

**КРИСТАЛІЧНА ТА ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА  
НОВИХ ФОСФІДІВ  $RE_5Pd_{19}P_{12}$  ( $RE = Y, Dy, Tb, Ho, Er$ )**

*Каричорт О. Р., Жак О. В.*

Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна  
Oksana.Karychort@lnu.edu.ua

Інтерметаліди, що містять в своєму складі рідкісноземельний метал (РЗМ,  $RE$ ), перехідний метал та металоїд, зокрема, фосфор або арсен, виявляють цікаві фізичні властивості. Причиною таких фізичних властивостей рідкісноземельних елементів є наявність у них незаповнених  $4f$ -оболонки, які поступово заповнюються в порядку зростання порядкового номера. Тернарні сполуки, що містять у своєму складі рідкісноземельний метал та паладій виявляють каталітичні, магнітні та надпровідні властивості. Сьогодні ізотермічні перерізи діаграм стану побудовано лише для потрібних систем  $\{Ce, Er, Yb\}$ -Pd-P.

Нашою метою був пошук нових тернарних фосфідів  $RE_5Pd_{19}P_{12}$  ( $RE = Dy, Tb, Ho, Er$ ) у системах з важкими рідкісноземельними металами і вивчення їхньої кристалічної та електронної структури.

Для синтезу зразків порошки вихідних компонентів зважували у визначених співвідношеннях, ретельно перемішували та пресували в таблетки, які запаювали у вакуумовані кварцові ампули, після чого спікали у муфельній печі, поступово нагріваючи до  $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Спечені зразки охолоджували, повторно перетирали, пресували та гомогенізували за температури  $600\text{ }^{\circ}\text{C}$  не менше 4 тижнів. Зразки гартували у холодній воді, не розбиваючи ампул. Дифрактограми порошку отримували за допомогою дифрактометра STOE STADI P ( $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання). Рентгенівський профільний аналіз та рентгеноструктурний аналіз проведено за допомогою пакету програм WinCSD. Для вивчення електронної структури проводили обчислення густини станів (DOS), заселеності електронних орбіталей за Гамільтоном (CONP), функції електронної локалізації (ELF) та поверхні Фермі.

У синтезованих трикомпонентних зразках вперше виявлено утворення низки тернарних фосфідів рідкісноземельних металів та паладію складу  $RE_5Pd_{19}P_{12}$  ( $RE = Y, Dy, Tb, Ho, Er$ ) з гексагональною структурою типу  $\text{Ho}_5\text{Ni}_{19}\text{P}_{12}$ . Кристалічну структуру синтезованих сполук вивчено методом полікристала (структурний тип  $\text{Ho}_5\text{Ni}_{19}\text{P}_{12}$ , просторова група  $P-62m$ ):

$a = 1,3142(3)\text{ нм}$ ,  $c = 0,40051(9)\text{ нм}$  для  $\text{Y}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ ;

$a = 1,3125(1)\text{ нм}$ ,  $c = 0,39877(6)\text{ нм}$  для  $\text{Tb}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ ;

$a = 1,3126(2)\text{ нм}$ ,  $c = 0,40063(8)\text{ нм}$  для  $\text{Dy}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ ;

$a = 1,31342(4)\text{ нм}$ ,  $c = 0,39839(2)\text{ нм}$  для  $\text{Ho}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ ;

$a = 1,3122(1)\text{ нм}$ ,  $c = 0,39743(8)\text{ нм}$  для  $\text{Er}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ .

Обчислено електронну структуру сполуки  $\text{Ho}_5\text{Pd}_{19}\text{P}_{12}$ . Простий електронний розподіл свідчить, що формальний заряд для кожного іона паладію становить  $+1,1$ . Криві CONP для зв'язків Pd-Ho мають слабку антизв'язувальну природу і підтверджують металевий тип зв'язку між двома елементами. Висока електронна густина зосереджена на ковалентному зв'язку Pd-P, водночас атоми гольмію є ізольованими і не діляться своєю електронною густиною з іншими атомами. Два зв'язки, що проходять через рівень Фермі, мають найвищу швидкість Фермі, що є важливим для транспортних властивостей сполуки.