

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $Tb_3Ni_{0,5}Si_7$ *Мельничук Х. О.*, Познанська М. М., Марчук О. В., Гулай Л. Д.Хімічний факультет СНУ імені Лесі Українки, пр. Волі 13, 43025 м. Луцьк, Україна
Marchuk.Oleg@eenu.edu.ua

Розвиток фундаментальних наук і технічний прогрес безпосередньо пов'язані із вдосконаленням матеріалознавчої науки. Нинішній світ із його потребами є рушійною силою для пошуку нових матеріалів, що забезпечували б високу продуктивність різних галузей економіки та інженерної діяльності. Напівпровідникові сполуки на основі халькогенідних матеріалів широко використовуються в електроніці, радіо- та електротехніці, ядерній енергетиці, телекомунікації, при розробці альтернативних джерел енергії. Дослідження кристалічної структури нових матеріалів дає цінну інформацію для розвитку кристалохімії халькогенідів та для збагачення баз кристалографічних даних.

У роботі вперше представлено результати вивчення кристалічної структури сполуки $Tb_3Ni_{0,5}Si_7$ (таблиця 1) рентгенівським методом порошку.

Сплав стехіометричного складу $Tb_3Ni_{0,5}Si_7$ виготовляли сплавленням простих речовин напівпровідникової чистоти у вакуумованому (10^{-2} Па) кварцевому контейнері. Необхідні кількості вихідних речовин зважували на аналітичних вагах ВЛР 200 з точністю до 0,00005 г (загальна маса вихідної шихти становила 0,8 г). Синтез здійснювали у муфельній печі з програмним управлінням технологічними процесами МП-30. Максимальна температура синтезу становила 1420 К, гомогенізуючий відпал тривав 500 годин за температури 770 К. Розрахунок кристалічної структури здійснювали за дифрактограмою, яка була отримана на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\Theta = 10 - 100^\circ$ (CuK α – випромінювання, крок сканування – $0,05^\circ$, експозиція у кожній точці – 20 с). Обробку даних та визначення кристалічної структури здійснювали за допомогою пакету програм WinCSD.

Синтезована сполука кристалізується в гексагональній сингонії (СТ La $_3$ Mn $_{0,5}$ Si $_7$, ПГ P6 $_3$ (№ 173)). У її структурі атоми Tb оточені атомами S (KЧ = 8), для атомів Ni характерним є KЧ = 6, а для атомів Si – KЧ = 4.

Таблиця 1. Результати вивчення кристалічної структури сполуки $Tb_3Ni_{0,5}Si_7$

Емпірична формула	$Tb_3Ni_{0,5}Si_7$
a , (нм)	0,98056(5)
c , (нм)	0,56476(5)
V , (нм 3)	0,47026(9)
Кількість атомів в комірниці	23
Кількість вільних параметрів	20
Кількість атомних позицій	6
Розрахована густина (г/см 3)	5,357(1)
Адсорбційний коефіцієнт (1/см)	1186,18
Спосіб обрахунку	Повнопрофільний
Програма для обрахунку	CSD
R_i ; R_p	0,0720; 0,2472
2θ ; $\sin\theta/\lambda$ (макс)	100,05; 0,494
Фактор шкали	0,835(6)
Вісь текстури і параметр	[100] і 0,85(7)