

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{Er}_{2.36}\text{R}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ (R – Ce, Pr)

Смітюх О. В., Марчук О. В., Олексеюк І. Д.

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки,
кафедра неорганічної та фізичної хімії,
пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна
Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Детальне вивчення кристалічної структури тетрарних сполук є вагомим елементом поетапного дослідження нових матеріалів, які мають практичне використання у сучасних напівпровідникових технологіях. Міжатомні відстані та координаційне оточення атомів дають уявлення про внутрішню структуру речовини, а природа самих атомів є першопричиною її властивостей. У цьому контексті варто зазначити, що речовини до складу яких входять рідкісноземельні елементи володіють унікальними магнітними характеристиками.

Зразки для дослідження складу $\text{Er}_{2.36}\text{R}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ (R – Ce, Pr) готували сплавленням простих речовин напівпровідникової чистоти у вакуумованих кварцевих контейнерах циліндричної форми (величина залишкового тиску становила 0,1 Па). Синтез проводили у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу – 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Розрахунок кристалічної структури нових тетрарних сполук $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ 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). Обробку даних та визначення кристалічної структури проводили використовуючи пакет програм WinCSD.

Нами встановлено, що сполуки $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ кристалізуються у гексагональній сингонії (ПГ $P6_3$, символ Пірсона $hP23$) з параметрами елементарних комірок: $a = 0.97386(5)$ нм і $c = 0.58698(5)$ нм для $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ та $a = 0.97481(5)$ нм і $c = 0.58459(4)$ нм для $\text{Er}_{2.36}\text{Pr}_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$.

Кристалічна структури досліджених сполук належать до структурного типу $\text{Dy}_3\text{Ge}_{1.25}\text{S}_7$. У положеннях $6c$, які займають атоми Dy, локалізована статистична суміш (Er + Ce(Pr)), атоми Ge у структурі заповнюють дві ПСТ – $2a$ і $2b$ (рис.).

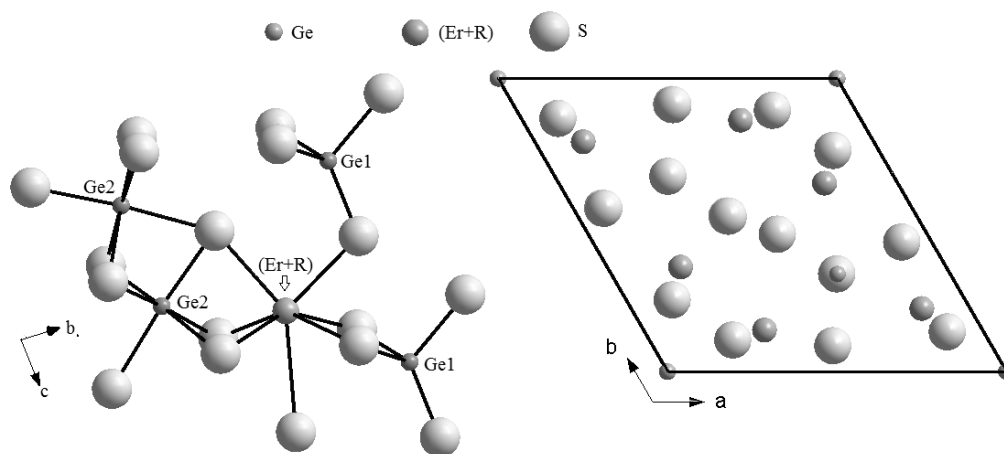


Рис. Розташування атомів Ge1 та Ge2 навколо статистичної суміші (Er + Ce(Pr)) у сполуках $\text{Er}_{2.36}\text{Ce}(\text{Pr})_{0.65}\text{Ge}_{1.28}\text{S}_7$ та проекція елементарної комірки на площину ab