

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА АСИМЕТРИЧНОЇ ФАЗИ Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇

Блашко Н. М., Смітюх О. В., Марчук О. В.

Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна
Blashko.Nazarii@vnu.edu.ua

Леговані халькогенідні фази R₃Ga_{1.67}X₇ : A²⁺ (R – PЗМ; A – d-елемент; X – S, Se) можуть прогнозовано виступати перспективними матеріалами для дослідження магнітних, термоелектричних, нелінійно-оптичних та інших характеристик. Включення двовалентних перехідних елементів у структуру зазначених халькогенідів дає можливість впливати на геометричні параметри поліедрів, що, у свою чергу, дозволяє точніше налаштувати їхні фізичні властивості. Такий підхід відкриває перспективи для синтезу матеріалів з бажаними, заздалегідь прогнозованими властивостями, що може бути використано для створення нових функціональних матеріалів з заданими характеристиками.

Сульфід складу Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇ (a = 9.6574(5) Å, c = 6.0812(5) Å) синтезували на основі Tb₃Ga_{1.67}S₇ шляхом часткового заміщення атомів галію в ПСТ 2a атомами нікелю. Кристалічна структура сульфиду вивчалася рентгенівським методом порошку. Розрахунок та візуалізацію кристалічної структури виконано за допомогою програм WinCSD та VESTA.

Координати та теплові параметри атомів у структурі синтезованого сульфиду подані в таблиці 1. Теоретична, експериментальна та різницева між ними дифрактограми для сульфиду Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇ представлені на рисунку 1.

У структурі Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇ ПСТ 6c заповнена атомами тербію, що формують тригональні призми з одним додатковим атомом сульфуру (КЧ = 7). Атоми статистичної суміші M (0.1 Ni + 0.6 Ga) ПСТ 2a центрують октаедри. Атоми Ga ПСТ 2b мають тетраедричне оточення. Елементарна комірка та координаційні поліедри у структурі синтезованого сульфиду подані у вставці на рисунку 1.

Таблиця 1. Координати та теплові параметри атомів у структурі Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇

Атоми	ПСТ	x	y	z	B ₁₃₀ × 10 ² (Å ²)
Tb	6 c	0.3773(2)	0.2247(3)	0.1897(11)	1.00(14)
Ga	2 b	1/3	2/3	0.1154(14)	1.0(7)
M	2 a	0	0	0.490(3)	0.4(8)
S1	6 c	0.4920(11)	0.0793(11)	0.448(2)	1.0(4)
S2	6 c	0.1064(10)	0.2316(11)	0.259(2)	0.3(4)
S3	2 b	1/3	2/3	0.493(3)	1.9(10)

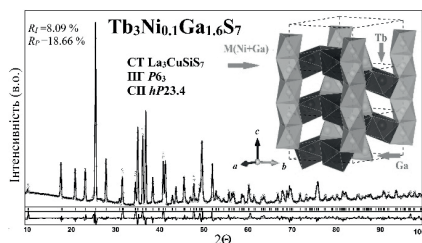


Рис. 1. Теоретична (–), експериментальна (—) та різницеві між ними дифрактограми для Tb₃Ni_{0.1}Ga_{1.6}S₇. [CuK_α-випромінювання (λ = 1.54185 Å)]. **Вставка:** Елементарна комірка та координаційні поліедри у структурі синтезованого сульфиду