

МОНОКРИСТАЛЬНЕ УТОЧНЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ СПОЛУКИ NdSi

Семерак Х.¹, Ничипорук Г.¹, Муць І.^{1,2}, Пьоттген Р.², Заремба В.¹

¹Львівський національний університет імені Івана Франка, halyna.nychporuk@lnu.edu.ua

²Інститут неорганічної хімії, Університет Мюнстера, Мюнстер, Німеччина

Бінарні силіциди рідкісноземельних елементів еквіатомного складу є антиферромагнетиками, за винятком PrSi та NdSi, які впорядковуються ферромагнітно за 54 і 46 К відповідно, а LaSi – немагнітний. Незважаючи на те, що ці сполуки досліджують впродовж багатьох років, кристалічні структури для окремих з них детально не вивчені. Уточнення кристалічної структури сполуки NdSi – мета нашої праці.

Монокристали сполуки NdSi отримали під час синтезу монокристалів сполуки Nd₂Si₂In. Зразок складу Nd_{0,40}Si_{0,40}In_{0,20} синтезували електродуговою плавкою чистих компонентів і відпалили за 870 К у вакуумованій кварцовій ампулі протягом одного місяця. Оскільки монокристалів у цьому зразку не виявили, то виконали їхній синтез з використанням спеціальної температурної обробки одержаного зразка у високочастотній печі. У результаті виявили монокристали різної форми двох типів.

Результати EDX аналізу монокристала (скануючий електронний мікроскоп Zeiss EVOMA10), для якого встановлено орторомбічну сингонію, є наступні – 49(1) ат. % Nd, 51(1) ат. % Si, і близькі за складом до сполуки NdSi. Розшифрування й уточнення її кристалічної структури виконано в рамках моделі структурного типу FeB [1] з використанням пакету програм Shelx-97 [2] на основі масиву експериментальних відбиттів *hkl*, одержаних на монокристальному автодифрактометрі StoeIPDSII (МоК α -випромінювання).

Сполука NdSi кристалізується у структурному типі FeB; просторова група *Pnma*; $a = 0,81949(16)$; $b = 0,39272(8)$; $c = 0,58814(12)$ нм; $R1 = 0,0156$; $wR2 = 0,0309$; 406 експериментальних відбиттів *hkl*; 14 уточнених параметрів. Уточнені координати і параметри теплового зміщення у цій структурі подано у таблиці.

Таблиця

Уточнені координати та параметри теплового зміщення атомів
у структурі сполуки NdSi

Атом	ПСТ	x	y	z	$U_{\text{iso}} \cdot 10^2, \text{нм}^2$
Nd	4c	0,17940(2)	1/4	0,61373(2)	0,01187(9)
Si	4c	0,03570(13)	1/4	0,12300(13)	0,01246(16)
Атом	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{13}	
Nd	0,01131(10)	0,01255(10)	0,01174(11)	0,00049(5)	
Si	0,0120(3)	0,0124(3)	0,0130(4)	0,0000(2)	

$$U_{12} = U_{23} = 0$$

Координаційними многогранниками для атомів більшого розміру (Nd) є деформовані пентагональні призми з додатковими атомами напроти основ та трьох бокових граней (КЧ=15). Типовими поліедрми для атомів Si є тригональні призми з трьома додатковими атомами напроти бокових граней (КЧ = 9). Структуру сполуки NdSi можна представити укладкою колон тригональних призм навколо атомів меншого розміру – силіцію (рис.).

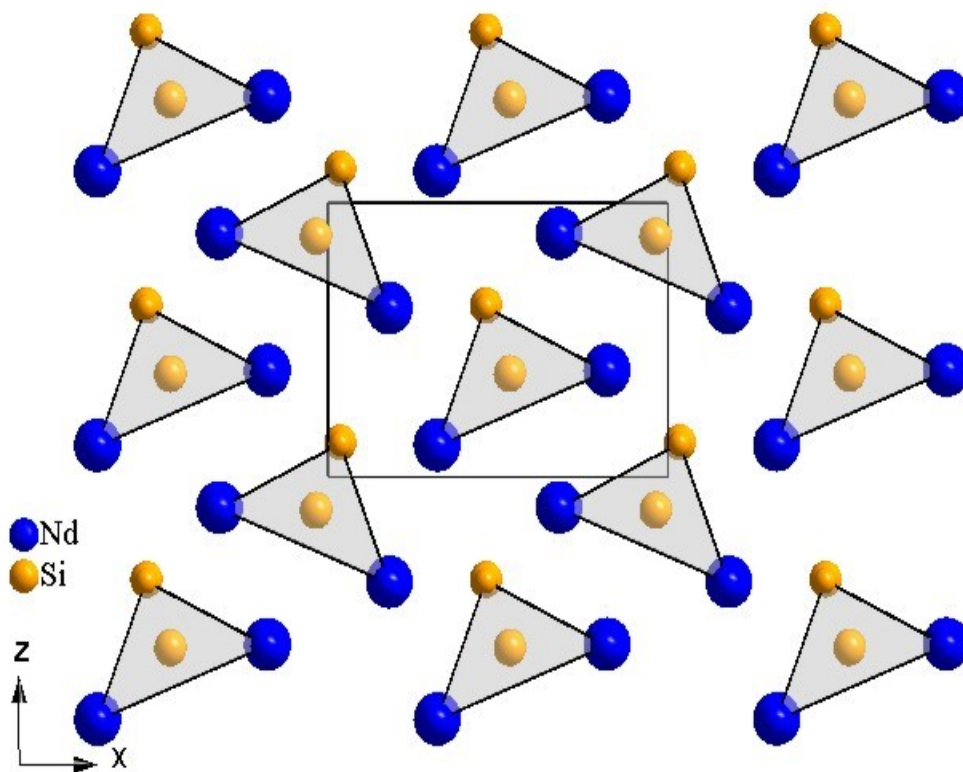


Рис. Укладка колон тригональних призм навколо атомів силіцію у структурі сполуки NdSi

Муць І. вдячний за фінансову підтримку частини експериментальних робіт у рамках дослідницької стипендії фонду DAAD (Німеччина).

1. Hendricks S.B., Kosting P.R. The Crystal Structure of Fe_2P , Fe_2N , Fe_3N and FeB // Z. Kristallogr. 1930. Vol. 74. P. 511-533.

2. Sheldrick G.M. SHELX-97: Program for Crystal Structure Refinement. University of Göttingen, Germany, 1997.