

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА $\text{EuGa}_{1,68}\text{Sn}_{0,32}$

Токайчук Я.О., Огоновський І.К., Кулінич О.І., Гладішевський Р.Є.

Львівський національний університет імені Івана Франка,

[yaroslav.tokaychuk@lnu.edu.ua](mailto:yaroslav.tokaychuk@lnu.edu.ua)

На ізоконцентраті 33,3 ат.% Eu системи Eu–Ga–Sn при 400°C встановлено існування нової тернарної сполуки  $\text{EuGa}_{1,68}\text{Sn}_{0,32}$ . Її кристалічну структуру визначено методом порошку за масивом рентгенівських дифракційних даних сплаву  $\text{Eu}_{33,3}\text{Ga}_{56,7}\text{Sn}_{10}$ , отриманим на дифрактометрі STOE Stadi P (проміння Cu  $K\alpha_1$ , інтервал сканування  $6^\circ \leq 2\theta \leq 110^\circ$ , крок сканування  $0,015^\circ$ ). Зразок синтезували з чистих металів (з вмістом основного компонента не менше 99,9 мас.%) електродуговим сплавлянням в атмосфері аргону і гомогенізували у вакуумованій кварцовій ампулі при 400°C впродовж 1 місяця. Параметри профілю дифрактограми та параметри кристалічної структури тернарної сполуки уточнювали методом Рітвельда, використовуючи пакет програм FullProf Suite [1]. Елементний та кількісний склад тернарної сполуки підтверджено результатами енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (скануючий електронний мікроскоп Tescan Vega3 LMU). Визначений цим методом склад сполуки ( $\text{Eu}_{0,99(3)}\text{Ga}_{1,70(3)}\text{Sn}_{0,30(2)}$ ) відповідає результатам уточнення параметрів структури методом Рітвельда.

Кристалічна структура сполуки  $\text{EuGa}_{1,68(2)}\text{Sn}_{0,32(2)}$  (табл.) належить до типу (СТ)  $\text{AlB}_2$ : символ Пірсона (СП)  $hP3$ , просторова група (ПГ)  $P6/mmm$ ,  $a = 4,3870(4)$ ,  $c = 4,5781(4)$  Å,  $R_B = 0,0286$ ,  $R_F = 0,0465$ . З літератури відомо про існування високотемпературної модифікації бінарного галіду  $\text{EuGa}_2$  з цією структурою ( $a = 4,345$ ,  $c = 4,520$  Å) [2], однак при 400°C стабільною є низькотемпературна модифікація зі СТ  $\text{KHg}_2$  (СП  $oI12$ , ПГ  $Imma$ ,  $a = 4,6459$ ,  $b = 7,6255$ ,  $c = 7,6379$  Å) [3]. Таким чином,  $\text{EuGa}_{1,68(2)}\text{Sn}_{0,32(2)}$  при 400°C є індивідуальною тернарною сполукою, що, можливо, утворюється шляхом стабілізації атомами Sn твердого розчину заміщення на основі високотемпературної модифікації  $\text{EuGa}_2$  до нижчих температур.

### Таблиця

Координати, заповнення позицій та ізотропні параметри зміщення атомів у структурі тернарної сполуки  $\text{EuGa}_{1,68(2)}\text{Sn}_{0,32(2)}$

Атоми	ПСТ	Координати атомів			$B_{\text{iso}}, \text{Å}^2$
		$x$	$y$	$z$	
Eu	$1a$	0	0	0	0,52(7)
$M = 0,842(10)\text{Ga} + 0,158(10)\text{Sn}$	$2d$	1/3	2/3	1/2	0,96(11)

Значення міжатомних віддалей Eu–Eu ( $4,3870(4)$  Å), Eu–M ( $3,4140(4)$  Å) є більшими, чи відповідають сумам відповідних металічних радіусів Eu, Ga і Sn, що вказує на відсутність значної взаємодії між атомами. Натомість, значення міжатомних віддалей M–M ( $2,5329(4)$  Å) є меншими за суми металічних радіусів відповідних атомів, що може вказувати на частково ковалентний характер зв'язків між атомами  $p$ -елементів у структурі сполуки  $\text{EuGa}_{1,68(2)}\text{Sn}_{0,32(2)}$ .

У структурі типу  $\text{AlB}_2$  ці атоми формують плоскі графітоподібні сітки перпендикулярно до кристалографічного напрямку [001].

1. Rodríguez-Carvajal J. Recent developments of the Program FULLPROF // Commission on Powder Diffraction (IUCr), Newsletter. – 2001. – 26. – P. 12–19.

2. Дзяна Д.І., Марків В.Я., Гладішевський Є.І. Кристалічна структура сполуки  $\text{EuGa}_2$  // Допов. акад. наук Укр. РСР. – 1964. – С. 1167–1179.

3. Sichevich O.M., Cardoso Gil R.H., Grin Y. Refinement of the crystal structure of europium digallide,  $\text{EuGa}_2$  // Z. Kristallogr. – New Cryst. Struct. – 2006. – 221. – P. 261–262.