

УДК 546:548.736(546.659:546.73:546.81:546.22)

Х. О. Мельничук, І. Д. Олексеюк, докт. хім. наук, проф., Л. Д. Гулай, докт. хім. наук, проф.; О. В. Марчук, канд. хім. наук, доц.

Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки, Україна

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$

Kh. O. Melnychuk, I. D. Olekseyuk, Dr., Prof., L. D. Gulay, Dr., Prof., O. V. Marchuk, PhD., Assoc. Prof.

CRYSTAL STRUCTURE OF THE $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$

Перспективним напрямком розвитку сучасного матеріалознавства є вивчення характеру взаємодії компонентів у складних РЗМ-вмісних халькогенідних системах та кристалічної структури багатокомпонентних сполук, що в них утворюються. Серед таких систем важливе місце займають складні халькогенідні системи $\text{R}_2\text{S}(\text{Se})_3 - \text{MS}(\text{Se}) - \text{DS}(\text{Se})_2$ (R – РЗМ, D^{IV} – Si, Ge, Sn).

Сполуки із загальною формулою R_3MDS_7 (ПГ $P6_3$), (R – РЗМ; M – одновалентний метал (Cu, Ag) або 1/2 двовалентного металу (Mg, Mn, Fe, Co, Ni і ін.) представляють інтерес через можливість їх застосування як перспективних матеріалів з цікавими магнітними властивостями [1].

Вивчення кристалічної структури сполуки $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$ є одним із етапів систематичного дослідження взаємодії компонентів вище вказаних систем та кристалічної структури сполук, що в них утворюються [2 - 4] і ін.

Зразок складу $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$ готували сплавленням елементарних компонентів напівпровідникової чистоти у вакуумованих кварцевих контейнерах циліндричної форми. 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 нової тетравної сполуки $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$ здійснювали за дифрактограмою, яка була отримана на дифрактометрі ДРОН 4-13 в межах $2\theta = 10 - 100^\circ$ ($\text{CuK}\alpha$ – випромінювання, крок сканування – 0.02° , експозиція у кожній точці – 20 с). Обробку даних та визначення кристалічної структури здійснювали за допомогою пакету програм WinCSD [5].

Кристалічна структура нової тетравної сполуки вивчена рентгенівським методом порошку. Дифрактограма складу $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$ проіндексована в гексагональній сингонії (просторова група $P6_3$) з періодами ґратки $a = 0,98234(2)$ нм і $c = 0,61355(2)$ нм. Аналіз індексів hkl рефлексів та їх інтенсивностей вказав на можливу приналежність структури сполуки $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$ до структурного типу $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiS}_7$ (ПГ $P6_3$ [6]). Для уточнення структури був вибраний варіант, в якому положення атомів La сполуки $\text{La}_3\text{Mn}_{0.5}\text{SiS}_7$ зайняте атомами Sm, положення атомів Mn зайняте атомами, Co а положення атомів Si зайняте атомами Sn.

У структурі цієї сполуки (рис. 1) атоми Sm розміщені у тригональних призмах з двома додатковими атомами $[\text{Sm}3\text{S}_14\text{S}_21\text{S}_3]$, атоми Co – у центрах октаєдрів $[\text{Co}6\text{S}_2]$ а атоми Sn – у тетраедрах $[\text{Sn}3\text{S}_11\text{S}_3]$.

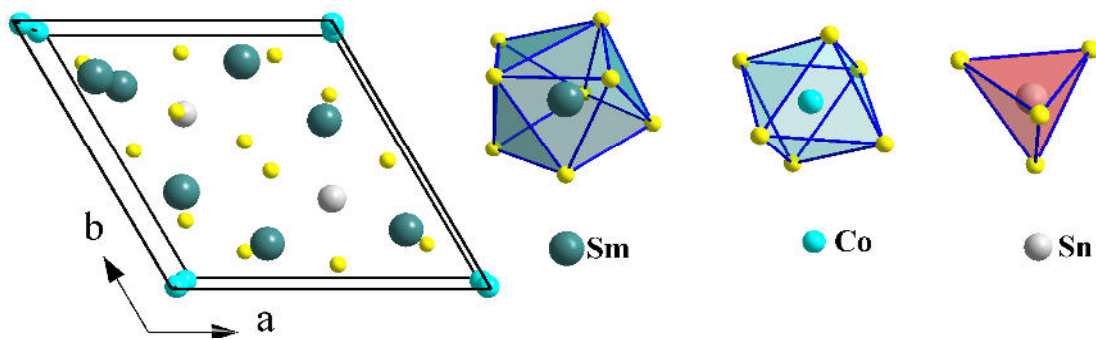


Рис. 1. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sm, Co та Sn у структурі сполуки $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$.

Рентгенівським методом порошку вперше вивчено кристалічну структуру сполуки $\text{Sm}_3\text{Co}_{0.5}\text{SnS}_7$. Тетрарна сполука кристалізується у гексагональній сингонії (ПГ $P6_3$) з параметрами елементарної комірки $a = 0,98234(2)$ нм, $c = 0,61355(2)$ нм.

Література

1. Crystal structure and magnetic properties of $\text{R}_3\text{Co}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$ and Tm) and $\text{R}_3\text{Ni}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Ce}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$ and Tm) / Daszkiewicz M., Pashynska Yu. O., Marchuk O. V. et al. // J. Alloys and compounds. – 2015. – V.647. – P.445-455.
2. Marczuk O.V. Równowagi fazowe w układach $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{Mn}(\text{Co})\text{S} - \text{GeS}_2$ przy temperaturze 770 K / O. V. Marczuk, V. Ya. Szemet, L. D. Gulay // Fundacja “Oswiata i Nauka bez Granic PRO FUTURO” – 2013. – № 2(1). – P.218-225.
3. Crystal structure of $\text{R}_3\text{Co}_{0.5}\text{GeS}_7$ ($r = \text{rare earth}$) / [Daszkiewicz M., Pashynska Yu., Marchuk O., Gulay L.] // Collected Abstracts of the 55st Polish Crystallographic Meeting. Wroclaw (Poland), 27-29 June, 2013. – A. 47.
4. Crystal structure of $\text{Sm}_3\text{Fe}_{0.5}\text{SnS}_7$ / [Pashynska Yu. O., Daszkiewicz M., Marchuk O. V., Gulay L. D.] // Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали: матеріали VII Міжнар. наук. конф. – Луцьк : Вежа – Друк, 2014. – С.39-41.
5. CSD-Universal program package for single crystal and powder structure data treatment / L. G. Aksel'rud, Yu. N. Grin', P. Yu. Zavalii et al. // Collected Abstracts 12th European Crystallogr. Meet., Moscow, USSR, 20-28 August, – 1989. – Vol. 3. – P.155.
6. Collin G. Structure cristalline de $\text{La}_6\text{MnSi}_2\text{S}_{14}$ / G. Collin, P. Laruelle // Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, Serie C, Sciences Chimiques. – 1970. – V.270. – P.410-412.