

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Pr}(\text{Nd})_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ *Марчук О. В.*¹, Гулай Л. Д.²

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,

¹кафедра неорганічної та фізичної хімії,²кафедра екології та охорони навколишнього середовища

пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк

Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Сполуки, що містять у своєму складі рідкісноземельні метали (РЗМ) і перехідні 3d-метали Періодичної системи, зокрема нікель, є перспективними речовинами для розробки багатофункціональних матеріалів, що володіють магнітними властивостями. Відомо, що кристалічна структура є фундаментальною характеристикою речовини, яка визначає широкий спектр її фізичних та хімічних властивостей. Відомості про кристалічну структуру речовини дозволяють також прогнозувати шляхи синтезу нових матеріалів для потреб напівпровідникових технологій. Представлені результати є одним із етапів систематичного вивчення кристалічної структури сполук, що утворюються у халькогенідних системах $\text{NiS} - \text{R}_2\text{S}_3 - \text{D}^{\text{IV}}\text{S}_2$ ($\text{R} - \text{PЗМ}$, $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$).

Сплави стехіометричного складу $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ виготовляли сплавленням простих речовин напівпровідникової чистоти у вакуумованих кварцевих контейнерах циліндричної форми (величина залишкового тиску – 0,1 Па). Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу – 1420 К. Гомогенізуючий відпал проводили за температури 770 К впродовж 500 годин. Після відпалювання сплави гартували в холодній воді без попереднього розбивання ампул.

Розрахунок кристалічної структури сполук $\text{Pr}(\text{Nd})_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ здійснювали за дифрактограмами, що були отримані на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\Theta = 10\text{--}100^\circ$ ($\text{CuK}\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0.02° , експозиція у кожній точці – 20 с). Кристалохімічні розрахунки проводили використовуючи пакет програм WinCSD.

Комплекс проведених розрахунків дозволив нам констатувати приналежність кристалічної структури сполук $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ до структурного типу $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiS}_7$ (ПГ $P6_3$) та визначити параметрами елементарних комірок: $a = 1.01033(3)$ нм і $c = 0.57923(3)$ нм для $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ та $a = 1.00610(3)$ нм і $c = 0.57919(3)$ нм для $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$. У структурі синтезованих сполук атоми $\text{Pr}(\text{Nd})$ координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру, атоми Ni – по шість атомів Сульфуру, утворюючи майже симетричні октаедри, а атоми Ge центровані у тетраедрах (рис.). Міжатомні віддалі у структурах синтезованих сполук добре узгоджуються з відповідними сумами іонних радіусів компонентів.

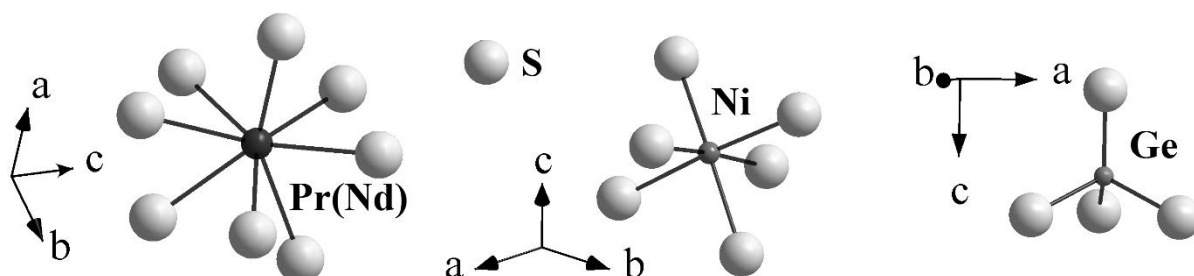


Рис. Координаційне оточення атомів Pr , Nd , Ni та Ge у сполуках $\text{Pr}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ і $\text{Nd}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$