

Lokālās struktūras pētījumi sudraba selenīdā

Inga Pudža¹, Bejan Hamawandi^{1,2}, Pjotrs Žguns¹, Kaspars Pudzs¹, Muhammet S. Toprak², Aleksejs Kuzmins¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*
²*KTH Karaliskais tehnoloģiju institūts, Zviedrija*

Sudraba selenīds (Ag_2Se) ir daudzsološs termoelektrisks materiāls, kuru varētu izmantot siltuma zudumu pārvēršanai elektroenerģijā un progresīvu dzesēšanas tehnoloģiju nodrošināšanai. Tam piemīt "fononu šķidrums-elektronu kristāla" īpašības, kam raksturīga dabiski augsta elektriskā vadītspēja un zema siltumvadītspēja tuvu istabas temperatūrai, kas rezultējas augstā termoelektriskā labuma faktorā (ZT) [1].

Šajā darbā mēs pētām lokālās atomārās struktūras izmaiņas temperatūras (10–600 K) ietekmē Ag_2Se , kas sintezēts, izmantojot mikroviļņu asistēto hidrotermālo metodi. Tika izmantota rentgenstaru absorbcijas spektroskopija (XAS) pie Ag un Se K-malām, papildināta ar apgrieztās Montekarlo [2] un molekulārās dinamikas simulācijām, lai iegūtu detalizētu strukturālo informāciju.

Pirmās kārtas fāžu pāreja no ortorombiskā Ag_2Se ($P2_12_12_1$) uz kubisko Ag_2Se ($Im\bar{3}m$) tika novērota aptuveni pie 425 K. Fāžu pāreja ir atgriezeniska ar nelielu ($\Delta T \approx 25$ K) histerēzi. Augsta termiskā nesakārtotība izraisīja ievērojamu paplašinātās rentgenstaru absorbcijas sīkstruktūras (EXAFS) spektru amplitūdas samazināšanos, kur Ag tika ietekmēts vairāk nekā Se, kas ir saskaņā ar augsto Ag jonu mobilitāti.

Šo pētījumu atbalstīja Latvijas Zinātnes padomes projekts Nr. LZP-2023/1-0528.

Study of the local atomic structure in silver selenide

Inga Pudza¹, Bejan Hamawandi^{1,2}, Pjotrs Žguns¹, Kaspars Pudzs¹, Muhammet S. Toprak², Alexei Kuzmin¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*
²*KTH Royal Institute of Technology, Sweden*

Silver selenide (Ag_2Se) is a promising thermoelectric material with potential use in converting lost heat into electrical energy and enabling advanced cooling technologies. It exhibits the characteristics of a “phonon-liquid electron-crystal”, featuring naturally high electrical conductivity and low thermal conductivity near room temperature resulting in a high thermoelectric figure of merit (ZT) [1].

In this study, we investigate the temperature-dependent evolution (10–600 K) of the local atomic structure of Ag_2Se synthesized via the microwave-assisted hydrothermal method. X-ray absorption spectroscopy (XAS) at the Ag and Se K-edges was employed, complemented by reverse Monte Carlo [2] and molecular dynamics simulations to extract detailed structural information.

A first-order phase transition from orthorhombic Ag_2Se ($P2_12_12_1$) to cubic Ag_2Se ($Im\bar{3}m$) was observed at approximately 425 K. The phase transition is reversible with a narrow ($\Delta T \approx 25$ K) hysteresis. A significant reduction in the amplitude of extended X-ray absorption fine structure EXAFS spectra was observed due to high thermal disorder, with Ag being more affected than Se, consistent with the high mobility of Ag ions.

This study was supported by the Latvian Council of Science project No. LZP-2023/1-0528.

- [1] T. R. Wei, P. Qiu, K. Zhao, X. Shi, L. Chen, *Advanced Materials* 35 (2023) 2110236.
[2] J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans, *J. Phys.: Condens. Matter* 26 (2014) 055401.