

НАУКОВИЙ ВІСНИК

Ужгородського університету

ISSN 2414-0260

серія

ХІМІЯ

випуск №1 (49)

2023

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»**

**НАУКОВИЙ ВІСНИК
УЖГОРОДСЬКОГО УНІВЕРСИТЕТУ
СЕРІЯ «ХІМІЯ»**

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

ISSN 2414-0260

**Засновник і видавець: Державний вищий навчальний
заклад «Ужгородський національний університет»**

Виходить 2 рази на рік

Заснований у жовтні 1996 року

Випуск № 1 (49) 2023

Ужгород – 2023

УДК 54
Н 34



**Науковий вісник Ужгородського університету.
Серія «Хімія». 2023, Випуск № 1 (49)**

Збірник наукових праць друкує статті, які містять теоретичні та практичні результати в галузі хімічних наук, охорони навколишнього природного середовища, а також методики викладання хімії та екології у вищій школі. Публікуються також огляди сучасного стану важливіших наукових проблем у галузі хімії та екології, огляди наукових конференцій, які відбулися в ДВНЗ «УжНУ», а також матеріали присвячені ювілеям.

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ:

Головний редактор: Барчій І.Є., д.х.н. (Україна)
Заступник головного редактора: Сухарев С.М., д.х.н. (Україна)
Члени редколегії: Базель Я.Р., д.х.н. (Словаччина); Ворохта М., PhD (Чехія); Драбович Й., д.н. (Польща); Іщенко О.В., д.х.н. (Україна); Лендсел В.Г., д.х.н. (Україна); Марійчук Р.Т., PhD (Словаччина); Мілюкін М.В., д.х.н. (Україна); Онисько М.Ю., д.х.н. (Україна); Онисько П.П., д.х.н. (Україна); П'ясецькі М., д.н. (Польща); Переш Є.Ю., д.х.н. (Україна); Пехньо В.І., д.х.н., академік НАН України (Україна); Сідей В.І., к.х.н. (Україна); Сливка М.В., д.х.н. (Україна); Студеняк Я.І., к.х.н. (Україна); Тананайко О.Ю., д.х.н. (Україна); Федорчук А.О., д.х.н. (Україна)
Технічний помічник редактора: Стерчо І.П., к.х.н. (Україна)

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 21056-10856Р від 07.11.2014 року (раніше КВ №7972 від 09.10.2003 року).

Збірник наукових праць «Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Хімія» внесений у Список наукових видань, у яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт (Наказ МОН України № 1643 від 28.12.2019 р. (категорія Б, спеціальність 102 Хімія); Наказ МОН України № 261 від 06.03.2015 р.; Постанова Президії ВАК України № 1-05/4 від 14.10.2009 р.). Всі статті підлягають незалежному рецензуванню.

Видання індексується наукометричними базами даних: Camical Abstracts Service (CAS), WordCat, Crossref, BASE, Google Scholar.

*Рекомендовано до друку Вченою радою Державного вищого навчального закладу «Ужгородський національний університет» (Протокол № 7 від 20.06.2023 року)
та редакційно-видавничою радою університету (Протокол № 4 від 16.06.2023 року).*

Адреса засновника та видавця: ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 88000, м. Ужгород, вул. Підгірна, 46. тел. (03122)33341, факс: (03122)34202; e-mail: official@uzhnu.edu.ua
Веб-сайт видання: www.visnyk-khim.uzhnu.edu.ua

Адреса редакції:
88000, м. Ужгород, вул. О. Фединця, 53/1
тел./факс (+380312)631097; e-mail: visnyk-khim@uzhnu.edu.ua

© ДВНЗ «Ужгородський національний університет», 2023

**MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCES
OF UKRAINE
STATE UNIVERSITY
«UZHHOROD NATIONAL UNIVERSITY»**

**SCIENTIFIC BULLETIN OF THE
UZHHOROD UNIVERSITY.**

**Series «Chemistry»
(Sci. Bull. Uzhh. Univ. Ser. Chem.)**

***NAUKOVIJ VÌSNIK UŽGORODS'KOGO
UNÌVERSITETU. Serìâ «Himiâ»***

COLLECTION OF THE SCIENTIFIC WORKS

ISSN 2414-0260

**Founder and publisher: State University
«Uzhhorod National University»**

Periodicity of 2 times per year

Founded in October, 1996

Issue № 1 (49) 2023

Uzhhorod – 2023

Scientific Bulletin of the Uzhhorod University.
Series «Chemistry». 2023, Issue № 1 (49)

Naukovij visnik Užgorods'kogo unìversitetu.
Seriâ Himiâ. 2023, Issue № 1 (49)

The collection of scientific works publishes articles that contain theoretical and practical results in the field of chemical sciences and environmental protection. Topics: inorganic chemistry, material science, analytical chemistry, organic chemistry; physical and colloidal chemistry, ecology, environmental safety.

EDITORIAL BOARD BY:

Editor-in-Chief:

Barchiy I., Dr. Sci., Ukraine

Deputies of Editor-in-Chief:

Sukharev S., Dr. Sci., Ukraine

Members:

Bazel Ya., Dr. Sci., Slovak Republic; **Drabowicz J.,** Dr. hab., Poland; **Fedorchuk A.,** Dr. Sci., Ukraine; **Ischenko O.,** Dr. Sci., Ukraine; **Lendel V.,** Dr. Sci., Ukraine; **Mariychuk R.,** PhD, Slovak Republic; **Milyukin M.,** Dr. Sci., Ukraine; **Onysko M.,** Dr. Sci., Ukraine; **Onysko P.,** Dr. Sci., Ukraine; **Pekhnyo V.,** Dr. Sci., Academic of Ukrainian National Academy of Sciences, Ukraine; **Peresh E.,** Dr. Sci., Ukraine; **Piasecki M.,** Dr. hab., Poland; **Sidey V.,** PhD, Ukraine; **Slivka M.,** Dr. Sci., Ukraine; **Studeniyak Ya.,** PhD, Ukraine; **Tananaiko O.,** Dr. Sci., Ukraine; **Vorokhta M.,** PhD, Czech Republic

Technical Assistant Editors

Stercho I., PhD, Ukraine

Certificate of state registration number KV 21056-10856R from 07.11.2014 (before KV 7972 from 09.10.2003).

Papers published in **Scientific Bulletin of the Uzhhorod University. Series «Chemistry»** are considered as publications suitable for Doctoral and PhD thesis (Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine from 28.12.2019, № 1643 (Category B); Order of the Ministry of Education and Science of Ukraine from 06.03.2015, № 261; Decree of the Presidium of HAC of Ukraine from 14.10.2009, № 1.05/4). All manuscripts are subject to independent reviewed.

Indexing: Camical Abstracts Service (CAS), WordCat, Crossref, BASE, Google Scholar.

Recommended for printing of Academic Council State University «Uzhhorod National University» (protocol No. 7 from 20.06.2023) and Editorial and Publishing Council State University «Uzhhorod National University» (protocol No. 4 from 16.06.2023).

Address of founder and publisher: State University «Uzhhorod National University», Pidhirna str. 46, Uzhhorod, 88000, Ukraine. Tel.: (03122)33341, fax: (03122)34202; e-mail: official@uzhnu.edu.ua
Website edition: www.visnyk-khim.uzhnu.edu.ua

Address of release editing's:

Fedencja str. 53/1, Uzhhorod, 88000, Ukraine
tel./fax (+380312)631097; e-mail: visnyk-khim@uzhnu.edu.ua

ЗМІСТ (CONTENTS)

2023, Випуск № 1 (49)	1023, Issue № 1 (49)	Стор.
Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О., Кохан О.П., Кайла М.І., Скубеніч К.В., Росоха І.В. ЕЛЕКТРИЧНА ПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО Ag_7PS_6 <i>Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Kayla M.I., Skubenych K.V., Rosokha I.V.</i> <i>ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF SINGLE CRYSTALLINE Ag_7PS_6</i>		5-9
Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О., Кохан О.П., Чундак С.Ю., Кайла М.І., Скубеніч К.В. ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО Ag_8GeS_6 <i>Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Chundak S.Yu., Kayla M.I., Skubenych K.V.</i> <i>ELECTRICAL PROPERTIES INVESTIGATION OF Ag_8GeS_6 SINGLE CRYSTAL</i>		10-14
Сабов В.І., Барчий І.Є., П'ясецькі М., Філеп М.Й., Погодін А.І., Сабов М.Ю. КВАЗІБІНАРНА СИСТЕМА $Ag_7PSe_6-Ag_2Se$ <i>Sabov V.I., Barchiy I.Ye. M.B., Piasecki M., Filep M.J., Pogodin A.I., Sabov M.Yu.</i> <i>QUASIBINARY SYSTEM $Ag_7PSe_6-Ag_2Se$</i>		15-19
Чорба О.Й., Сабов М.Ю., Філеп М.Й., Погодін А.І., Малаховська Т.О. ФАЗОВІ РІВНОВАГИ НА ПЕРЕРІЗИ $Cu_2Se - Cu_3SbSe_4$ <i>Chorba O.J., Sabov M.Yu., Filep M.J., Pogodin A.I., Malakhovska T.O.</i> <i>PHASE EQUILIBRIA IN THE SECTION $Cu_2Se - Cu_3SbSe_4$</i>		20-24
Шендер І.О., Погодін А.І., Філеп М.Й., Малаховська Т.О., Поп М.М., Кохан О.П., Сусліков Л.М. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МОНОКРИСТАЛІВ Ag_7SiS_5I ТА Ag_7GeS_5I <i>Shender I.O., Pogodin A.I., Filep M.J., Malakhovska T.O., Pop M.M., Kokhan O.P., Suslikov L.M.</i> <i>OPTICAL PROPERTIES OF Ag_7SiS_5I AND Ag_7GeS_5I SINGLE CRYSTALS</i>		25-29
Фершал М.В. Студеняк Я.І. ПОТЕНЦІОМЕТРІЯ ПРИ ВСТАНОВЛЕННІ УМОВ УТВОРЕННЯ ТЕТРАФТОРБОРАТУ ЯК АНАЛІТИЧНОЇ ФОРМИ БОРУ <i>Fershal M., Studenyak Ya.</i> <i>POTENTIOMETRY IN DETERMINING THE CONDITIONS FOR THE FORMATION OF TETRAFLUORBORATE AS AN ANALYTICAL FORM OF BORON</i>		30-38
Галега О.В., Повідайчик М.В., Комаровська-Порохнявець О.З., Онисько М.Ю., Сухарев С.М. СИНТЕЗ ТА АНТИМІКРОБНА АКТИВНІСТЬ СЕЛЕНО(МЕРКУРІЙ)ГАЛОГЕНОВМІСНИХ ПОХІДНИХ БЕНЗОТІАЗОЛУ <i>Haleha O.V., Povidaichyk M.V., Komarovska-Porokhnyavets O.Z., Onysko M.Yu., Sukharev S.M.</i> <i>SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF SELENO(MERCURY)HALOGEN-CONTAINING BENZOTHAZOLE DERIVATIVES</i>		39-44
Король Н.І., Кут М.М., Лендел В.Г., Сливка М.В., Онисько М.Ю., Кривов'яз А.О., Русин І.Ф., Фаринюк Ю.І. ВПЛИВ МЕТОДІВ ОЦІНЮВАННЯ НА ПРОМІЖНІ РЕЗУЛЬТАТИ СТУДЕНТІВ-МЕДИКІВ <i>Korol N., Kut M., Lendel V., Slivka M., Onysko M., Kryvovjaz A., Rusyn I., Faryniuk Yu.</i> <i>INFLUENCE OF ASSESSMENT METHODS ON INTERMEDIATE RESULTS OF MEDICAL STUDENTS</i>		45-49
Кут М.М., Король Н.І., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. IN SILICO ДОСЛІДЖЕННЯ ПРИМІДИНАРИЛТЕЛУРИДІВ, ЯК ПОТЕНЦІЙНИХ ІНГІБІТОРІВ $PLASMIDIUM FALCIPARUM$ <i>Kut M., Korol N., Onysko M., Lendel V.</i> <i>IN SILICO STUDY OF PYRIMIDINARYLTELURIDES AS POTENTIAL INHIBITORS OF $PLASMIDIUM FALCIPARUM$</i>		50-56
Кут М.М., Кут Д.Ж., Кривов'яз А.О., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. КОМПЛЕКСИ n-МЕТОКСИФЕНІЛТЕЛУРТРИХЛОРИДУ З АЛІЛЬНИМИ ТІОЕТЕРАМИ 5-АРИЛ-1,3,4-ОКСАДІАЗОЛУ <i>Kut M., Kut D., Krivovjaz A., Onysko M., Lendel V.</i> <i>COMPLEXES OF p-METHOXYPHENYLTELLURIUM TRICHLORIDE WITH ALLYL THIOETHERS OF 5-ARYL-1,3,4-OXADIAZOLE</i>		57-61
Глух О.С., Симканич О.І., Качаєв В.М., Глюдзик Е.І. ЗМІНА NDVI-ІНДЕКСУ КАРПАТСЬКОГО РЕГІОНУ УКРАЇНИ ПРОТЯГОМ 2000-2022 РОКІВ <i>Glukh O.S., Symkanych O.I., Kachaiev V.M., Hliudzyk E.I.</i> <i>THE NDVI INDEX CHANGE OF THE CARPATHIAN REGION OF UKRAINE DURING 2000-2022</i>		62-67
Русин В.М. МОЖЛИВІСТЬ ЕФЕКТИВНОГО ВИКОРИСТАННЯ ОСНОВНИХ БАРВНИКІВ ТОРГОВОЇ МАРКИ «БАЗАКРИЛ» ПРИ ВИЗНАЧЕННІ АНІОННИХ ПОВЕРХНЕВО-АКТИВНИХ РЕЧОВИН <i>Rusyn V.M.</i> <i>THE POSSIBILITY OF EFFECTIVE USE OF BASIC DYES OF THE "BAZAKRYL" TRADEMARK IN THE DETERMINATION OF ANIONIC SURFACTANTS</i>		68-75
ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРІВ		76-79
ЗМІСТ		80

УДК: 546.57+546.18+546.23+544.016

¹Сабов В.І., н.с.; ¹Барчій І.С., д.х.н., проф.; ²П'ясецькі М., Dr.Sci, проф.;
¹Філеп М.Й., к.х.н., с.н.с.; ¹Погодін А.І., к.х.н., с.н.с.; ¹Сабов М.Ю., к.х.н., доц.

КВАЗІБІНАРНА СИСТЕМА $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$

¹ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Кафедра неорганічної хімії,
88000, м. Ужгород, вул. Підгірна 46;
²Університет ім. Яна Длугоша,
42200, Ченстохова, вул. Армії Крайової 13/15, Польща
e-mail: vitasabov@gmail.com

Напівпровідникові бінарні та тернарні селеніди аргентуму викликають значний практичний інтерес, зокрема як перспективні термоелектричні матеріали. До них відносяться зокрема вузькозонний напівпровідник Ag_2Se та Ag_7PSe_6 із розупорядкованою катіонною підграткою та жорсткого аніонним каркасом, що спричиняє ефективне розсіювання фононів. Допінгування Ag_7PSe_6 вузькозонним напівпровідником Ag_2Se , має привести до підвищення його провідності, а Ag_2Se більш розупорядкованою аргіродитною фазою Ag_7PSe_6 до пониження теплопровідності. В обидвох випадках це має сприяти підвищенню термоелектричної добротності відповідних фаз. Водночас, встановлення умов одержання допінгованих фаз потребує вивчення умов їх існування в системі $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$. Дана робота присвячена дослідженню фазових рівноваг у системі $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$ в усьому концентраційному інтервалі. За результатами рентгенівського фазового та диференціального термічного аналізу побудовано відповідну фазову діаграму. Встановлено, що система $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$ є квазібінарною. Вона характеризується чотирма процесами: двома евтектоїдними при 405 К та 433 К, спричиненими наявністю поліморфних модифікацій у Ag_2Se та Ag_7PSe_6 , відповідно; евтектичним при 893 К (координати евтектичної точки становлять 893 К і ~8 мол. % Ag_2Se) і монотектичним процесом при 977 К. Вище цієї температури в інтервалі концентрацій ~9 - ~87 мол.% спостерігається область незмішуваності в рідині. Області гомогенності вихідних компонентів становлять менше 5 мол. %.

Ключові слова: квазібінарна система; селеніди; фазові рівноваги; фазова діаграма.

В останні десятиліття аргентум (I) селеніду (Ag_2Se) приділяється велика увага завдяки його особливим електричним та оптичним властивостям, а також потенційним областям застосування. Ag_2Se зазнає поліморфного фазового переходу і має дві стабільні тверді фази: орторомбічна низькотемпературна модифікація (нТМ) ($\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$), та кубічна високотемпературна модифікація (вТМ) ($\alpha\text{-Ag}_2\text{Se}$). Фазовий перехід відбувається при температурі близько 409 К [1]. Низькотемпературна фаза поводить як напівпровідник, тоді як високотемпературна фаза демонструє властивості металу. Низькотемпературна фаза ($\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$) – це напівпровідник n-типу з вузькою забороненою зоною близько 0,07 еВ при 0 К [2]. $\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$ використовується як фотосенсибілізатор у фотоплівках або в

термохромних матеріалах та термоелектричних пристроях завдяки відносно високому коефіцієнту Зеебека, низькій теплопровідності ґратки та високій електропровідності [3,4]. Високотемпературна фаза (кубічна), $\alpha\text{-Ag}_2\text{Se}$, є суперіонним провідником, яка може використовуватися як твердий електроліт у фотозарядних батареях, а також використовується як добавка у високопровідному композитному склі для акумуляторів, сенсорів та дисплеїв.

Ag_7PSe_6 є представником сімейства аргіродитів, що характеризуються, окрім розупорядкованої катіонної підгратки, наявністю низько- та високотемпературних модифікацій. Високотемпературні модифікації аргіродитів як правило є іонними провідниками [5]. Обидві модифікації

кристалізуються у кубічній сингонії. За кімнатних температур Ag_7PSe_6 кристалізується у просторовій групі (ПГ) P2_13 . Літературні дані щодо температури поліморфного перетворення неоднозначні, зокрема, наводяться різні значення в температурному діапазоні 430–453 К [5,6]. Високотемпературна модифікація сполуки Ag_7PSe_6 кристалізується також у кубічній сингонії, але у більш високосиметричній структурі із ПГ F4-3m [7]. По причині розупорядкування катіонної підґратки при наявності жорсткого аніонного каркасу, що спричиняє ефективне розсіювання фононів, аргіродити розглядаються як перспективні термоелектричні матеріали [8]. Однак, стосовно сполуки Ag_7PSe_6 слід зазначити, що вона належить до змішаних електронно – іонних провідників, але значення електропровідності відносно невисокі. Разом з тим, допінгування Ag_7PSe_6 вузькозонним напівпровідником Ag_2Se має привести до підвищення його провідності, тоді як допінгування Ag_2Se більш розупорядкованою аргіродитною фазою Ag_7PSe_6 спричинятиме пониження теплопровідності. В обох випадках це має сприяти підвищенню термоелектричної добротності відповідних фаз. Водночас, встановлення умов одержання допінгованих фаз потребує вивчення їх умов існування в системі $\text{Ag}_2\text{Se} - \text{Ag}_7\text{PSe}_6$, що і було метою даного дослідження.

Експериментальна частина

Дослідженню фізико-хімічної взаємодії в системі $\text{Ag}_2\text{Se}-\text{Ag}_7\text{PSe}_6$ передував синтез 10 зразків через 10 мол.% та складу 95 мол.% Ag_2Se . Синтез здійснювали із попередньо синтезованих бінарної та тернарної сполук у вакуумованих кварцових ампулах. Ag_7PSe_6 і Ag_2Se були синтезовані з елементарних компонентів високої чистоти, взятих у стехіометричному співвідношенні; максимальні температури синтезу становили 1030 і 1230 К, відповідно. Максимальна температура синтезу зразків системи становила 1230 К, гомогенізуючий відпал проводили при температурі 573 К протягом 120 годин. Як вихідні компоненти, так і зразки досліджувалися методами рентгенівського фазового (РФА) (ДРОН 4-07,

$\text{Cu-K}\alpha$ випромінювання) та диференціального термічного (ДТА) аналізів.

Результати та їх обговорення

За даними (РФА) встановлено, що у зразках системи $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$ спостерігаються рефлекси вихідних сполук, що доводить її квазібінарність (Рис.1). Оскільки зразки відпалювалися при температурі вище температур поліморфного перетворення вихідних компонентів, а потім загартовувалися, слід було очікувати, що на порошкограмах проявляться рефлекси високотемпературних високосиметричних модифікацій, однак характер дифрактограм вказує на наявність низькотемпературних модифікацій Ag_7PSe_6 та Ag_2Se . Скоріше за все, це пов'язано із тим, що швидкість фазового перетворення обох сполук перевищує швидкість охолодження при загартуванні.

Не слід також виключати наявність у зразках і високотемпературних модифікацій вихідних сполук, але їх ідентифікація ускладнюється тим, що розташування основних рефлексів різних модифікацій сполук співпадають. Відмінність полягає в інтенсивності рефлексів і в тому, що оскільки симетрія низькотемпературних модифікацій нижча, на їх порошкограмах проявляється більша кількість рефлексів. Із врахуванням цього можна стверджувати, що у синтезованих зразках домінують низькотемпературні модифікації вихідних компонентів.

Підтвердженням наявності низькотемпературних поліморфних модифікацій у зразках системи є також результати диференціального термічного аналізу, а саме прояв ендотермічних ефектів на термограмах при 405 та 433 К (Рис.2), що близькі до температур поліморфних перетворень Ag_2Se і Ag_7PSe_6 , відповідно.

За результатами ДТА та РФА була побудована фазова діаграма системи (Рис.3). Дана діаграма відноситься до евтектичного типу. Евтектичний процес $\text{L} \leftrightarrow \alpha'' + \beta''$ проходить при 893 К, координати нонваріантної евтектичної точки становлять 893 К і ~8 мол. % Ag_2Se .

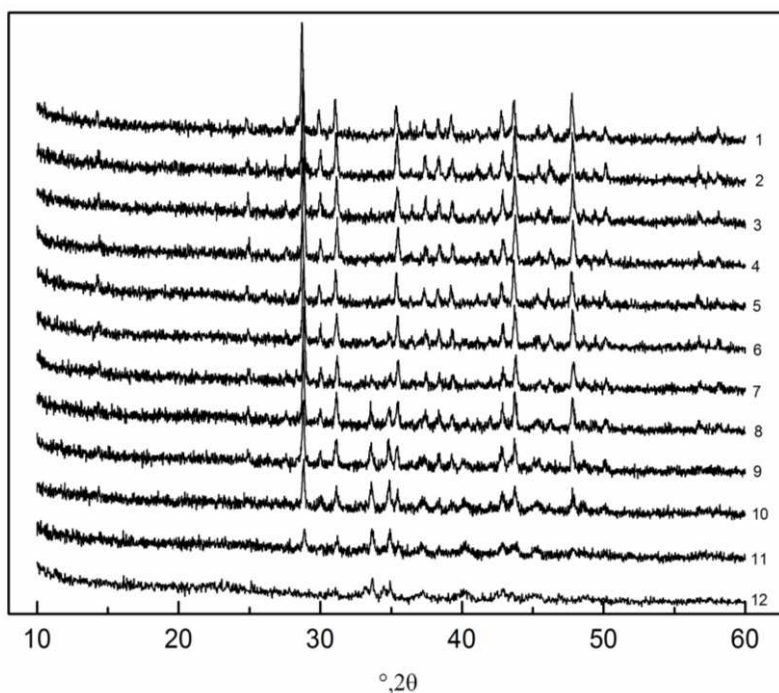


Рис.1. Дифрактограми зразків системи $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$
 1 - Ag_7PSe_6 ; 2 - 10 мол.% Ag_2Se ; 3 - 20 мол.% Ag_2Se ; 4 - 30 мол.% Ag_2Se ; 5 - 40 мол.% Ag_2Se ; 6 - 50 мол.% Ag_2Se ; 7 - 60 мол.% Ag_2Se ; 8 - 70 мол.% Ag_2Se ; 9 - 80 мол.% Ag_2Se ; 10 - 90 мол.% Ag_2Se ;
 11 - 95 мол.% Ag_2Se ; 12 - Ag_2Se .

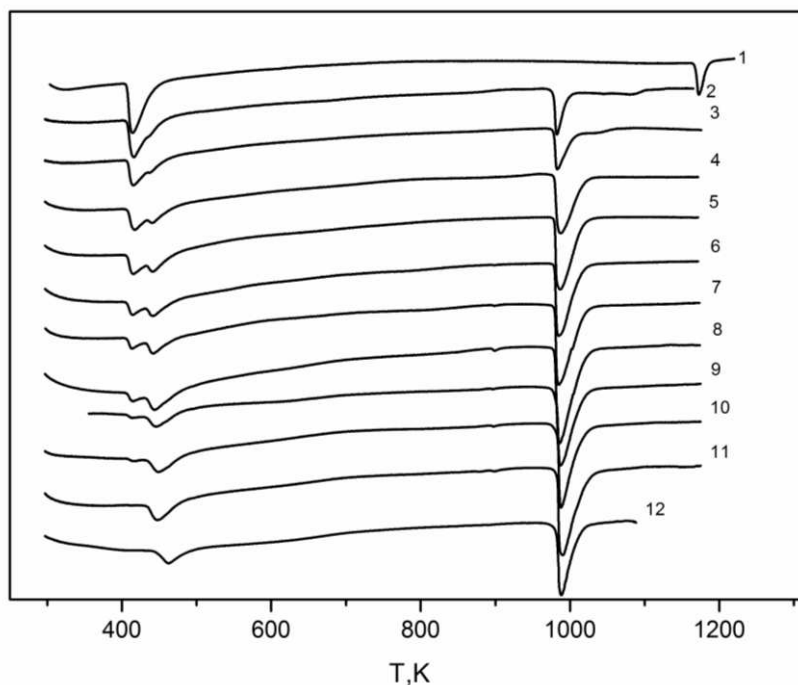


Рис. 2. Термограми зразків системи $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$
 1 - Ag_2Se ; 2 - 95 мол.% Ag_2Se ; 3 - 90 мол.% Ag_2Se ; 4 - 80 мол.% Ag_2Se ; 5 - 70 мол.% Ag_2Se ; 6 - 60 мол.% Ag_2Se ;
 7 - 50 мол.% Ag_2Se ; 8 - 40 мол.% Ag_2Se ; 9 - 30 мол.% Ag_2Se ; 10 - 20 мол.% Ag_2Se ;
 11 - 10 мол.% Ag_2Se ; 12 - Ag_7PSe_6 .

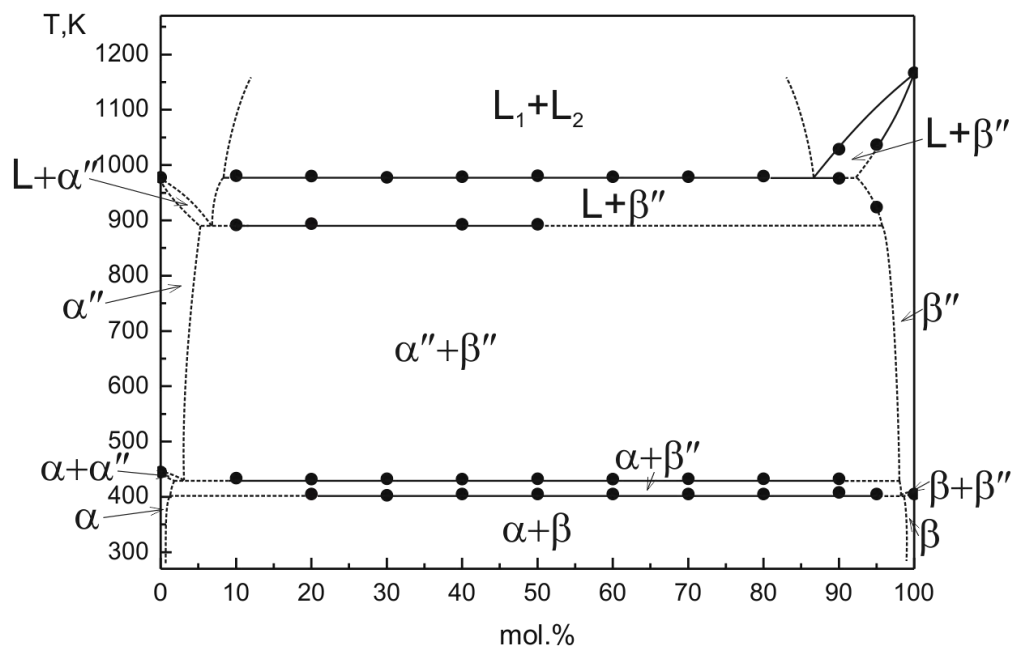


Рис.3. Діаграма стану системи $\text{Ag}_7\text{PSe}_6 - \text{Ag}_2\text{Se}$
 α - нтм Ag_7PSe_6 ; α'' - втм Ag_7PSe_6 ; β - нтм Ag_2Se ; β'' - втм Ag_2Se ; L- розплав.

Ефекти при низьких температурах (близько 404 К і 433 К) відповідають фазовим переходам Ag_2Se і Ag_7PSe_6 . При цих температурах проходять евтектоїдні процеси: $\beta'' \leftrightarrow \alpha + \beta$ (405 К) і $\alpha'' \leftrightarrow \alpha + \beta''$ (433 К). Також система характеризується монотектичним процесом при 977 К. Вище цієї температури в інтервалі концентрацій ~9 - ~87 мол.% спостерігається область незмішуваності в рідині. Области гомогенності на основі вихідних компонентів становлять менше 5 мол. %.

Список використаних джерел

1. Karakaya I., Thompson W. T. The Ag – Se (Silver – Selenium) System. *Bull. Alloy Phase Diagrams*. 1990, 11(3), 266–271. Doi: 10.1007/BF03029297.
2. Delele Worku Ayele. A facile one-pot synthesis and characterization of Ag_2Se nanoparticles at low temperature. *Egyptian Journal of Basic and Applied Sciences*. 2016, 3(2), 149–154. Doi: 10.1016/j.ejbas.2016.01.002.
3. Priyanka Jood, Raju Chetty, Michihiro Ohta. Structural stability enables high thermoelectric

- performance in room temperature Ag_2Se . *J. Mater. Chem. A*. 2020, 8, 13024–13037. Doi: 10.1039/D0TA02614J.
4. Ferhat M., Nagao J. Thermoelectric and transport properties of beta- Ag_2Se compounds. *J Appl. Phys.* 2000, 88, 813–816.
 5. Kuhs W.R., Nitsche R., Scheunemann K. The argyrodites – a new family of tetrahedrally close-packed structures. *Materials Research Bulletin*. 1979, 14, 241–248. Doi: 10.1016/0025-5408(79)90125-9.
 6. Evain M., Gaudin E., Boucher F., Petricek V., Taulelle F. Structures and Phase Transitions of the A_7PSe_6 (A = Ag, Cu) Argyrodite-Type Ionic Conductors. I. Ag_7PSe_6 . *Acta Cryst.* 1998, B54, 376–383. Doi:10.1107/S0108768197019654.
 7. Beeken R.B., Driessen C.R., Hinaus B.M., Pawlisch D.E. Electrical conductivity of Ag_7PSe_6 and Cu_7PSe_6 . *Solid State Ionics*. 2008, 179, 1058–1060. Doi: 10.1016/j.ssi.2008.01.014.
 8. Reissig F., Heep B., Panthöfer M., Wood M., Anand S., Snyder G. J., Tremel W. Effect of anion substitution on the structural and transport properties of argyrodites $\text{Cu}_7\text{PSe}_{6-x}\text{S}_x$. *Dalton Trans.* 2019, 48, 15822–15829. Doi:10.1039/C9DT03247A.

Стаття надійшла до редакції: 13.06.2023.

QUASIBINARY SYSTEM Ag_7PSe_6 - Ag_2Se

Sabov V.I., Barchiy I.Ye. M.B., Piasecki M., Filep M.J., Pogodin A.I., Sabov M.Yu.

Uzhhorod National University, Department of inorganic chemistry,
88000, Uzhhorod, Pidhirna str,46
J. Dlugosz University, 42200, Armii Krajowej St., 13/15, Częstochowa, Poland
e-mail: vitasabov@gmail.com

Semiconductor binary and ternary argentum selenides are of considerable practical interest, particularly as promising thermoelectric materials. These include Ag_2Se , a narrow-band semiconductor, and Ag_7PSe_6 , with a disordered cationic sublattice and a rigid anionic framework that causes efficient phonon scattering. Doping of Ag_7PSe_6 with the narrow bandgap semiconductor Ag_2Se should increase its conductivity and Ag_2Se with a more disordered Ag_7PSe_6 argyrodite phase to a decrease in thermal conductivity. In both cases, this should increase the thermoelectric figure of merit of the respective phases. At the same time, establishing the conditions for obtaining doped phases requires studying the conditions of their existence in the Ag_7PSe_6 - Ag_2Se system. Present work studies phase equilibria in the Ag_7PSe_6 - Ag_2Se system in the entire concentration range. A corresponding phase diagram was constructed based on the X-ray phase and differential thermal analysis results. It was found that the Ag_7PSe_6 - Ag_2Se system is quasi-binary. It is characterized by four processes: two eutectoid processes at 405 K and 433 K, caused by the presence of two polymorphic modifications in Ag_2Se and Ag_7PSe_6 , respectively; eutectic process at 893 K (the coordinates of the eutectic point are 893 K and ~8 mol% Ag_2Se) and monotectic process at 977 K. Above this temperature, in the concentration range of ~9 - ~87 mol%, a region of immiscibility in the liquid is observed. The homogeneity regions of the initial components are less than 5 mol%.

Keywords: quasibinary system; selenides; phase equilibria; phase diagram.

References

1. Karakaya I., Thompson W. T. The Ag – Se (Silver – Selenium) System. *Bull. Alloy Phase Diagrams*. 1990, 11(3), 266–271. Doi: 10.1007/BF03029297.
2. Delele Worku Ayele. A facile one-pot synthesis and characterization of Ag_2Se nanoparticles at low temperature. *Egyptian Journal of Basic and Applied Sciences*. 2016, 3(2), 149–154. Doi: 10.1016/j.ejbas.2016.01.002.
3. Priyanka Jood, Raju Chetty, Michihiro Ohta. Structural stability enables high thermoelectric performance in room temperature Ag_2Se . *J. Mater. Chem. A*. 2020, 8, 13024–13037. Doi: 10.1039/D0TA02614J.
4. Ferhat M., Nagao J. Thermoelectric and transport properties of beta- Ag_2Se compounds. *J Appl. Phys.* 2000, 88, 813–816.
5. Kuhs W.R., Nitsche R., Scheunemann K. The argyrodites – a new family of tetrahedrally close-packed structures. *Materials Research Bulletin*. 1979, 14, 241–248. Doi: 10.1016/0025-5408(79)90125-9.
6. Evain M., Gaudin E., Boucher F., Petricek V., Taulelle F. Structures and Phase Transitions of the A_7PSe_6 (A = Ag, Cu) Argyrodite-Type Ionic Conductors. I. Ag_7PSe_6 . *Acta Cryst.* 1998, B54, 376–383. Doi:10.1107/S0108768197019654.
7. Beeken R.B., Driessen C.R., Hinaus B.M., Pawlisch D.E. Electrical conductivity of Ag_7PSe_6 and Cu_7PSe_6 . *Solid State Ionics*. 2008, 179, 1058–1060. Doi: 10.1016/j.ssi.2008.01.014.
8. Reissig F., Heep B., Panthöfer M., Wood M., Anand S., Snyder G. J., Tremel W. Effect of anion substitution on the structural and transport properties of argyrodites $\text{Cu}_7\text{PSe}_{6-x}\text{S}_x$. *Dalton Trans.* 2019, 48, 15822–15829. Doi:10.1039/C9DT03247A.