

50-я научная конференция МФТИ
Факультет проблем физики и энергетики
Секция физики микроволн и наноматериалов

УДК

Туктабеев М.А.

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Сжимаемость и полиморфизм AsS при высоком давлении

Моносulfид мышьяка As_4S_4 имеет молекулярную структуру. При атмосферном давлении существует ряд модификаций As_4S_4 : реальный, парареальный, высокотемпературная β -фаза и промежуточная χ -фаза, возникающая при превращении реального-парареального. Подробный анализ структур и кинетики превращений дан в [1]. Все эти фазы имеют молекулярную структуру и кристаллизуются в моноклинной сингонии с очень близкими значениями плотности. При высоком давлении и высокой температуре найдены новые фазы [2, 3].

В данной работе проведены исследования структуры реального при давлении до 79 кбар при комнатной температуре. Были выполнены рентгеновские исследования методом энерго-дисперсионного анализа. Эксперименты проводились в многопуансонном аппарате. Значения давлений вычислялись по уравнению состояния NaCl.

Для обработки экспериментальных данных была написана программа индексирования ячеек разной симметрии, включая моноклинную. В результате были получены значения параметров элементарной ячейки при давлениях от атмосферного до 55,6 кбар и вычислены их объёмы (рис. 1). Аппроксимируя экспериментальные данные уравнением Мурнагана

$$V = V_0 \left(1 + P \frac{B'_0}{B_0} \right)^{-\frac{1}{B'_0}},$$

вычислены значения модуля $B_0 = 81,0 \pm 4,0$ кбар и его производной $B'_0 = 9,0 \pm 0,4$. Сравнение с близким по составу соединением β - As_4S_3 ($B_0 = 170$ кбар, $B'_0 = 5,5$ [4]) указывает на значительное различие в сжимаемости этих молекулярных соединений.

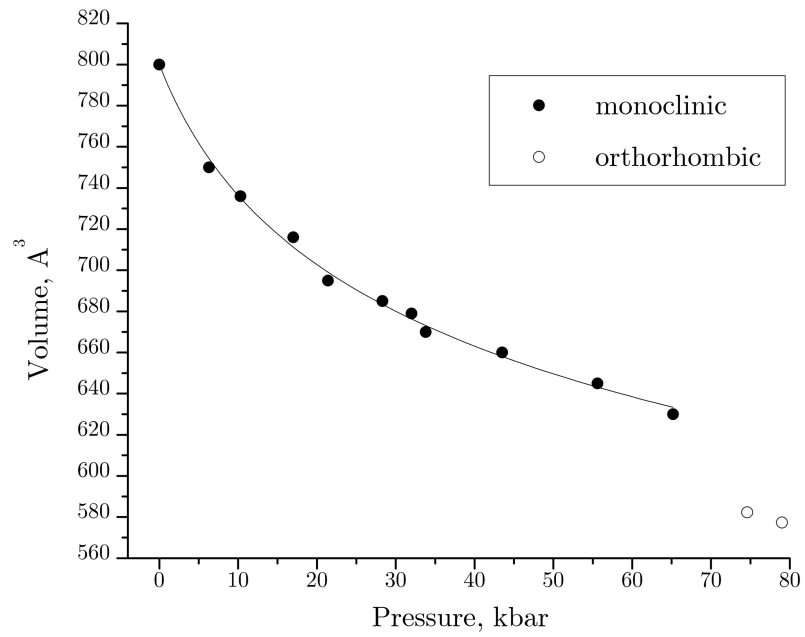


Рис. 1. Зависимость объёма элементарной ячейки As_4S_4 от давления

Рентгеновские спектры, полученные при давлениях выше 74 кбар, заметно отличаются от спектров моноклинного реалъгара. Это дало основание предположить наличие полиморфного перехода из моноклинной системы в орторомбическую с близкими параметрами a , b , c элементарной ячейки. Такой переход сопровождается небольшим уменьшением объёма $\Delta V/V_0 = 0,06$. По-видимому молекулярная структура при этом сохраняется.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bonazzi P., Menchetti S., Pratesi G., Muniz-Miranda M., Sbrana G.* Light-induced variation in realgar and β -As₄S₄: X-ray diffraction and Raman studies // *American Mineralogist*. — 1996. — V. 81. — P. 874–880.
 2. *Тимофеева Н.В., Виноградова Г.З., Фекличев Е.М., Аполлонов В.Н., Калашников Я.А., Дембовский С.А., Свинтицкий В.Е.* Изучение стеклообразующих систем As-S и As-Se при высоких давлениях и температурах // *Современные проблемы физической химии*. — Изд-во МГУ, 1972. — Т. 6.
 3. *Hinze E., Lauterjung J.* P-T-diagram in the AsS system // *High Pressure Research*. — 1990. — V. 4. — P. 324–326.
 4. *Chattopadhyay T., Werner A., Schnering H.* Thermal expansion and compressibility of β -As₄S₃ // *J. Phys. Chem. Solids*. — 1982. — V. 43. — P. 919–923.
-

Представленная выше версия доклада является ознакомительной.

Версию доклада, предназначенную для печати,
можно найти в факультетском сборнике трудов конференции.
Электронные материалы конференции публикуются по адресу
http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/