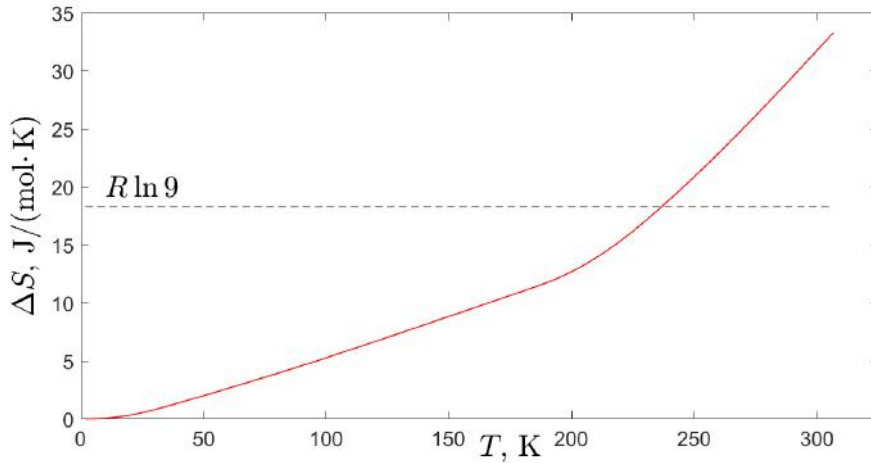
ilə əlaqədardır. Debay modelinin bir xarakterik  $\theta_D$  temperaturu ilə məhdudlaşdırılması, ilk növbədə, fonon hallarının izotrop sıxlığından istifadə etməklə yaranır [23].



Şəkil 2. Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün izobar molar istilik tutumunun  $C_p(T)$  temperaturdan asılılığı: nöqtələr – eksperimental qiymətlər, 1 – Debay modeli, 2 – istilik tutumunun  $\Delta C_p(T)$  əlavəsi.



Şəkil 3. Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün  $\theta_D(T)$  asılılığı.



Şəkil 4. Cu<sub>1.04</sub>Fe<sub>1.12</sub>Te<sub>1.84</sub> üçün  $\Delta S(T)$  artıq entropiyanın dəyişməsi.

Şəkil 3- də  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün xarakterik  $\theta_D$  temperaturun  $\theta_D(T)$  asılılığı göstərilmişdir.

$\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  kristalının  $C_p(T)$  ümumi istilik tutumundan  $C_D(T)$  Debay əlavəsini çıxmaqla, istilik tutumunun əlavə tərkib hissəsinin temperaturdan asılılığını alırıq:  $\Delta C_p(T) = C_p(T) - C_D(T)$  (şəkil .2-də 2 ayrısi).

$\Delta C_p(T)$  hissəsinə uyğun gələn entropiya,

$$\Delta S = \int_0^T \frac{\Delta C_p}{T} dT$$

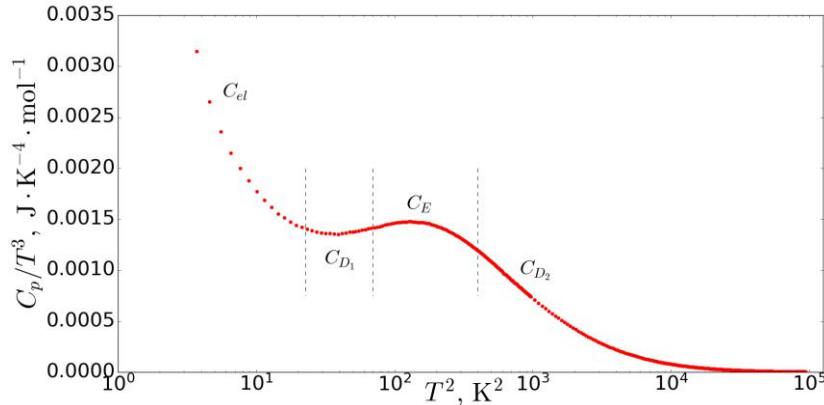
temperaturun artması ilə artır və  $T = 306.77$  K temperaturda  $\Delta S \approx 33.3 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  qiymətinə çatır (şəkil 4). Bu, maqnit nizamı pozulduqda entropiyanın dəyişməsinin  $\Delta S_{m,max}$  maksimum qiymətindən nəzərə çarpacaq dərəcədə böyükdür:  $\Delta S_{m,max} = R \ln(2J + 1) = R \ln 9 \approx 18.27 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ . Burada  $R$  qaz sabiti,  $J = 4$  isə  $\text{Fe}^{2+}$  ionu üçün elektronların tam momentinə uyğun kvant ədədidir [24, 25, 26].

Yuxarıda qeyd edildiyi kimi,  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün aşağı temperaturlarda istilik tutumunun temperaturdan asılılığının  $C_p(T) \cong C_v(T) = \gamma T + \alpha T^3$  ifadəsi ilə approksimasiyası qənaətbəxş deyil. Ola bilsin ki, bu

$\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün istilik tutumuna Eynşteyn əlavəsinin olması ilə əlaqədardır. Bu əlavəni aşkar etmək üçün  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün  $\frac{C_p(T)}{T^3}$  ifadəsinin  $T^2$  – dan asılılığını qururuq (şəkil 5).

Aşağı temperatur maksimumunun olması  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün istilik tutumuna Eynşteyn əlavəsini ( $C_E$ ) göstərir. Əlavələrin hər birinin üstünlük təşkil etdiyi temperatur intervalları aydın görünür (şəkil 5) [27, 28].  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün iki Debay əlavəsinin ( $C_{D1}, C_{D2}$ ) nəzərə alınması kristal qəfəsin mürəkkəbliyi ilə bağlıdır (burada  $C_{el}$  – istilik tutumuna elektron əlavəsidir).

[28]-də qeyd edildiyi kimi, maddənin istilik tutumunun temperaturdan asılılığının qənaətbəxş təsviri  $\theta_{D1}, \theta_{D2}, \theta_E$  xarakterik temperaturların müxtəlif dəstləri ilə Debay və Eynşteyn qatqlarının müxtəlif kombinasiyalarından istifadə etməklə əldə edilə bilər. Tədqiqatçının ixtiyarında, məsələn, spektroskopiyadan əldə edilən müxtəlif moda tezliklərinin qiymətləri olduqda yaxşıdır. Bu halda, Eynşteyn və Debay əlavələrinin mövcud birləşmə dəstindən xarakterik tezliklərin eksperimental məlumatlara daha yaxın olanı seçilir. Tədqiq olunan  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün spektroskopik məlumatlar yoxdur, bu o deməkdir ki, biz ümumi istilik tutumuna müvafiq əlavələrin təsir dərəcəsinin xarakterini müqayisə edə bilmərik.



Şəkil 5.  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün  $\frac{C_p(T)}{T^3}$  ifadəsinin  $T^2$  – dan asılılığı.

## Yekun

İlk dəfə olaraq Quantum Design PPMS (Physical Property Measurement System) kommersiya cihazında 2– 306 K intervalında  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  kristalının istilik tutumu ölçülmüşdür. İstilik tutumunun təhlili nəticəsində xarakterik Debay temperaturu ( $\theta_D \approx 230\text{K}$ ) müəyyən edilmişdir. Göstərilmişdir ki, Debay modelinin bir  $\theta_D$  xarakterik temperatur ilə məhdudlaşdırılması, ilk növbədə, fonon hallarının izotrop sıxlığından isti-

fadə etməklə yaranır.  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  üçün  $\theta_D$  xarakterik temperaturun  $\theta_D(T)$  asılılığı hesablanmışdır. Kristalların qəfəs istilik tutumunu təsvir etmək üçün istifadə edilən müxtəlif nəzəri yanaşmaların təhlili aparılmışdır.  $\Delta S$  entropiyasının temperaturla görə dəyişməsi hesablanmışdır.

Müəlliflər aşağı temperaturlarda istilik tutumunun ölçülməsində göstərdiyi köməyə görə Z. Y. Seyidova dərin minnətdarlıqlarını bildirirlər.

- [1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano and H. Hosono. Iron-Based Layered Superconductor  $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$  ( $x = 0.05-0.12$ ) with  $T_c = 26$  K, J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 3296. (<https://doi.org/10.1021/ja800073m>)
- [2] M. Rotter, M. Tegel and D. Johrendt. Superconductivity at 38 K in the Iron

Arsenide  $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$ , Phys.Rev.Lett. 2008, 101, 107006. (<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.107006>)

- [3] X.C. Wang, Q.Q. Liu, Y.Y. Lv, W.B. Gao, L.X. Yang, R.C. Yu, F.Y. Li and C.Q. Jin. The

- superconductivity at 18 K in LiFeAs system, Solid State Commun. 2008, 148, 538. (<https://doi.org/10.1016/j.ssc.2008.09.057>)
- [4] F.C. Hsu, J.Y. Luo, K.W. Yeh, T.K. Chen, T.W. Huang, P.M. Wu, Y.C. Lee, Y.L. Huang, Y.Y. Chu, D.C. Yan, and M.K. Wu. Superconductivity in the PbO-type structure  $\alpha$ -FeSe, Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2008, 105, 14262. (DOI:10.1073/pnas.0807325105) (<https://doi.org/10.1073/pnas.0807325105>)
- [5] K.W. eh, T.W. Huang, Y.L. Huang, T.K. Chen, F.C. Hsu, P.M. Wu, Y.C. Lee, Y.Y. Chu, C.L.Chen, J.Y. Luo, D.C. Yan and M.K. Wu. Tellurium substitution effect on superconductivity of the  $\alpha$ -phase iron selenide, Europhys. Lett. 2008, 84, 37002. (DOI: 10.1209/0295-5075/84/37002)
- [6] Y.Mizuguchi, F.Tomioka, S.Tsuda, T.Yamaguchi and Y. Takano. Superconductivity in S-substituted FeTe, Appl. Phys. Lett. 2009, 94, 012503. <https://doi.org/10.1063/1.3058720>
- [7] J.Guo, S.Jin, G.Wang, S.Wang, K.Zhu, T. Zhou, M. He and X. Chen. Superconductivity in the iron selenide  $\text{K}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$  ( $0 \leq x \leq 1.0$ ), Phys. Rev. B. 2010, 82, 180520. (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.180520>)
- [8] Y.J. Yan, M. Zhang, A.F. Wang, J.J.Ying, Z.Y.Li, W. Qin, X.G. Luo, J.Q. Li, J.P. Hu and X.H.Chen. Electronic and magnetic phase diagram in  $\text{K}_x\text{Fe}_2\text{Se}_2$  superconductors, Sci. Rep. 2012, 2, 212 (doi: 10.1038/srep00212).
- [9] C.H. Li, B. Shen, F. Han, X.Y. Zhu and H.H.Wen. Phys. Rev. B. 2011, 83, 184521. (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.184521>)
- [10] A.Krzton-Maziopa, Z.Sheradini, E.Pomjakushina, V.Pomjakushin, M.Bendele, A.Amato, R.Khasanov, H. Luetkens and K. Conder. J. Phys. Condens. Matter. 2011, 23, 052203. (DOI: 10.1088/0953-8984/23/5/052203)
- [11] M.H. Fang, H.D. Wang, C.H. Dong, Z.J. Li, C.M. Feng, J. Chen and H. Q. Yuan. Fe-based superconductivity with  $T_c=31$  K bordering an antiferromagnetic insulator in  $(\text{Ti,K})\text{Fe}_x\text{Se}_2$ , EPL. 2011, 94, 27009. (DOI: 10.1209/0295-5075/94/27009)
- [12] H.C. Lei, M. Abeykoon, E.S. Bozin and C. Petrovic. Phys. Rev. B. 2011, 83, 180503(R). (DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.180503>)
- [13] H. Ryu, H. Lei, B. Klobes, J.B. Warren, R.P.Hermann and C. Petrovic. PHYSICAL REVIEW B. 2015, 91, 174517. (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.174517>)
- [14] H. Lei, E.S. Bozin, K. Wang and C. Petrovic. Antiferromagnetism in semiconducting  $\text{KFe}_{0.85}\text{Ag}_{1.15}\text{Te}_2$  single crystals, Phys. Rev. B. 2011, 84, 060506(R). (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.060506>)
- [15] X. Ding, D. Fang, Z. Wang, H. Yang, J. Liu, Q. Deng, G. Ma, C. Meng, Y. Hu and H.H. Wen. Influence of microstructure on superconductivity in  $\text{K}_x\text{Fe}_{2-y}\text{Se}_2$  and evidence for a new parent phase  $\text{K}_2\text{Fe}_7\text{Se}_8$ , Nat. Commun. 2013, 4, 1897. DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms2913>
- [16] Y. Texier, J. Deisenhofer, V. Tsurkan, A. Loidl, D.S. Inosov, G. Friemel and J. Bobroff. Phys. Rev. Lett. 2012, 108, 237002. (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.237002>)
- [17] N. Lazarevic, M. Abeykoon, P.W. Stephens, H. Lei, E.S. Bozin, C. Petrovic and Z.V. Popovic. Phys. Rev. B. 2012, 86, 054503. (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.054503>)
- [18] A.A. Vaipolin, V.D. Prochukhan, Rud V. Yu and V.E. Skoriukin. Semiconducting properties of  $\text{CuFeTe}_2$ , Izv. Akad. Nauk SSSR, Inorganic Materials 1984, 20, 496-499.
- [19] A.A. Vaipolin, S.A. Kijaev, L.V. Kradinova, A.M. Polubetko, V.V. Popov, V.D. Prochukhan, Rud V. Yu and V.E. Skoriukin. Investigation of the gapless state in  $\text{CuFeTe}_2$ , J. Phys.: Condens. Mater. 1992, 4, 8035. (DOI: 10.1088/0953-8984/4/40/016)
- [20] A.M. Lamarche, J.C. Woolley, G. Lamarche, J.P. Swainson and T.M. Holden. J. Magn. Magn. Mater. 1998, 186, 121. (DOI: 10.1016/S0304-8853(97)01110-4)
- [21] Ч. Куммель. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978, 791 с.
- [22] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. Физика твердого тела (в двух томах). М., Книга по требованию, 2013, том 2, 486 с.
- [23] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика, т. V. Статистическая физика, ч. I. М., Наука, 1976, 583 с.
- [24] К.П. Белов. Магнитотепловые явления в редкоземельных магнетиках. М.: Наука, 1990. 95 с.
- [25] К.П. Белов. Магнитные превращения, М.: ФМЛ, 1959. 260 с.
- [26] Б.А. Струков, А.П. Леванюк. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. М.,Наука, 1983, 240 с.
- [27] V.V.Novikov, A.V.Morozov, A.V.Matovnikov, N.V. Mitroshenkov, D.V. Avdashchenko, S.V.Kuznetsov, B.I. Kornev, O.A. Marakhina, V.V.Novikova, E.O. Bordacheva. Journal of Alloys and Compounds. 2013, vol. 581, p. 431. (DOI: 10.1016/j.jallcom.2013.07.074)
- [28] A.P. Ramirez, G.R. Kowach. Large Low Temperature Specific Heat in the Negative Thermal Expansion Compound  $\text{ZrW}_2\text{O}_8$ . Phys. Rev. Lett. 1998, vol. 80, p. 4903. (DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.80.4903>)



**LOW-TEMPERATURE HEAT CAPACITY IN CRYSTALS  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$**

This paper presents the results of studies of the heat capacity  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  measured in the temperature interval 2 - 306K. From the dependence  $\frac{C_p}{T}(T^2)$  is calculated characteristic of the electronic contribution to heat capacity  $\gamma$  ( $\gamma \approx 0.0041 \frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}^2}$ ). As a result of the heat capacity analysis, the Debye characteristic temperature was determined ( $\theta_D \approx 230\text{K}$ ). The parameter  $\theta_D$  is selected from the condition of the best description of the experimental dependence of the heat capacity. It is shown that the boundedness of the Debye model with one characteristic temperature  $\theta_D$  is primarily caused by the use of the isotropic density of phonon states. The dependence of the characteristic temperature  $\theta_D(T)$  is calculated for  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$ . The analysis of various theoretical approaches used to describe the lattice heat capacity of crystals has been carried out. To detect different contributions to the heat capacity, the dependence  $\frac{C_p(T)}{T^3}$  on  $T^2$  for  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  was constructed. The presence of a low-temperature maximum indicates the Einstein contribution ( $C_E$ ) to the heat capacity of  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$ . The introduction into consideration of two Debye contributions ( $C_{D1}, C_{D2}$ ) is due to the complexity of the  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  crystal lattice. Thus, a satisfactory description of the temperature dependence of the heat capacity of  $\text{Cu}_{1.04}\text{Fe}_{1.12}\text{Te}_{1.84}$  can be achieved using various combinations of Debye and Einstein contributions with different sets of characteristic temperatures  $\theta_{D1}, \theta_{D2}, \theta_E$ . Calculated temperature changes of entropy.