

Влияние высокого давления на кристаллическую структуру и свойства теллуридов сурьмы и висмута

*Н. Р. Серебряная^{1,2}, Е. В. Татьяна², И. А. Круглов^{1,2}, Н. А. Львова^{1,2}, С. Г. Буга^{1,2},
В. Д. Бланк^{1,2}*

¹Московский физико – технический институт (государственный университет)

²Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов

Теллуриды сурьмы (Sb_2Te_3) и висмута (Bi_2Te_3) являются основными термоэлектрическими материалами с высоким коэффициентом добротности ZT. В поисках новых термоэлектрических преобразователей мы обратили внимание на повышение добротности при воздействии высокого давления. Поэтому нами были синтезированы метастабильные фазы теллурида сурьмы Sb_2Te_{3-m} и тройного соединения $Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te_{3-m}$ в камере высокого давления типа «тороид» закалкой под давлением 4 ГПа при температуре 400 – 850 °С [1]. Моноклинная $C2/m$ структура этих фаз была определена методом электронной дифракции и полнопрофильного анализа порошковых дифрактограмм. Ранее было обнаружено, что при высоком давлении *in situ* в алмазной камере обнаружены новые полиморфные β - фазы теллуридов сурьмы и висмута [2]. Нами было показано, что структуры метастабильных фаз Sb_2Te_3 и $Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te_3$ почти совпадают с моноклинной $C2/m$ структурой β - фаз. Таким образом, мы сохранили фазы высокого давления теллуридов при нормальных условиях. В теллуриде висмута (Bi_2Te_3) нами была также обнаружена метастабильная фаза Bi_2Te_{3-m} , в структуре которой теряется центр симметрии ($R\bar{3}m \rightarrow R3m$) и изменяется порядок чередования слоев. Используя метод дифференциальной сканирующей калориметрии, в Sb_2Te_3 были обнаружены два экзотермических пика, что свидетельствует о наличии еще одной метастабильной $C2/m$ фазы с углом моноклинного искажения $\beta = 90,15^\circ$. Особенности метастабильных фаз, координационные полиэдры атомов сурьмы и висмута и типы химических связей в полученных соединениях были изучены в данной работе. Расчеты кристаллической структуры из первых принципов подтверждают неравновесность обсуждаемых в этой работе фаз. Электрическое сопротивление и коэффициент Холла были измерены в диапазоне температур от 77 К до 450 К. Подвижность и концентрация носителей заряда были вычислены. В обеих метастабильных фазах проявляется металлический тип проводимости. Отжиг полученных образцов при 400 °С в течение 2.5 часов возвращает их кристаллическую структуру в исходную ромбоэдрическую.

Литература

1. Buga S. G., Serebryanaya N. R., Dubitskiy G. A., Semenova E. E., Aksenkov V. V., Blank V. D. Structure and electrical properties of Sb_2Te_3 and $\text{Bi}_{0,4}\text{Sb}_{1,6}\text{Te}_3$ metastable phases obtained by HPHT treatment. - High Pressure Research. – 2011. – V. 31. - No. 1. - P. 86 – 90.
2. Zhao J., Liu H., Ehm L., Chen Z., Sinogeikin S., Zhao Y., Gu G. Pressure-induced disordered substitution alloy in Sb_2Te_3 . - Inorganic Chemistry. – 2011. - V.50 – P. 11291-11293.