

**Синтез и физические свойства новой метастабильной фазы  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$** <sup>1,2</sup>Н. Н. Елисеев, <sup>1,2</sup>Н.Р. Серебряная, <sup>1,2</sup>С.Г. Буга<sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов»

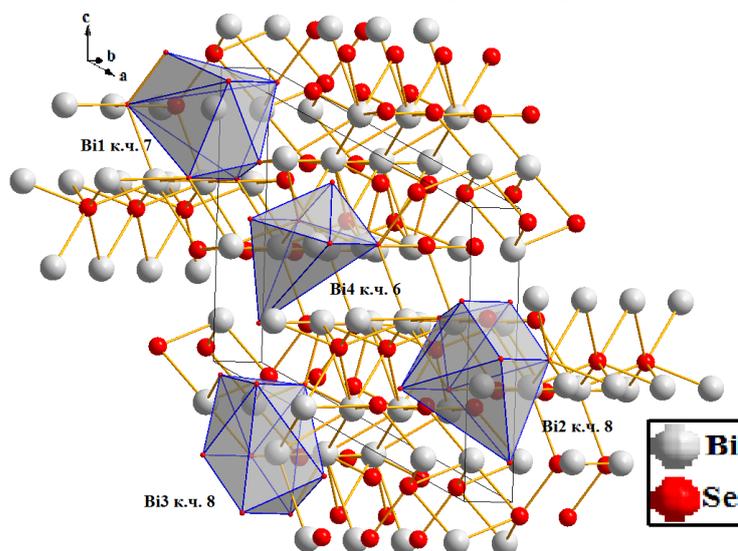
Синтезирована новая метастабильная фаза  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  (m- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ), сохраняющаяся в обычных условиях после воздействия высоких давлений ( $4 \div 7.7$  ГПа) и высоких температур ( $400 \div 1200^\circ\text{C}$ ). Для проведения синтеза использовалась аппаратура высокого давления типа «наковален с лункой». Проведены исследования кристаллической структуры и термоэлектрических свойств новой фазы, получена температурная зависимость электрического сопротивления. Измерен коэффициент Зеебека.

Основным методом исследования был метод рентгеноструктурного анализа (метод порошка). Для определения кристаллической структуры образцов, полученных после воздействия высокого давления и высокой температуры, использовался метод полнопрофильного анализа (метод Ритвельда) [1].

При постоянном давлении с возрастанием температуры синтеза обнаружено последовательное изменение дифрактограмм образцов. При более низкой температуре ( $400^\circ\text{C}$ ) наблюдается новая метастабильная фаза с неупорядоченной структурой и с широкими дифракционными пиками, которые с возрастанием температуры расщепляются на узкие отдельные отражения, при этом широкие области частичной аморфизации сохраняются. Происходит упорядочивание структуры в дальнем порядке, увеличивается область когерентного рассеивания, т.е. структура детализируется с повышением температуры.

Уточнена кристаллическая структура метастабильной фазы m- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , синтезированной при  $P=7.7$  ГПа и  $T=400^\circ\text{C}$ . В качестве исходной модели к которой была взята моноклинная структура фазы высокого давления  $\text{Tm}_2\text{S}_3$  с пространственной группой  $P2_1/m$  [2]. Для структуры новой фазы определены параметры элементарной ячейки и координаты атомов. Структура m- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  слоистая; координационные числа атомов металла – 6, 7, 8; координационные многогранники образуют колонны с общими ребрами вдоль короткой оси «b». Главным отличием структуры новой фазы является уменьшение расстояния между атомами металла и уменьшение межслоевого расстояния.

Метастабильная фаза m- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  является полупроводником, в которой, по сравнению с исходной фазой  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны.



Структуре фазы m- $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  с выделенными координационными многогранниками висмута.

**Литература**

1. *Rietveld H.M.* A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures // *J. Appl. Cryst.*, 1969. № 2, P. 65-71
2. *Klaus-Jürgen Range und Richard Lee* Darstellung und Kristallstruktur der Hochdruckphase  $\text{Tm}_2\text{S}_3$ -II // *Zeitschrift für Naturforschung B*, 1976. V. 31, I. 3, P. 311-314.