

УДК 541.6.541.49

**XANES СТРУКТУРЫ РЕНТГЕНОВСКИХ К-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ХРОМА $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ И MCrX_2** **Е.В. Коротаев¹, В.В. Канажевский^{2,3}, Н.Н. Перегудова¹, М.М. Сыроквашин¹,
Л.Н. Мазалов^{1,2}, В.В. Соколов¹, И.Ю. Филатова¹, А.Ю. Пичугин¹**¹Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: korotaev@niic.nsc.ru, syrokvashin@niic.nsc.ru

²Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, Россия³Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск, Россия

Статья поступила 2 апреля 2016 г.

В работе экспериментально и теоретически исследованы рентгеновские К-спектры поглощения дихалькогенидов хрома $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($\text{M}' = \text{V}, \text{Fe}; x = 0\text{—}0,40$) и MCrX_2 ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Na}; \text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$). Сопоставление тонких структур рентгеновских К-спектров поглощения (XANES), полученных экспериментально с использованием источника синхротронного излучения, и теоретических спектров поглощения, моделированных в программном пакете FDMNES, позволило изучить влияние видов интеркалата М, халькогена Х, а также влияние катионного замещения атомов хрома атомами ванадия и железа на структуры К-спектров поглощения элементов в $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ и MCrX_2 .

DOI: 10.15372/JSC20160708

Ключевые слова: катион-замещенные дихалькогениды хрома, твердые растворы, термоэлектрические материалы, XANES спектроскопия, FDMNES, метод конечных разностей.

ВВЕДЕНИЕ

Дихалькогениды хрома MCrX_2 ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Na}; \text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) в настоящее время рассматриваются в качестве перспективных материалов для современной электроники. Данные материалы обладают рядом свойств, перспективных для практического применения: ионная проводимость [1—3], термоэлектрические свойства [4—6], магнитные свойства [7], колоссальное магнетосопротивление, фазовый переход металл—диэлектрик [8, 9].

Кристаллическую структуру дихалькогенидов MCrX_2 можно рассматривать как совокупность чередующихся слоев CrX_2 , между которыми в области так называемого ван-дер-ваальсова промежутка в различных кристаллографических позициях располагаются атомы металла М. Отдельный слой CrX_2 можно рассматривать как плоскую полимерную молекулу $\{\text{CrX}_2\}_n$ ($n \rightarrow \infty$). Наличие незанятых кристаллических позиций между слоями $\{\text{CrX}_2\}_\infty$ дает возможность сравнительно легко заполнять их атомами различного рода. Внедренные атомы способны создавать каналы проводимости, перемещаясь между занятыми и незанятыми кристаллографическими позициями. Необходимо отметить, что в силу неустойчивости атома хрома в состоянии Cr^{4+} в дихалькогенидных слоях $\{\text{CrX}_2\}_n$ невозможно получить стабильные дихалькогениды CrX_2 . По этой причине обычно работают со стабильными интеркалированными соединениями

на основе матриц CrX_2 . Подобные соединения получают путем введения в дихалькогенидную матрицу ионов электроположительных элементов M , которые, находясь в межслоевом пространстве, образуют интеркалированные соединения типа $(M)^+[\text{CrX}_2]^-$ ($M = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$ и др.).

Существует несколько способов целенаправленного управления электрическими и магнитными свойствами дихалькогенидов хрома $M\text{CrX}_2$: катионное замещение атомов хрома атомами ванадия, железа, марганца ($\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$, $M' = \text{V}, \text{Fe}, \text{Mn}$ [1, 2]), совместное интеркалирование (например, серебром в случае $\text{Cu}_{1-x}\text{Ag}_x\text{CrS}_2$ [3]), изменение вида халькогена (CuCrX_2 , $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ [4]). При этом определяющее значение для получения материалов с требуемыми свойствами имеет характер распределения атомов по кристаллографическим позициям в кристаллической решетке, который существенно зависит от технологии получения образцов [10, 11]. В этой связи для характеристики получаемых дихалькогенидов целесообразным является использование физических методов исследования, чувствительных к характеру локального окружения атомов. В качестве такого метода может быть использован метод XANES спектроскопии (XANES — X-ray Near Edge Structure).

В настоящей работе рассматриваются вопросы влияния катионного замещения атомов хрома, вида интеркалата и халькогена на ближнюю тонкую структуру рентгеновских K -спектров поглощения элементов в $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ и $M\text{CrX}_2$ ($M = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Na}$; $X = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$).

СИНТЕЗ ОБРАЗЦОВ

Катион-замещенные дисульфиды $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$. Образцы дисульфидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0—0,40$) синтезированы из оксидов переходных металлов чистотой 99,99 %. В качестве сульфидирующей смеси были использованы продукты термического разложения NH_4CNS , в качестве газа-носителя — высокочистый аргон. Смесь оксидов помещали в стеклоуглеродном контейнере в кварцевую трубу, из которой потоком аргона и продуктами разложения роданида аммония вытесняли воздух, после чего осуществляли нагрев смеси до температур 800—1000 °С. Во время синтеза трижды перетирали шихту. Полноту сульфидирования контролировали с помощью взвешивания реакционной смеси до постоянства веса и методом рентгенофазового анализа. Общая продолжительность синтеза составляла ~50 ч.

Интеркалированные дихалькогениды $M\text{CrX}_2$. Образец дисульфида серебра-хрома AgCrS_2 синтезирован из AgCl и Cr_2O_3 по методике, аналогичной методике получения образцов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$. Температура синтеза составляла 600—900 °С, время синтеза ~18 ч.

Диселенид меди-хрома CuCrSe_2 был получен из чистых элементов (99,99 %). Синтез осуществляли в двухсекционной кварцевой запаянной ампуле до температур 900—950 °С. Время синтеза составляло ~20 ч.

Диоксид CuCrO_2 получали из стехиометрической смеси оксидов Cu_2O и Cr_2O_3 чистотой 99,99 %, которую спекали в кварцевой запаянной ампуле при температуре 700—950 °С. Время синтеза составляло ~10 ч.

Аттестацию образцов $M\text{CrX}_2$ проводили методом рентгенофазового анализа на дифрактометре ДРОН-3.

Синтезированные по вышеприведенным методикам образцы $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ и $M\text{CrX}_2$ представляют собой порошки со средним размером зерна ~5—25 мкм.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ

Для моделирования XANES структур K -спектров поглощения элементов в данной работе использовали программный пакет FDMNES, в котором для решения уравнения Шредингера в узлах кристаллической решетки используется метод конечных разностей (Finite-Difference Method for Near Edge Structure [12, 13]).

При моделировании спектра поглощения рассматривалось состояние атома с электронной вакансией (дыркой) на орбитали, соответствующей начальным состояниям, и дополнительным электроном на нижней свободной орбитали. Размер кластера, включающего поглощающий

атом, при проведении расчетов составлял 6 Å. В качестве обменно-корреляционного потенциала был использован потенциал Хедина—Ланквиста. Моделирование XANES спектров поглощения выполнено в дипольном приближении.

При проведении расчетов для матриц дихалькогенидов $M\text{CrX}_2$ использовали кристаллографические данные из базы данных "Структуры неорганических кристаллов" (ICSD) [14]. Для моделирования спектров поглощения катион-замещенных дисульфидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($M' = \text{V}, \text{Fe}; x = 0,33$) один из трех атомов хрома в кристаллической ячейке дисульфида был заменен на атом ванадия или железа, параметры кристаллической ячейки были получены из данных рентгенофазового анализа. При моделировании спектров поглощения атомов меди и ванадия, расположенных в октаэдрических позициях ван-дер-ваальсова промежутка CuCrS_2 , были использованы данные работы [10].

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Спектры поглощения элементов в исследуемых образцах получены по стандартной технике "на пропускание" с использованием синхротронного излучения на накопителе ВЭПП-3 Сибирского центра синхротронного и терагерцового излучения (Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск).

Катион-замещенные дисульфиды $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0—0,40$), полученные на основе CuCrS_2 , являются одной из часто используемых модельных систем, позволяющей исследовать влияние катионного замещения атомов хрома в слоях CrS_2 на физико-химические свойства дихалькогенидов $M\text{CrX}_2$ [1, 2, 8, 9]. В работах [10, 11] показано, что особенности технологии синтеза могут приводить к возможности нахождения атомов меди в CuCrS_2 в различных кристаллографических позициях межслоевого промежутка, соответствующих тетраэдрическому и октаэдрическому окружению атомов меди. В случае катион-замещенных дисульфидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ по данным [1] замещение атомов хрома атомами ванадия также влияет на вероятность распределения атомов меди по тетраэдрическим и октаэдрическим позициям. Согласно работам [1, 10], ионная проводимость $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ при $T > 400$ °С связана с увеличением вероятности расположения атомов меди в октаэдрических позициях. В связи с этим было проведено моделирование структур XANES спектров поглощения меди в программном пакете FDMNES.

Экспериментальные спектры поглощения являются искаженными за счет наличия аппаратного уширения и наличия ширины внутреннего уровня ($\Delta E_k(\text{Cu}) = 1,3$, $\Delta E_k(\text{Cr}) = 0,84$, $\Delta E_k(\text{V}) = 0,79$, $\Delta E_k(\text{S}) = 0,57$, $\Delta E_k(\text{Se}) = 2,20$ эВ [15]). По этой причине было проведено исправление экспериментальных спектров. Одним из наиболее простых и многократно апробированных методов исправления формы спектров является метод столбиков [16, 17]. Экспериментальные K -спектры поглощения меди катион-замещенных дисульфидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ представлены на рис. 1, а, на рис. 1, б — результаты исправления формы соответствующих спектров с помощью метода столбиков на ширину внутреннего уровня и ширину функции аппаратного искажения. Сопоставление рис. 1, а и б показывает, что исправление спектров позволило выявить особенности тонкой структуры K -спектров поглощения меди $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0—0,40$).

Поскольку имеется информация о возможном расположении атомов меди в тетраэдрических и октаэдрических позициях ван-дер-ваальсова промежутка, было проведено моделирование структур XANES спектров для атомов меди в соответствующих типах окружения (см. рис. 1, в). Сопоставление структур XANES спектров, полученных с помощью FDMNES, и экспериментальных K -спектров поглощения CuCrS_2 и $\text{CuCr}_{0,60}\text{V}_{0,40}\text{S}_2$, исправленных на ширину функции аппаратного искажения и ширину внутреннего уровня, свидетельствует о расположении атомов меди в тетраэдрических позициях. Подобие структур K -спектров поглощения меди для исходного CuCrS_2 и твердых растворов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ указывает на то, что характер локального окружения атомов меди при катионном замещении сохраняется. На основании анализа структуры экспериментальных рентгеновских K -спектров поглощения меди в $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ ($x = 0—0,40$) и теоретических XANES спектров меди в CuCrS_2 , $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ и $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ можно сделать вывод о том, что катионное замещение атомов хрома в дихалькогенидных слоях существенно

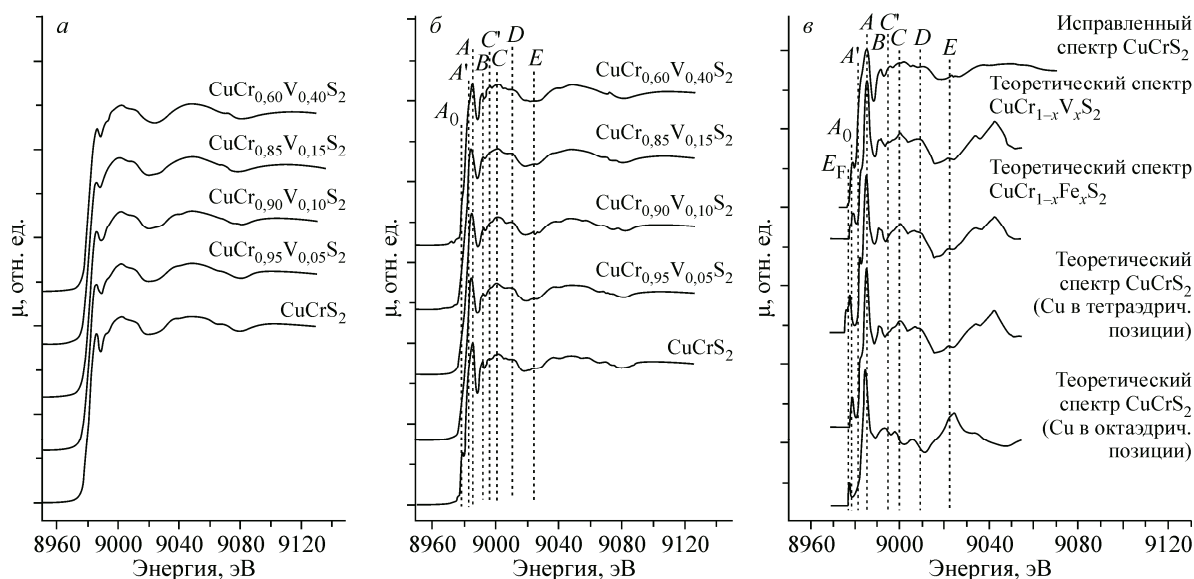


Рис. 1. Рентгеновские K -спектры поглощения меди в дисульфидах $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$: экспериментальные спектры (а), исправленные с помощью метода столбиков спектры (б), сопоставление экспериментальных и теоретических спектров (в)

не сказывается на структуре главных K -спектров поглощения атомов элементов, расположенных в области ван-дер-ваальсова промежутка.

Наличие незанятых кристаллографических позиций в пределах ван-дер-ваальсова промежутка может приводить к тому, что часть атомов V (или Fe), внедряемых в исходную матрицу CuCrS_2 , располагается не в октаэдрических позициях в пределах CrS_2 -слоев, а занимает соответствующие кристаллографические позиции в межслоевых промежутках $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($\text{M}' = \text{V}, \text{Fe}$). Внедрение части атомов ванадия в октаэдрические позиции ван-дер-ваальсова промежутка в работе [18] рассматривается в качестве одного из возможных механизмов увеличения ионной проводимости твердых растворов $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$. Ранее нами было показано, что при проведении катионного замещения атомов хрома атомами ванадия наблюдается подобие спектров поглощения хрома и ванадия, а также сохранение всех основных особенностей структуры рентгеновских K -спектров поглощения хрома и ванадия по мере увеличения концентрации ванадия [19, 20]. Моделирование структур рентгеновских K -спектров поглощения для $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($\text{M}' = \text{V}, \text{Fe}$) подтверждает, что при катионном замещении структура рентгеновских K -спектров поглощения атомов ванадия и железа соответствует структуре спектров замещаемых атомов хрома (рис. 2, а). При проведении моделирования структуры спектров поглощения также рассматривали случай внедрения атомов ванадия в октаэдрические позиции межслоевых промежутков. Полученные в рамках данной модели теоретические структуры K -спектров поглощения ванадия не согласуются со структурой экспериментальных спектров поглощения (см. рис. 2, а), что позволяет сделать вывод о том, что атомы ванадия в исследуемых образцах расположены в октаэдрических позициях слоев CrS_2 .

Исследование влияния катионного замещения на XANES структуру K -спектров поглощения серы в халькогенидах $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ было осуществлено на основании моделирования тонкой структуры XANES спектров серы. Сопоставление теоретических K -спектров поглощения серы в CuCrS_2 , $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ и $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ (см. рис. 2, б) показало, что катионное замещение атомов хрома в дихалькогенидных слоях не оказывает существенного влияния на структуру XANES спектров серы.

Интеркалированные дисульфиды хрома MCrS_2 . В данной работе было проведено моделирование XANES структуры K -спектров поглощения атомов интеркалата, расположенных в ван-дер-ваальсовом промежутке для дисульфидов MCrS_2 ($\text{M} = \text{Na}, \text{Cu}, \text{Ag}$). В случае дисуль-

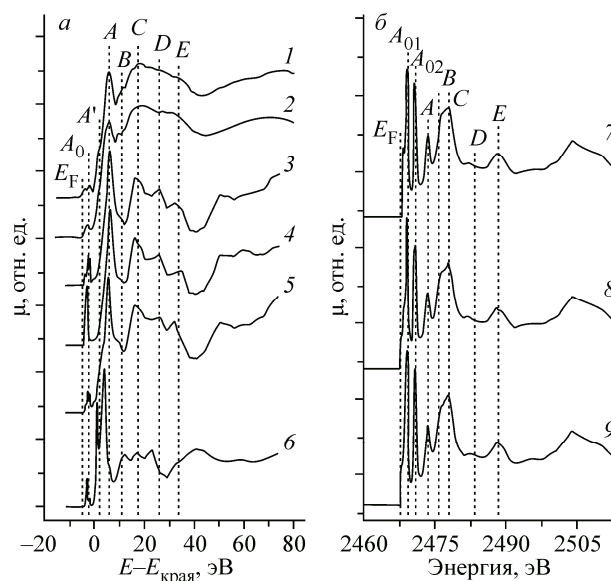


Рис. 2. Экспериментальные и модельные теоретические рентгеновские K -спектры поглощения хрома, ванадия, железа (a) и серы (b) в дисульфидах $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$: экспериментальные рентгеновские спектры поглощения хрома в CuCrS_2 (1) и $\text{CuCr}_{0,60}\text{V}_{0,40}\text{S}_2$ (2), теоретические спектры поглощения хрома в CuCrS_2 (3), железа в $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ (4), ванадия в $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ при замещении атомов хрома атомами ванадия (5) и в случае расположения атомов ванадия в межслоевых промежутках (6), теоретические спектры поглощения серы в CuCrS_2 (7), $\text{CuCr}_{1-x}\text{V}_x\text{S}_2$ (8) и $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{S}_2$ (9)

фида NaCrS_2 атомы натрия занимают октаэдрические позиции в ван-дер-ваальсовом промежутке (пр. гр. $R-3m$ [14]). Это позволяет ожидать, что XANES структуры K -спектров поглощения натрия существенно отличаются от спектров поглощения меди и серебра в CuCrS_2 и AgCrS_2 . Вместе с тем дисульфиды CuCrS_2 и AgCrS_2 с точки зрения пространственного строения являются более "эквивалентными" друг другу: атомы меди и серебра в данных соединениях занимают тетраэдрические позиции в ван-дер-ваальсовом промежутке (пр. гр. $R3m$ [14]). Исходя из этого, можно сделать предположение о том, что тонкая структура K -спектров поглощения меди и серебра в данных соединениях подобна. Однако сопоставление теоретических K -спектров поглощения интеркалированных дисульфидов MCrS_2 ($M = \text{Na}, \text{Cu}, \text{Ag}$) показало, что спектры поглощения атомов, расположенных в межслоевых промежутках, имеют существенные различия (рис. 3, a). Необходимо отметить, что энергетические положения особенностей A_0 — D K -спектра поглощения меди в CuCrS_2 коррелируют с энергетическими положениями соответствующих особенностей K -спектра поглощения меди в AgCrS_2 .

Таким образом, на основании полученных результатов можно предположить, что при проведении соинтеркалирования дихалькогенидных матриц $[\text{CrX}_2]$ атомами различных химических элементов структуры соответствующих спектров поглощения будут отличаться.

Теоретические и экспериментальные рентгеновские K -спектры поглощения хрома MCrS_2 ($M = \text{Na}, \text{Cu}, \text{Ag}$) представлены на рис. 3, b . Для соединений CuCrS_2 и AgCrS_2 наблюдается хорошее согласие между теоретическими и экспериментальными спектрами. Сопоставление структур K -спектров поглощения хрома в MCrS_2 позволяет заключить, что при изменении вида интеркалата основные особенности тонкой структуры K -спектров хрома сохраняются. Это связано с подобием характера локального окружения атомов хрома в данных соединениях: атомы хрома в октаэдрических позициях в окружении шести атомов серы.

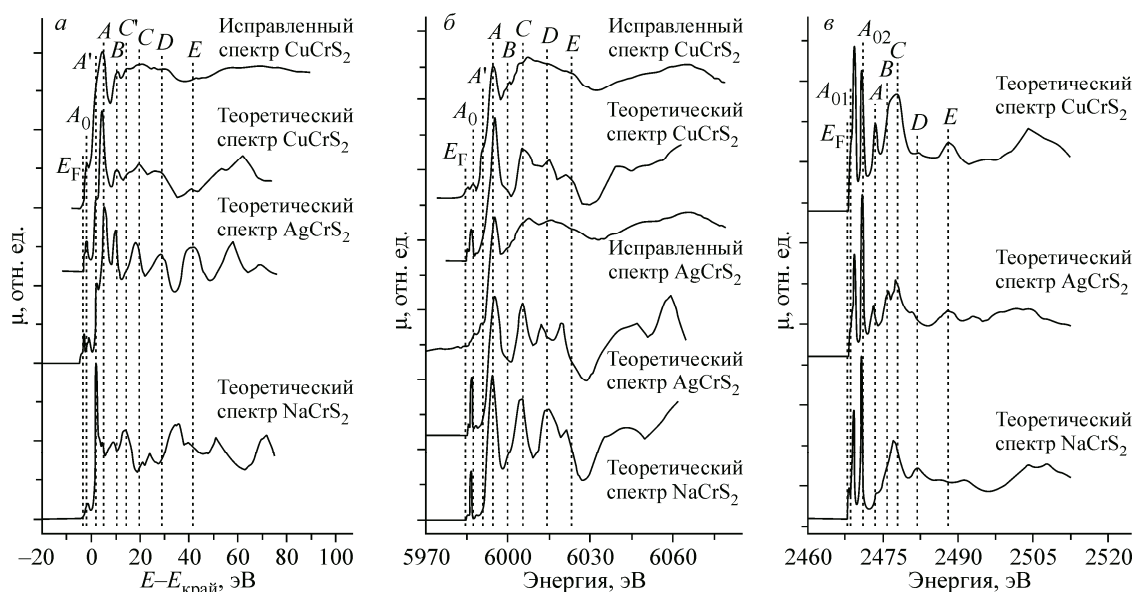


Рис. 3. Экспериментальные и модельные теоретические рентгеновские K -спектры поглощения атомов интеркалата (а), хрома (б) и серы (в) в дисульфидах MCrS_2 ($M = \text{Na}, \text{Cu}, \text{Ag}$)

Сопоставление структур теоретических K -спектров поглощения серы для дисульфидов MCrS_2 ($M = \text{Na}, \text{Cu}, \text{Ag}$), представленных на рис. 3, в, показывает, что основные особенности тонкой структуры K -спектров серы сохраняются для всего набора данных соединений. В случае дисульфида NaCrS_2 наблюдается уменьшение интенсивности особенностей A , B и E K -спектров поглощения серы в сравнении со спектрами CuCrS_2 и AgCrS_2 . Это может быть связано с различным пространственным расположением атомов интеркалата в NaCrS_2 (октаэдрические позиции) и CuCrS_2 , AgCrS_2 (тетраэдрические позиции).

Интеркалированные дихалькогениды меди-хрома CuCrX_2 . Проведенные исследования теоретических и экспериментальных рентгеновских K -спектров поглощения элементов в интеркалированных дихалькогенидах CuCrX_2 ($X = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) показали, что изменение вида халькогена существенно влияет на тонкую структуру XANES спектров меди (рис. 4, а) и хрома (см. рис. 4, б). Различия в структуре K -спектров поглощения хрома и меди для CuCrO_2 так же, как и в рассмотренном ранее случае NaCrS_2 , объяснимы с точки зрения пространственного строения (пр. гр. $R-3m$ [14]). Исходя из структурных данных, можно было ожидать, что K -спектры поглощения меди, а также хрома в случае CuCrS_2 и CuCrSe_2 подобны. Однако изменение вида халькогена влияет на структуру спектров значительно, чем в рамках данной простой геометрической модели.

Теоретические XANES спектры халькогенов интеркалированных дихалькогенидов CuCrX_2 ($X = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) представлены на рис. 4, в. Тонкая структура рентгеновских K -спектров поглощения дихалькогенидов CuCrS_2 и CuCrSe_2 подобна, однако особенности B – E K -спектра поглощения селена для CuCrSe_2 смещены в область больших энергий относительно соответствующих особенностей K -спектра поглощения серы в CuCrS_2 . Соответствие структур спектров поглощения серы и селена может быть объяснено с точки зрения подобия локального окружения халькогенов в дихалькогенидах CuCrS_2 и CuCrSe_2 . Структура K -спектра поглощения кислорода в CuCrO_2 существенно отличается от структуры спектров поглощения серы и селена в CuCrS_2 и CuCrSe_2 .

Проведенные исследования показали, что из всех вышерассмотренных способов направленного изменения свойств соединений на основе дихалькогенидов хрома (катионное замещение, изменение вида интеркалата и халькогена) наиболее существенное влияние на XANES структуру K -спектров поглощения элементов в MCrS_2 оказывает изменение вида халькогена.

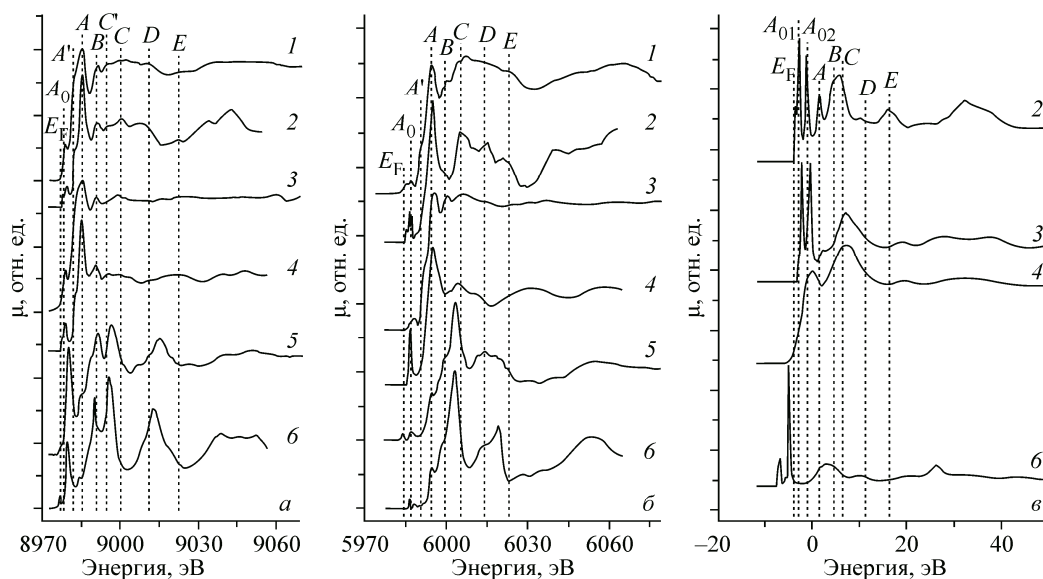


Рис. 4. Экспериментальные и модельные теоретические рентгеновские K -спектры поглощения меди (a), хрома (b) и халькогенов (c) в дихалькогенидах CuCrX_2 : экспериментальный рентгеновский K -спектр поглощения CuCrS_2 (1), теоретический XANES спектр CuCrS_2 (2), экспериментальный рентгеновский K -спектр поглощения CuCrSe_2 (3), теоретический XANES спектр CuCrSe_2 (4), экспериментальный рентгеновский K -спектр поглощения CuCrO_2 (5), теоретический XANES спектр CuCrO_2 (6)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе проведено комплексное теоретическое и экспериментальное исследование влияния катионного замещения, изменения типа интеркалата и изменения вида халькогена на XANES структуры рентгеновских K -спектров поглощения элементов в дихалькогенидах $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($\text{M}' = \text{V}, \text{Fe}, x = 0\text{—}0,40$), MCrS_2 ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}$) и CuCrX_2 ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$). Показано, что при катионном замещении атомов хрома атомами ванадия и железа в рассматриваемом интервале концентраций замещающих атомов сохраняются все особенности тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения меди, хрома и серы дихалькогенидов $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$, а структура K -спектров поглощения замещающих атомов M' подобна структуре K -спектров поглощения хрома в дисульфидных слоях $[\text{CrS}_2]^-$. Изменение атомов интеркалата в области ван-дер-ваальсова промежутка существенно влияет лишь на структуру спектров поглощения самого интеркалата, в то время как XANES спектры хрома и серы для различных дихалькогенидов MCrS_2 ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}$) подобны. Изменение вида халькогена в ряду CuCrX_2 ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$) оказывает наибольшее влияние на тонкие структуры K -спектров поглощения меди, хрома, а также халькогена.

Полученные результаты могут быть использованы для экспресс-анализа характера распределения атомов в дихалькогенидах $\text{CuCr}_{1-x}\text{M}'_x\text{S}_2$ ($\text{M}' = \text{V}, \text{Fe}, x = 0\text{—}0,40$), MCrS_2 ($\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}$) и CuCrX_2 в процессе синтеза данных материалов.

Исследования выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 16-032-00612_мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Альмухаметов Р.А., Якишбаев Р.А., Габитов Э.В. // Физика твердого тела. – 1999. – **41**, № 8. – С. 1450 – 1451.
2. Almukhametov R.F., Yakshibaev R.A., Gabitov E.V. et al. // Phys. Stat. Sol. (b). – 2003. – **236**, N 1. – P. 29 – 33.

3. Акманова Г.Р., Давлешина А.Д. // Письма о материалах. – 2013. – **3**. – С. 76 – 78.
4. Srivastana D., Tewari G.C., Kappinen M., Nieminen R.M. // J. Phys.: Condens.Matter. – 2013. – **25**, N 3. – P. 105504.
5. Tewari G.C., Tripathi T.S. // Zeitschrift für Kristallographie Crystalline Materials. – 2010. – **225**, N 11. – P. 471 – 474.
6. Tewari G.C., Tripathi T.S. // J. Electronic Materials. – 2010. – **39**, N 8. – P. 1133.
7. Karmakar A., Dey K., Chatterjee S. et al. // Appl. Phys. Lett. – 2014. – **104**, N 5. – P. 052906.
8. Абрамова Г.М., Петраковский Г.А. // Физика низких температур. – 2006. – **32**, № 8/9. – С. 954 – 967.
9. Abramova G., Pankratas A., Petrakovskii G. et al. // J. Appl. Phys. – 2010. – **107**. – P. 093914(3).
10. Васильева И.Г., Кардаш Т.Ю., Малахов В.В. // Журн. структур. химии. – 2009. – **50**, № 2. – С. 302 – 310.
11. Nagard N.L., Collin G., Gorochov O. // Mat. Res. Bull. – 1979. – **14**. – P. 1411.
12. Joly Y. // Phys. Rev. B. – 2001. – **63**. – P. 120 – 125.
13. Кравцова А.Н. Практикум "Вычислительные методы в ФТТ" для студентов специализации "Физика твердого тела" – Южный федеральный университет, 2010.
14. Inorganic Crystal Structure Database. Version 2.1.0 / FIZ Karlsruhe, Germany.
15. Блохин М.А., Швейцер И.Г. Рентгеноспектральный справочник. – М.: Наука, 1982.
16. Блохин М.А. Методы рентгеноспектральных исследований. – М.: ГИТЛ, 1959.
17. Никифоров И.Я. // Изв. АН СССР. Сер. физ. – 1957. – **21**, № 10. – С. 1362 – 1366.
18. Васильева И.Г., Кривенцов В.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2010. – № 8. – С. 25.
19. Коротаев Е.В., Сыроквашин М.М., Перегудова Н.Н и др. // Журн. структур. химии. – 2015. – **56**, № 3. – С. 633.
20. Смирнова О., Смоленцев Н.Ю., Гуда А.А., Солдатов М.А. // Оптика и спектроскопия. – 2013. – **114**, № 3. – С. 115 – 119.