КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$

Марчук О. В., Смітюх О. В.
Волинський національний університет імені Лесі Українки
факультет хімії, фармації та технологій, Україна
Marchuk.Oleg@vnu.edu.ua

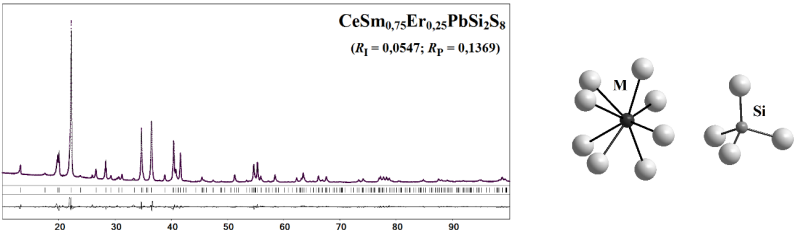
Хімічний дизайн складних халькогенідів набуває важливого значення на фоні зростаючого попиту на нові матеріали. Особливий розвиток енергозберігаючих технологій ставить перед ученими не лише питання здешевлення матеріальної бази, а й покращення існуючих характеристик відомих матеріалів. Як один із методів вирішення цієї задачі можна застосовувати заповнення однієї кристалографічної позиції (ПСТ) близькими, за своєю природою, атомами. Відомо, що Ce, Sm і Er є представниками однієї родини рідкісноземельних металів, а отже цілком відповідають вище зазначеному критерію.

Кристалічна структура вперше синтезованої сульфідної фази $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$ проіндексована в тригональній сингонії (ПГ $R\bar{3}c$, символ Пірсона $hR78$). Всі розрахунки, що пов'язані з розшифруванням і уточненням структури були виконані за допомогою пакету програм WinCSD. У таблиці 1 наведено координати атомів та їх ізотропні параметри у структурі $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$.

Таблиця 1. Координати та теплові параметри атомів у структурі $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$

Атом	ПСТ	*x*	*y*	*z*	$B_{ізо}\times10^{-2}$ (нм^2)
M	18*e*	0,3199	0,3199	0,2500	2,52
Si	12*c*	0,3333	0,6667	0,3255	2,52
S1	12*c*	0,3333	0,6667	0,2454	2,52
S2	36*f*	0,0353	0,2414	0,1856	2,52
M (0,33 Ce + 0,25 Sm + 0,09 Er + 0,33 Pb)					

На рисунку 1 представлено теоретичний, експериментальний та різницевий профілі дифрактограми сульфіду $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$. У структурі $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$ статистична суміш атомів M (0,33 Ce + 0,25 Sm + 0,09 Er + 0,33 Pb) локалізована в правильній системі точок (ПСТ) 18*e* і координує навколо себе вісім атомів Сульфуру, а атоми Si (ПСТ 12*c*) мають тетраедричне оточення атомами Сульфуру.



а) б)

Рис. 1. а) Теоретичний, експериментальний та різницевий профілі дифрактограми сульфіду $CeSm_{0,75}Er_{0,25}PbSi_2S_8$ (Cu $K\alpha_1$ проміння, λ = 0,154056 нм);
б) координаційне оточення атомів статистичної суміші M та атомів Si