УДК 544.016.2:(546.561+546.221+546.185+546.151)

ТРІАНГУЛЯЦІЯ КВАЗІПОТРІЙНОЇ СИСТЕМИ CuI – Cu_2S – P_2S_5

Погодін А.І., Кохан О.П.

ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 88000, м.Ужгород, вул. Підгірна, 46

Розробка наукових основ пошуку нових функціональних матеріалів є актуальною проблемою сьогодення. Одним із можливих шляхів пошуку є дослідження діаграм стану багатокомпонентних систем, вивчення фазових рівноваг у системах за участю складних речовин. Такі дослідження можуть стати надійною науковою основою одержання матеріалів із заданими властивостями.

Квазіпотрійна система CuI – Cu_2S – P_2S_5 утворюється трьома квазіподвійними системами Cu_2S – P_2S_5, CuI – Cu_2S та CuI – P_2S_5. Для детального вивчення характеру фізико-хімічної взаємодії у квазіпотрійній системі необхідним етапом є проведення її тріангуляції для поділу на вторинні потрійні. У системі Cu_2S – P_2S_5 встановлено утворення однієї фази Cu_7PS_6 з конгруентним характером плавлення. У системах CuI – Cu_2S та CuI – P_2S_5 утворення тернарних фаз не виявлено. У квазіпотрійній системі CuI – Cu_2S – P_2S_5 встановлено утворення фази Cu_6PS_5I з конгруентним характером плавлення. На термограмі Cu_6PS_5I спостерігається один ендоефект на кривій нагрівання при температурі 1322К (рис. 1), що відповідає плавленню фази. Після плавлення і охолодження сплаву на дифрактограмі сполуки спостерігається одна система ліній, що індексується у гранецентрованій кубічній комірці і узгоджується з теоретично розрахованою для даної фази (рис. 2).

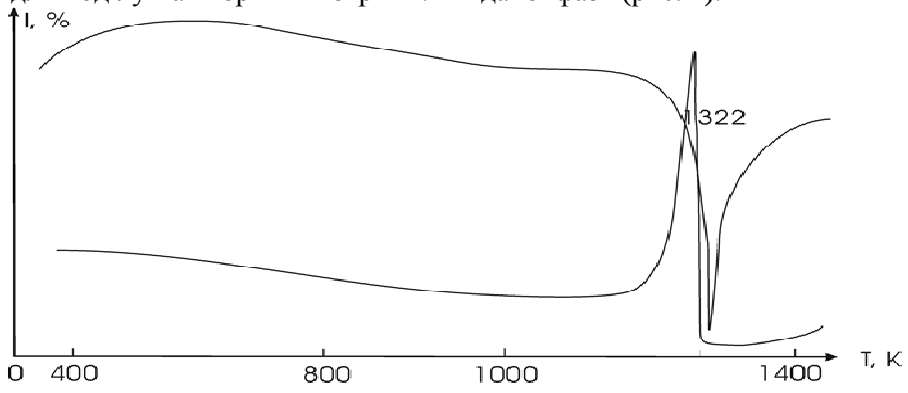


Рис.1 Термограма Cu_6PS_5I

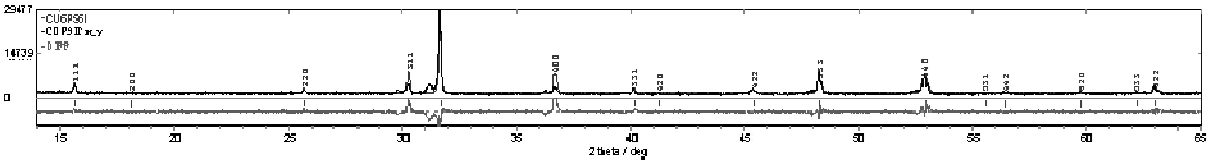


Рис.2. Експериментальна та теоретично розрахована дифрактограми для Cu_6PS_5I

Експериментальне встановлення квазібінарності перерізів здійснювали за правилом Гюртлера. Згідно правила, якщо на перетині двох перерізів не утворюється тернарна сполука, квазібінарним є лише один із них. Для визначення квазібінарного перерізу синтезують зразок складу, що відповідає точці перетину перерізів, а потім встановлюють, фази якого з перерізів наявні у зразку. Вимогами до фаз, що враховуються при здійсненні тріангуляції є стабільність в умовах проведення експерименту та наявність структурних даних, що є необхідним при встановленні фазового складу методом рентгенофазового аналізу (РФА).

Аналіз системи показав, що для встановлення квазібінарних перерізів необхідно здійснити синтез та ідентифікацію двох зразків (точки складів ***1*** і ***2***, рис. 3).

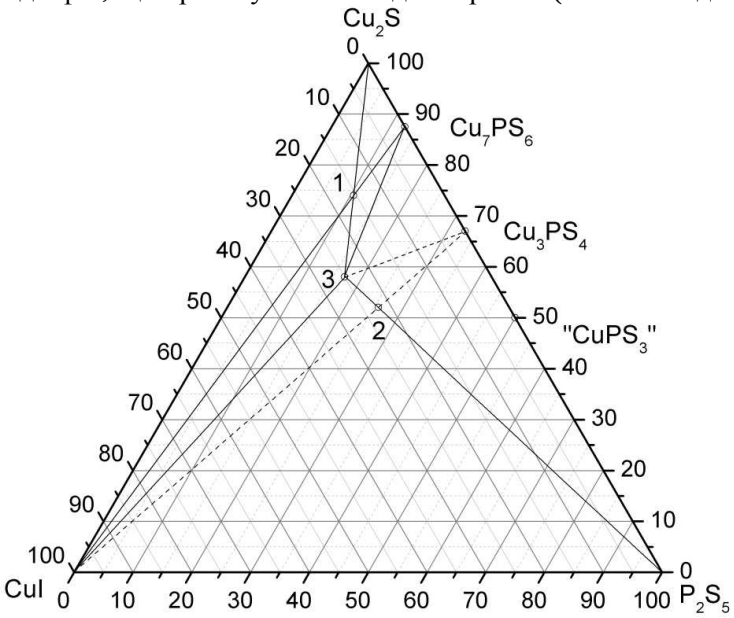
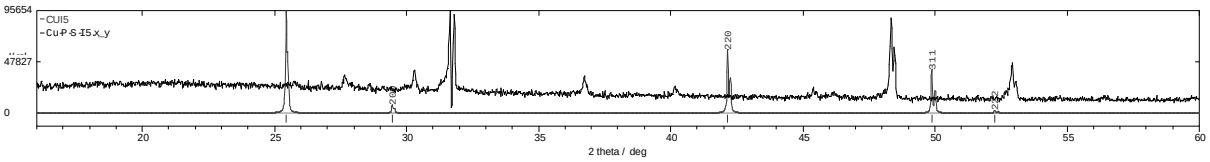


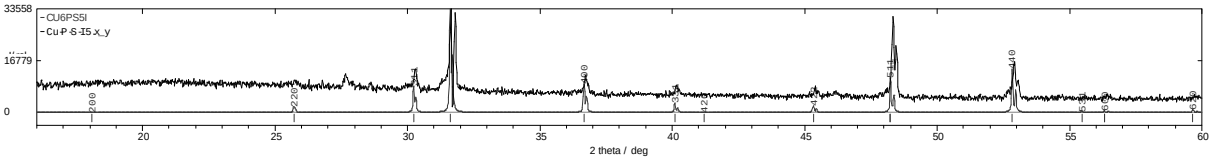
Рис.3 Можливі перерізи системи CuI – Cu_2S – P_2S_5

Точка складу ***1*** знаходиться на перетині двох перерізів Cu_6PS_5I – Cu_2S та Cu_7PS_6 – CuI. Точка складу ***2*** знаходиться на перетині перерізів Cu_6PS_5I – P_2S_5 та Cu_3PS_4 – CuI.

Синтез вихідних тернарних та тетрарної фази і сплавів (***1***,***2***) проводили методом твердофазного спікання внаслідок їх часткової термічної дисоціації. Вихідні речовини зважували на аналітичних терезах WA-21, завантажували в кварцові ампули і вакуумували до 0,13 Па. Синтез проводили протягом 168 годин при температурі 923 К. Одержані зразки досліджувались методом РФА..



(a)



(b)

Рис.4 Співставлення експериментальної дифрактограми зразка ***1***, із розрахованими для CuI (а) та Cu_6PS_5I (б)

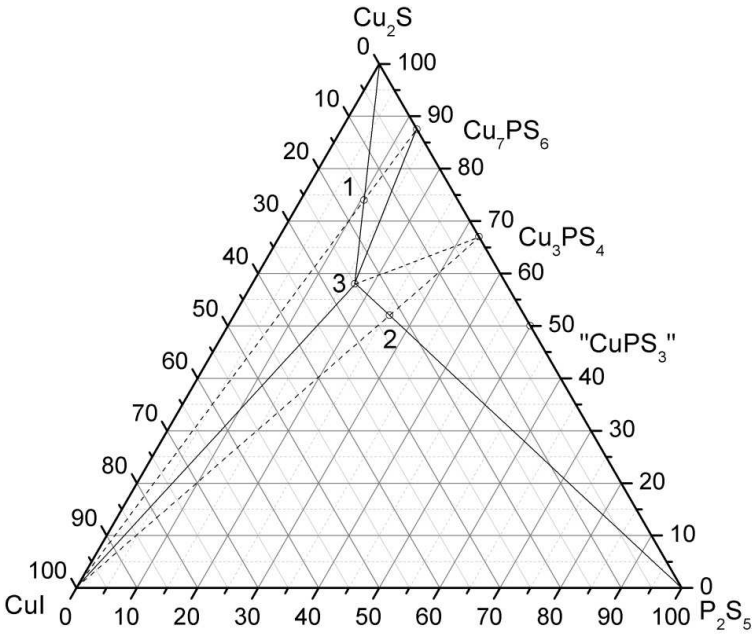


Рис.5 Квазібінарні перерізи системи CuI – Cu_2S – P_2S_5 (суцільна лінія)

Співставлення експериментально одержаних дифрактограм з літературними для тетрарних, тернарних та бінарних фаз (рис.4) вказує, що перерізи Cu_6PS_5I – Cu_2S, Cu_6PS_5I – P_2S_5, Cu_6PS_5I – CuI та Cu_6PS_5I – Cu_7PS_6 є квазібінарні (рис 5). Отже, досліджувана система може бути поділена на чотири вторинні квазіпотрійні системи Cu_6PS_5I – CuI – Cu_2S, Cu_6PS_5I – Cu_7PS_6 – Cu_2S, Cu_7PS_6 – Cu_6PS_5I – P_2S_5 та CuI – Cu_6PS_5I – P_2S_5.

Висновки

1. Встановлено конгруентний характер плавлення тетрарної сполуки Cu_6PS_5I.
2. Проведено тріангуляцію системи CuI – Cu_2S – P_2S_5, встановлено що система поділяється на чотири вторинні квазіпотрійні системи: Cu_6PS_5I – CuI – Cu_2S, Cu_6PS_5I – Cu_7PS_6– Cu_2S, Cu_7PS_6 – Cu_6PS_5I – P_2S_5 та CuI – Cu_6PS_5I – P_2S_5.

Література

1. Andrae H., Blachnik R. Metal sulphide – tetraphosphorusdekasulphide phase diagrams // Journal of Allous and compounds. – 1992. – V.189. – P. 209 - 215.
2. Кохан О.П., Погодін А.І., Панько В.В. Дослідження характеру взаємодії у системі Cu_2S – CuI // Наук. вісник УжНУ, Серія «Хімія». – В.19. – 2008. – С. 50-52.
3. Галаговец И.В., Поторий М.В. Фазовые равновесия и получение монокристаллов соединений, образующихся в системах $Sb_2(Bi_2)S_3$ – P_2S_5 и Cu_2S – P_2S_5 // Получение и свойства сложных полупроводников: Тематический науч.-техн.сб.– К.: УМКВО, 1991.– С. 51-57.

TRIANGULATION OF CuI – Cu_2S – P_2S_5 QUASITERNARY SYSTEM

Pogodin A.I., Kokhan O.P.

Triangulation of CuI – Cu_2S – P_2S_5 quasiternary system have been carried out by XRD method. Results of triangulation of quasiternary CuI – Cu_2S – P_2S_5 system show that sections Cu_6PS_5I – Cu_2S, Cu_6PS_5I – P_2S_5, Cu_6PS_5I – CuI and Cu_6PS_5I – Cu_7PS_6 are quasibinary. The system CuI – Cu_2S – P_2S_5 can be divided on 4 secondary quasiternary systems: Cu_6PS_5I – CuI – Cu_2S, Cu_6PS_5I – Cu_7PS_6– Cu_2S, Cu_7PS_6 – Cu_6PS_5I – P_2S_5 and CuI –Cu_6PS_5I – P_2S_5.