

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА  $P6_3\text{-Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$ Блашко Н. М.<sup>1</sup>, Марчук О. В.<sup>1</sup>, Федорчук А. О.<sup>2</sup><sup>1</sup>Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна<sup>2</sup>Львівський національний університет ветеринарної медицини та біотехнологій імені С. З. Гжицького, Львів, Україна

Blashko.Nazarii@vnu.edu.ua

Розвиток науки і техніки вимагає безперервного пошуку, синтезу і проведення фундаментальних досліджень нових матеріалів, що володіли б необхідним комплексом фізичних та фізико-хімічних властивостей. У матеріалознавстві значний інтерес становлять складні халькогеніди рідкісноземельних металів, які характеризуються технологічністю, відтворюваністю експериментальних результатів дослідження, високою фоточутливістю та іншими властивостями. Останні зумовлені поєднанням структурних елементів та особливостями електронної будови *p*-, *d*- та *f*- енергетичних рівнів.

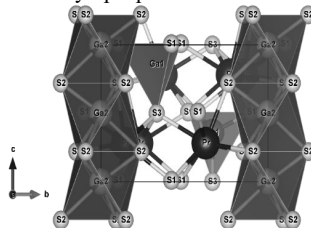
Зразок ( $m = 1$  г) стехіометричного складу  $\text{Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  синтезували сплавленням шихти, що була приготуєлена із простих речовин із високим ступенем чистоти (99,99 %) у вакуумованому ( $10^{-2}$  Па) кварцевому контейнері. Максимальна температура синтезу становила 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Рентгенофазовий аналіз сульфїду  $\text{Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  здійснювали за рентгенограмою, яка була отримана на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах  $2\Theta = 10\text{--}100^\circ$  ( $\text{CuK}\alpha$  – випромінювання, крок сканування –  $0.02^\circ$ , експозиція у кожній точці – 20 с). Кристалохімічні розрахунки здійснювали за допомогою пакету програм WinCSD.

Кристалічна структура вперше синтезованого халькогенїду  $\text{Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  ( $a = 9.9853(3)$  Å,  $c = 6.0648(2)$  Å,  $V = 523.68(4)$  Å<sup>3</sup>) належить до гексагональної сингонїї (ПГ  $P6_3$ ). Уточнення координат та теплових параметрів атомів (таблиця 1) привело до задовільних значень фактора розбіжності ( $R_1 = 0.0730$ ,  $R_p = 0.1777$ ). У структурі  $P6_3\text{-Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  (рисунок 1) атоми Pr розміщені у тригональних призмах з одним додатковим атомом, атоми статистичної суміші М ( $0.605(8)$  Ga +  $0.09(1)$  Fe) – у центрах октаєдрів, а атоми Ga – у тетраєдрах.

Елементний склад синтезованого сульфїду було додатково оцінено за допомогою EDAX аналізу:  $26.74 \pm 4.70$  ат.% Pr,  $1.20 \pm 0.17$  ат.% Fe,  $14.12 \pm 1.34$  ат. % Ga,  $57.94 \pm 3.12$  ат. % S. Розраховані ат. % елементів для  $\text{Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$  є такими: 25.64 % Pr, 0.86 % Fe, 13.68 % Ga, 59.83 S %. Результати EDAX аналізу та розрахунку добре узгоджуються між собою.

Таблиця 1. Координати та теплові параметри атомів у структурі  $P6_3\text{-Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$ 

Атоми	ПСТ	$x$	$y$	$z$	$B_{130} \times 10^2$ (Å <sup>2</sup> )
Pr	6 <i>c</i>	0.3747(2)	0.1453(2)	0.2345(5)	1.04(5)
Ga	2 <i>b</i>	1/3	2/3	0.1568(6)	0.65(13)
M	2 <i>a</i>	0	0	0.018(2)	1.7(2)
S1	6 <i>c</i>	0.1008(7)	0.5218(8)	0.0074(9)	0.9(3)
S2	6 <i>c</i>	0.1470(7)	0.2394(6)	0.2969(9)	0.8(3)
S3	2 <i>b</i>	1/3	2/3	0.5167(15)	0.6(3)

Рис. 1. Координаційне оточення атомів у структурі сульфїду  $P6_3\text{-Pr}_3\text{Fe}_{0.1}\text{Ga}_{1.6}\text{S}_7$