

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУК $R_3Ni_{0.5}SnS_7$

(R – Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy і Ho)

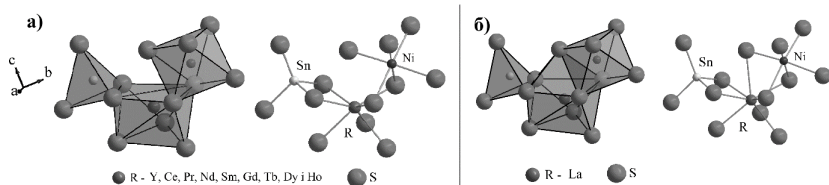
Марчук О. В.¹, Мельничук Х. О.¹, Гулай Л. Д.¹, Дашкевич М.²¹Хімічний факультет СНУ імені Лесі Українки, пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна;²Інститут низьких температур та структурних досліджень імені В. Тішебатовського, м. Вроцлав, вул. Окольна 2, 50-950 Польща
Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Тетрарні сполуки $R_3Ni_{0.5}SnS_7$ належать до сімейства сполук $R_3A_xDX_7$ (R – рідкісноземельний метал, що займає ПСТ 6 (c); A – лужний метал (x = 1), двовалентний перехідний метал (x = 0,5), тривалентний метал (x = 0,33) або чотирьохвалентний Si, Ge чи Sn (x = 0,25), що займає ПСТ 2 (a); D – Si, Ge, Sn, Ga або In, що займає ПСТ 2 (b); X – S, Se). Ці сполуки кристалізуються в нецентросиметричній гексагональній просторовій групі $P6_3$ (№ 173) і є перспективними матеріалами для створення на їх основі чутливих у середній та дальній інфрачервоній (ІЧ) області спектра фотоприймачів, нелінійно-оптичних перетворювачів та інших пристроїв.

Зразки стехіометричного складу $R_3Ni_{0.5}SnS_7$ (R – РЗМ) готували сплавленням шихти у вакуумованих (10^{-2} Па) кварцевих контейнерах. Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу становила 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Структура тетрарних сполук вивчена рентгенівськими методами порошку (R – Pr, Gd, Tb, Dy, Ho) та монокристалу (R – Y, La, Ce, Nd, Sm).

Комплекс проведених досліджень дозволив нам встановити параметри елементарної ґратки десяти тетрарних сполук: $a = 0,959589(17)$ нм, $c = 0,619632(11)$ нм, $V = 0,49412(2)$ нм³ (для $Y_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 1,024869(19)$ нм, $c = 0,604474(11)$ нм, $V = 0,54985(2)$ нм³ (для $La_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 1,01362(3)$ нм, $c = 0,603855(16)$ нм, $V = 0,53730(4)$ нм³ (для $Ce_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 1,00094(3)$ нм, $c = 0,60945(3)$ нм, $V = 0,52879(5)$ нм³ (для $Pr_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 0,99532(2)$ нм, $c = 0,610245(16)$ нм, $V = 0,52355(3)$ нм³ (для $Nd_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 0,97901(8)$ нм, $c = 0,61460(6)$ нм, $V = 0,51015(8)$ нм³ (для $Sm_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 0,97014(2)$ нм, $c = 0,61777(2)$ нм, $V = 0,50354(4)$ нм³ (для $Gd_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 0,96432(2)$ нм, $c = 0,61867(2)$ нм, $V = 0,49823(4)$ нм³ (для $Tb_3Ni_{0.5}SnS_7$); $a = 0,95914(2)$ нм, $c = 0,61922(2)$ нм, $V = 0,49334(4)$ нм³ (для $Dy_3Ni_{0.5}SnS_7$) і $a = 0,95412(2)$ нм, $c = 0,61841(2)$ нм, $V = 0,48754(3)$ нм³ (для $Ho_3Ni_{0.5}SnS_7$).

У структурах синтезованих сполук атоми РЗМ локалізовані у тригональних призмах (рис. 1 а) з одним додатковим атомом Сульфуру (для сполуки $La_3Ni_{0.5}SnS_7$ з двома додатковими атомами Сульфуру (рис. 1 б)), Ni – в октаедрах, а атоми Sn – у тетрадрах.

Рис. 1. Координаційне оточення атомів у структурі сполук $R_3Ni_{0.5}SnS_7$