

ОСОБЛИВОСТІ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ НОВИХ ТЕРНАРНИХ ФОСФІДІВ Dy_{2-x}Pd_{4+x}P₃ ТА Ho₂Pd₄P₃

*Каричорт О. Р.*¹, Жак О. В.¹, Проць Ю. М.², Онук О. П.¹, Гринь Ю. М.²

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна

²Інститут хімічної фізики твердого тіла імені Макса Планка, Дрезден, Німеччина
Oksana.Karychort@lnu.edu.ua

Аналіз літературних відомостей про потрійні фосфіди рідкісноземельних та перехідних металів засвідчує, що найпоширенішими у системах $RE-T-P$, де RE = рідкісноземельний, а T = перехідний метал, є сполуки складу $RE_2T_{12}P_7$, $RE_2T_4P_3$, RET_2P_2 , $RETP$, RET_4P_{12} , RET_3P_2 , RET_5P_3 [1]. Структурний тип (СТ) $Hf_2Co_4P_3$ [2] є досить поширеним у системах $RE-T-P$ і близькоспорідненим із структурами типу $Ho_5Ni_{19}P_{12}$ [3], $Sc_5Pd_{19}P_{12}$ [4], $Nd_5Cu_{17,8}P_{12}$ [5] та $Sc_5Cu_{19}P_{12}$ [6]. Структура типу $Ho_5Ni_{19}P_{12}$ ($Z = 1$) утворюється із структури $Hf_2Co_4P_3$ ($Z = 4$) внаслідок заміщення атомів рідкісноземельного металу атомами перехідних металів у позиції $3f$ ($x00$). Цікаво, що в деяких системах $RE-T-P$ спостережено утворення пар $RE_2T_4P_3-RE_5T_{19}P_{12}$, зокрема $Sc_5Co_{19}P_{12}-Sc_2Co_4P_3$, $Sc_5Ni_{19}P_{12}-Sc_2Ni_4P_3$, $Zr_5Co_{19}P_{12}-Zr_2Co_4P_3$, $Hf_5Co_{19}P_{12}-Hf_2Co_4P_3$ і $Gd_5Co_{19}P_{12}-Gd_2Co_4P_3$ [1], що дає змогу припустити можливість утворення серії твердих розчинів.

Нашою метою був синтез нових тернарних фосфідів складу $RE_2Pd_4P_3$ та вивчення їхньої кристалічної структури.

Для приготування зразків використовували стружку рідкісноземельних металів диспрозію та гольмію (0,9995 мас. част. основного компонента) та порошки паладію (0,9999 мас. част.) і червоного фосфору (0,9998 мас. част.). Вихідні компоненти змішали у визначеному співвідношенні, спресували в брикети у сталевій пресформі, запаяли у вакуумовані кварцові ампули та спікали у муфельній печі при 1100 °C протягом п'яти діб, після чого повільно охолодили до кімнатної температури. Для ліпшої гомогенізації зразки перетирали, знову спресували та відпалювали при 800 °C протягом трьох тижнів. Монокристали нових фосфідів вилучили із розбитих зразків. *Експериментальний масив інтенсивностей відбиття від монокристалів отримали за допомогою дифрактометра Rigaku AFC7, обладнаного детектором Saturn 724+ CCD (MoK α випромінювання, довжина хвилі $\lambda = 0,71073$ Å).*

Структуру нових тернарних фосфідів $Dy_{2-x}Pd_{4+x}P_3$ ($x = 0,15$) та $Ho_2Pd_4P_3$ визначено методом монокристалу: СТ $Hf_2Co_4P_3$, ПГ $P-62m$, параметри комірки $a = 13,1333$ Å, $c = 4,0032$ Å, $R_F = 0,0377$, $wR_F = 0,0382$ для $Dy_{2-x}Pd_{4+x}P_3$ ($x = 0,15$) та $a = 13,1727$ Å, $c = 4,0150$ Å, $R_F = 0,0266$, $wR_F = 0,0278$ для $Ho_2Pd_4P_3$.

Атоми у структурі тернарних фосфідів $Dy_{2-x}Pd_{4+x}P_3$ ($x = 0,15$) та $Ho_2Pd_4P_3$ розташовані у дзеркальних площинах $z = 1/4$ та $z = 3/4$. Кристалічній структурі нових фосфідів притаманна тетрагонально призматична координація атомів фосфору.

1. Villars P., Cenzual K., Eds. Pearson's Crystal Data: Crystal Structure Database for Inorganic Compounds (Release 2019/20); ASM International®: Materials Park, Ohio (USA), 2019.

2. Ganglberger E. Monatsh. Chem. 1968, 99, 557–565.

3. Pivan J.-Y., Guérin R., Sergeant M. Inorg. Chim. Acta. 1985, 109, 221–224.

4. Jeitschko W., Reinbold E. J. Z. Naturforsch. 1985, 40b, 900–905.

5. Oryshchyn S. V., Chykhrij S. I., Babizhetskyy V. S., Kuz'ma Y. B. Dokl. Acad. Nauk USSR Ser. B 1991, 6, 138–141 (in russ).

6. Chykhrij S. I., Loukashouk G. V., Oryshchyn S. V., Kuz'ma Y. B. J. Alloys Compds. 1997, 248, 224–232.