

Міністерство освіти і науки України
Східноєвропейський національний університет
імені Лесі Українки

О. В. Марчук
Л. Д. Гулай

Квазіпотрійні халькогенідні системи
 $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$
(R – PЗМ; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)

Монографія

Луцьк
Вежа-Друк
2018

УДК 548.3
М 30

Рекомендовано вченою радою
Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки
(протокол № 19 від 26 грудня 2017 року)

Рецензенти:

Федорчук А. О. – доктор хімічних наук, професор кафедри біохімії та загальної хімії Львівського національного університету ветеринарної медицини та біотехнологій імені С. З. Гжицького;

Федосов С. А. – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри експериментальної фізики та інформаційно-вимірювальних технологій Східноєвропейського національного університету імені Лесі Українки.

Марчук О. В.

Квазіпотрійні халькогенідні системи $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$
М 30 (R – PЗМ; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se) : монографія /
О. В. Марчук, Л. Д. Гулай. – Вежа-Друк, 2018. – 132 с.

ISBN 978-966-940-133-5

У монографії охарактеризовано фазові рівноваги у системах R – Pb – D^{IV} – X на перерізах $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$ (R – PЗМ; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se) та структурні типи у яких кристалізуються бінарні, тернарні та тетрарні сполуки.

Рекомендовано студентам, аспірантам, викладачам та науковцям хімічних спеціальностей.

© Марчук О. В., Гулай Л. Д., 2018

ISBN 978-966-940-133-5

© Маліневська І. П. (обкладинка), 2018

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ	6
ПЕРЕДМОВА	7
РОЗДІЛ 1. КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ БІНАРНИХ СПОЛУК	8
1.1. Системи Pb – X (X – S, Se)	8
1.2. Системи R – X (R – PЗМ; X – S, Se)	8
1.3. Системи D ^{IV} – X (D ^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)	13
РОЗДІЛ 2. КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕРНАРНИХ СПОЛУК	14
2.1. Системи PbX – D ^{IV} X ₂ (D ^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)	15
2.2. Системи PbX – R ₂ X ₃ (R – PЗМ; X – S, Se)	15
2.3. Системи R ₂ X ₃ – SiX ₂ (R – PЗМ; X – S, Se)	17
2.4. Системи R ₂ X ₃ – GeX ₂ (R – PЗМ; X – S, Se)	19
2.5. Системи R ₂ X ₃ – SnX ₂ (R – PЗМ; X – S, Se)	20
РОЗДІЛ 3. СТРУКТУРНІ ТИПИ	22
3.1. Структурні типи, в яких кристалізуються бінарні сполуки PbX (X – S, Se)	22
3.1.1. Структурний тип NaCl (ПГ $Fm\bar{3}m$)	22
3.1.2. Структурний тип GeS (ПГ $Pnma$)	23
3.1.3. Структурний тип CsCl (ПГ $Pm\bar{3}m$)	24
3.1.4. Структурний тип TIJ (ПГ $Cmcm$)	24
3.2. Структурні типи, в яких кристалізуються бінарні сполуки R₂X₃ (R – PЗМ; X – S, Se)	25
3.2.1. Структурний тип Sc ₂ S ₃ (ПГ $Fddd$)	27
3.2.2. Структурний тип YScS ₃ (ПГ $Pna2_1$)	28
3.2.3. Структурний тип U ₂ S ₃ (ПГ $Pnma$)	29
3.2.4. Структурний тип Ho ₂ S ₃ (ПГ $P2_1/m$)	29

3.2.5.	Структурний тип Th_3P_4 (ПГ $I\bar{4}3d$)	31
3.2.6.	Структурний тип La_2S_3 (ПГ $Pnma$)	31
3.2.7.	Структурний тип Tm_2S_3 (ПГ $P2_1/m$)	33
3.2.8.	Структурний тип Al_2O_3 (ПГ $R\bar{3}c$)	34
3.2.9.	Структурний тип Mn_2O_3 (ПГ $Ia\bar{3}$)	35
3.2.10.	Структурний тип Yb_2S_3 (ПГ $P6_3cm$)	36
3.2.11.	Структурний тип UAs_2 (ПГ $P4/nmm$)	37
3.3.	Структурні типи, в яких кристалізуються бінарні сполуки $\text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$; $\text{X} - \text{S, Se}$)	38
3.3.1.	Структурний тип SiS_2 (ПГ $Ibam$)	38
3.3.2.	Структурний тип ZnCl_2 (ПГ $I\bar{4}2d$)	39
3.3.3.	Структурний тип GeS_2 (ПГ Pc)	40
3.3.4.	Структурний тип GeS_2 (ПГ $P2_1/c$)	42
3.3.5.	Структурний тип GeS_2 (ПГ $Fdd2$)	43
3.3.6.	Структурний тип ZnBr_2 (ПГ $I4_1/acd$)	44
3.3.7.	Структурний тип 2H-CdJ_2 (ПГ $P\bar{3}m1$)	45
3.3.8.	Структурний тип GeSe_2 (ПГ $I\bar{4}$)	46
3.3.9.	Структурний тип GeSe_2 (ПГ $P\bar{4}$)	47
3.4.	Структурні типи, в яких кристалізуються сполуки систем $\text{PbX} - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$, $\text{PbX} - \text{R}_2\text{X}_3$, $\text{R}_2\text{X}_3 - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{R} - \text{PЗМ}$; $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$; $\text{X} - \text{S, Se}$)	48
3.4.1.	Структурний тип Pb_2SiS_4 (ПГ $P2_1/c$)	48
3.4.2.	Структурний тип Pb_2GeS_4 (ПГ $P2_1/c$)	49
3.4.3.	Структурний тип $\text{Na}_6\text{Pb}_3\text{P}_4\text{Se}_{16}$ (ПГ $I\bar{4}3d$)	50
3.4.4.	Структурний тип PbGeS_3 (ПГ $P2_1/c$)	51
3.4.5.	Структурний тип $[\text{NH}_4]\text{CdCl}_3$ (ПГ $Pnma$)	52

3.4.6.	Структурний тип Pb_2SiSe_4 (ПГ $P2_1/c$)	53
3.4.7.	Структурний тип CaFe_2O_4 (ПГ $Pnma$)	54
3.4.8.	Структурний тип Er_2PbS_4 (ПГ $Pnma Cmc2_1$)	55
3.4.9.	Структурний тип Th_3P_4 (ПГ $I\bar{4}3d$)	57
3.4.10.	Структурний тип Tm_2PbSe_4 (ПГ $Pnma$)	58
3.4.11.	Структурний тип $\text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$ (ПГ $Cmcm$)	59
3.4.12.	Структурний тип $\text{Dy}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$ (ПГ $P6_3$)	61
3.4.13.	Структурний тип La_2GeS_5 (ПГ $P2_1/c$)	62
3.4.14.	Структурний тип $\text{La}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$ (ПГ $R3c$)	63
3.4.15.	Структурний тип $\text{Ce}_6\text{Si}_4\text{S}_{17}$ (ПГ $P\bar{1}$)	64
3.4.16.	Структурний тип U_2PbSe_5 (ПГ $P2_1/c$)	67
3.4.17.	Структурний тип $\text{Dy}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ (ПГ $P2_1/c$)	68
3.4.18.	Структурний тип La_2SnS_5 (ПГ $Pbam$)	69
РОЗДІЛ 4. КВАЗІПОТРІЙНІ СИСТЕМИ $\text{R}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ (R – РЗМ; $\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn}$; X – S, Se)		71
4.1.	Ізотермічні перерізи	71
4.1.1.	Системи $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$	71
4.1.2.	Системи $\text{R}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$	75
4.1.3.	Системи $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$	77
4.1.4.	Системи $\text{R}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$	81
4.1.5.	Системи $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$	89
4.2.	Тетрарні сполуки	97
4.3.	Кристалічна структура тетрарних сполук	
4.3.1.	Структурний тип $\text{La}_2\text{PbSiS}_8$ (ПГ $R\bar{3}c$)	99
4.3.2.	Структурний тип $\text{Y}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$)	101
4.3.3.	Структурний тип $\text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ (ПГ $Pmc2_1$)	104
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ		108

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

Літ.	–	літературні джерела;
ПГ	–	просторова група;
ПСТ	–	правильна система точок;
Рис.	–	рисунок;
РЗМ	–	рідкісноземельний метал;
СТ	–	структурний тип;
Табл.	–	таблиця;
$x/a, y/b, z/c$	–	координати атомів у частках ребра елементарної комірки;
$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$	–	параметри елементарної комірки;
G	–	коефіцієнт заповнення правильної системи точок.

ПЕРЕДМОВА

Розвиток сучасного суспільства нерозривно пов'язаний із науково-технічним прогресом (НТП). В свою чергу НТП сприяє пошуку та створенню нових матеріалів із прогнозованими функціональними властивостями. Знання про взаємозв'язок складу, будови і властивостей речовини, а також про термодинамічно-рівноважні умови існування речовин із заданими складом і структурою є фундаментальною основою такого пошуку.

Відомості про кристалічну структуру речовини дозволяють мати не лише уявлення про міжатомні відстані та координаційне оточення атомів, але також дають можливість робити певні припущення та висновки про механізми хімічних перетворень і прогнозувати шляхи синтезу нових речовин.

Для багатьох дослідників значний інтерес становлять складні халькогеніди рідкісноземельних металів, для яких характерна властива технологічність, відтворюваність результатів, висока фоточутливість та інші властивості.

Представлена монографія присвячена опису кристалічної структури бінарних, тернарних та тетрарних сполук квазіпотрійних халькогенідних систем $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$ ($R - PЗМ$; $D^{IV} - Si, Ge, Sn$; $X - S, Se$) та фазових рівноваг у цих системах за температури 770 К.

У першому та другому розділах зібрано інформацію про кристалічну структуру бінарних сполук PbX , R_2X_3 і $D^{IV}X_2$ та кристалічну структуру тернарних сполук, що утворюються у системах $PbX - D^{IV}X_2$, $PbX - R_2X_3$ і $R_2X_3 - D^{IV}X_2$.

Третій розділ присвячено опису структурних типів, у яких кристалізуються бінарні та тернарні сполуки.

У четвертому розділі представлено результати дослідження фазових рівноваг у квазіпотрійних системах $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$ за температури 770 К та опис кристалічних структур тетрарних сполук, що утворюються у цих системах.

РОЗДІЛ 1
КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
БІНАРНИХ СПОЛУК

1.1. Системи Pb – X (X – S, Se)

У системах Pb – X (X – S, Se) утворюються бінарні сполуки PbS та PbSe відповідно. Їх кристалографічні характеристики представлено у таблиці 1.1.

Таблиця 1.1.

Кристалографічні характеристики бінарних сполук PbX (X – S, Se)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
PbS	NaCl	$Fm\bar{3}m$	0,5996	–	–	[1]
	GeS	$Pnma$	1,128	0,402	0,429	[2]
	CsCl	$Pm\bar{3}m$	0,3289	–	–	[3]
	TlI	$Cmcm$	0,383	1,039	0,401	[3]
PbSe	NaCl	$Fm\bar{3}m$	0,6224	–	–	[4]
	GeS	$Pnma$	1,161	0,400	0,439	[5]
	CsCl	$Pm\bar{3}m$	0,3379	–	–	[3]

1.2. Системи R – X (R – R3M; X – S, Se)

У таблицях 1.2. та 1.3. зібрано інформацію про кристалічну структуру бінарних сполук R₂X₃ та D^{IV}X₂ (R – R3M; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se).

Таблиця 1.2.

Кристалографічні характеристики бінарних сполук
R₂X₃ (R – R3M; X – S, Se)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Sc ₂ S ₃	Sc ₂ S ₃	$Fddd$	1,0376	0,73775	2,2033	[6]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
	YScS ₃	<i>Pna2</i> ₁	0,700	0,636	0,946	[7]
Y ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0602	0,3858	1,0436	[8]
	Ho ₂ S ₃	<i>P2</i> ₁ / <i>m</i>	1,72339	0,40107 <i>β</i> = 98,60	1,01736	[9]
	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8306	–	–	[10]
<i>α</i> -La ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,7660	0,422	1,595	[11]
<i>γ</i> -La ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8723	–	–	[12]
<i>α</i> -Ce ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,784	0,428	1,545	[13]
	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,75323	0,40967	1,57276	[14]
<i>β</i> -Ce ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,86524	–	–	[14]
<i>β</i> -Pr ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,7493	0,40554	1,5616	[15]
<i>γ</i> -Pr ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,857	–	–	[16]
<i>α</i> -Nd ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,74397	0,40278	1,55196	[17]
<i>γ</i> -Nd ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8529	–	–	[18]
<i>α</i> -Sm ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,733	0,390	1,512	[19]
	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,733	0,400	1,546	[20]
	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,73764	0,39744	1,53626	[21]
	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,7376	0,39622	1,5352	[22]
<i>β</i> -Sm ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8429	–	–	[23]
<i>β</i> -Eu ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8527	–	–	[24]
<i>α</i> -Gd ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,07447	0,38985	1,05462	[25]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
β -Gd ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,83847	–	–	[26]
α -Tb ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,06787	0,38806	1,04907	[27]
β -Tb ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,7319	0,3898	1,5224	[28]
γ -Tb ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,83523	–	–	[29]
α -Dy ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	0,7284	0,3881	1,5143	[30]
β -Dy ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0609	0,3864	1,0429	[30]
γ -Dy ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8301	–	–	[29]
α -Ho ₂ S ₃	Ho ₂ S ₃	$P2_1 / m$	1,750	0,4002 $\beta=99,4$	1,015	[31]
β -Ho ₂ S ₃	La ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,05724	0,38448	1,04115	[17]
γ -Ho ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8265	–	–	[10]
Er ₂ S ₃	Tm ₂ S ₃	$P2_1 / m$	1,0901	0,3896 $\beta=108,804$	1,1167	[32]
Er ₂ S ₃	Ho ₂ S ₃	$P2_1 / m$	1,74417	0,39822 $\beta=98,688$	1,01013	[17]
(hp) Er ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0526	0,3824	1,0374	[8]
(hp) Er ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8244	–	–	[10]
Tm ₂ S ₃	Tm ₂ S ₃	$P2_1 / m$	1,1110	0,3874 $\beta=108,88$	1,0872	[33]
	Ho ₂ S ₃	$P2_1 / m$	1,7350	0,3954 $\beta=98,68$	1,0037	[34]
	Al ₂ O ₃	$\bar{R}3c$	0,6768	–	1,8236	[35]
	Mn ₂ O ₃	$Ia\bar{3}$	1,2489	–	–	[36]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
(hp) Tm ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0479	0,3805	1,0353	[8]
(hp) Tm ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8223	–	–	[34]
Yb ₂ S ₃	Al ₂ O ₃	$\bar{R}3c$	0,6772	–	1,8280	[37]
	Yb ₂ S ₃	<i>P6₃cm</i>	0,6772	–	1,828	[38]
	Ho ₂ S ₃	<i>P2₁/m</i>	1,037	0,406 $\beta=100,0$	1,815	[39]
	Mn ₂ O ₃	$\bar{I}a3$	1,24683	–	–	[40]
(hp) Yb ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0435	0,3786	1,0330	[8]
(hp) Yb ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8224	–	–	[10]
Lu ₂ S ₃	Al ₂ O ₃	$\bar{R}3c$	0,6722	–	1,816	[41]
(hp) Lu ₂ S ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8198	–	–	[10]
(hp) Lu ₂ S ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,0411	0,3773	1,0320	[8]
Sc ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,0846	0,7668	2,3004	[42]
Y ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,144	0,807	2,425	[43]
	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,86626	–	–	[44]
La ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,90521	–	–	[45]
Ce ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,89774	–	–	[46]
Pr ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,89117	–	–	[45]
Nd ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8859	–	–	[47]
α -Sm ₂ Se ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,1273	0,4091	1,1032	[48]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
β -Sm ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8782	–	–	[48]
Eu ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,239	0,876	2,628	[49]
α -Gd ₂ Se ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,098	0,405	1,118	[47]
β -Gd ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,87256	–	–	[45]
α -Tb ₂ Se ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,1130	0,4024	1,0951	[50]
β -Tb ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,867	–	–	[51]
α -Dy ₂ Se ₃	U ₂ S ₃	<i>Pnma</i>	1,1077	0,4007	1,0912	[52]
β -Dy ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,862	–	–	[51]
Ho ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,14074	0,81259	2,4239	[53]
(hp) Ho ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8614	–	–	[10]
α -Er ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,1357	0,8093	2,4186	[54]
β -Er ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8581	–	–	[10]
δ -Er ₂ Se ₃	UAs ₂	<i>P4/nmm</i>	0,3984	–	0,8228	[55]
Tm ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,131	0,806	2,406	[42]
(hp) Tm ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,85992	–	–	[44]
Yb ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,1274	0,8021	2,398	[56]
(hp) Yb ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8615	–	–	[44]
α -Lu ₂ Se ₃	Sc ₂ S ₃	<i>Fddd</i>	1,123	0,799	2,389	[43]
β -Lu ₂ Se ₃	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8570	–	–	[44]

1.3. Системи $D^{IV} - X$ ($D^{IV} - Si, Ge, Sn; X - S, Se$).

Таблиця 1.3.

Кристалографічні характеристики сполук $D^{IV}X_2$ ($D^{IV} - Si, Ge, Sn; X - S, Se$)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
SiS ₂	SiS ₂	<i>Ibam</i>	0,9545	0,5564	0,5552	[57]
	ZnCl ₂	$\bar{I}42d$	0,5420	0,5420	0,8718	[58]
GeS ₂	GeS ₂	<i>Pc</i>	0,6875	2,255 $\beta=120,45^\circ$	0,6809	[59]
	GeS ₂	$P2_1/c$	0,6720	1,6101 $\beta=90,88^\circ$	1,1436	[60]
	ZnCl ₂	$\bar{I}4\bar{2}d$	0,5480	–	0,9143	[58]
	GeS ₂	<i>Fdd2</i>	1,168	2,238	0,686	[61]
	ZnBr ₂	$I4/acd$	1,1065	–	1,8717	[62]
SnS ₂	2H-CdJ ₂	$\bar{P}3m1$	0,3646	–	0,5879	[63]
SiSe ₂	SiS ₂	<i>Ibam</i>	0,9669	0,5998	0,5851	[57]
GeSe ₂	GeS ₂	$P2_1/c$	0,7019	1,6864	1,1814	[64]
	GeS ₂	<i>Fdd2</i>	1,221	2,311	0,692	[65]
	ZnCl ₂	$\bar{I}42d$	0,57307	–	0,9691	[66]
	GeSe ₂	$\bar{I}4$	0,55073	–	0,99374	[67]
	GeSe ₂	$\bar{P}4$	0,53389	–	1,00361	[67]
SnSe ₂	2H-CdJ ₂	$\bar{P}3m1$	0,3811	–	0,6136	[68]

РОЗДІЛ 2
КРИСТАЛОГРАФІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ТЕРНАРНИХ СПОЛУК

У таблицях 2.1. – 2.5. зібрано інформацію про кристалічну структуру тернарних сполук, що утворюються у системах $PbX - D^{IV}X_2$, $PbX - R_2X_3$, $R_2X_3 - SiX_2$, $R_2X_3 - GeX_2$ і $R_2X_3 - SnX_2$ ($R - R3M$; $D^{IV} - Si, Ge, Sn$; $X - S, Se$).

2.1. Системи $PbX - D^{IV}X_2$ ($D^{IV} - Si, Ge, Sn$; $X - S, Se$)

Таблиця 2.1.

**Кристалографічні характеристики сполук, що утворюються
у системах $PbX - D^{IV}X_2$ ($D^{IV} - Si, Ge, Sn$; $X - S, Se$)**

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Pb_2SiS_4	Pb_2SiS_4	$P2_1 / c$	0,64721	0,66344	1,6832	[69]
Pb_2GeS_4	Pb_2GeS_4	$P2_1 / c$	0,79742	0,89255	0,108761	[70]
Pb_2GeS_4	$Na_6Pb_3P_4Se_{16}$	$\bar{I}43d$	1,4096	–	–	[71]
$PbGeS_3$	$PbGeS_3$	$P2_1 / c$	0,7224	1,0442	0,6825	[72]
$PbSnS_3$	$[NH_4]CdCl_3$	$Pnma$	0,64721	0,66344	1,6832	[73]
Pb_2SiSe_4	Pb_2SiSe_4	$P2_1 / c$	0,85670	0,70745	1,36160	[69]
Pb_2GeSe_4	$Na_6Pb_3P_4Se_{16}$	$\bar{I}43d$	1,4573	–	–	[74]

2.2. Системи PbX – R₂X₃ (R – PЗМ; X – S, Se)

Таблиця 2.2.

Кристалографічні характеристики сполук, що утворюються у системах PbX – R₂X₃ (R – PЗМ; X – S, Se)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Sc ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,1642	0,3757	1,3711	[75]
Y ₂ PbS ₄	Er ₂ PbS ₄	<i>Cmc2</i> ₁	0,79301	2,86967	1,20511	[76]
La ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8767	–	–	[77]
Ce ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8705	–	–	[77]
Pr ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8675	–	–	[77]
Nd ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8632	–	–	[77]
Sm ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8572	–	–	[77]
Gd ₂ PbS ₄	Th ₃ P ₄	<i>I</i> $\bar{4}3d$	0,8522	–	–	[77]
Dy ₂ PbS ₄	Er ₂ PbS ₄	<i>Cmc2</i> ₁	0,79484	2,8721	1,2039	[76]
Ho ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,189	0,401	1,425	[77]
– // –	Er ₂ PbS ₄	<i>Cmc2</i> ₁	0,79081	2,86222	1,20220	[76]
Er ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,185	0,400	1,417	[77]
– // –	Er ₂ PbS ₄	<i>Cmc2</i> ₁	0,7863	2,8525	1,1995	[76]
Tm ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,183	0,398	1,410	[77]
– // –	Er ₂ PbS ₄	<i>Cmc2</i> ₁	0,78419	2,84184	1,19655	[76]
Yb ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,178	0,396	1,408	[77]
– // –	Tm ₂ PbSe ₄	<i>Pnma</i>	1,1899	0,39015	1,4127	[78]
Lu ₂ PbS ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,178	0,396	1,407	[77]
– // –	Tm ₂ PbSe ₄	<i>Pnma</i>	1,1919	0,38890	1,4103	[78]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Sc ₂ PbSe ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,22029	0,39061	1,42801	[75]
Y ₆ Pb ₂ Se ₁₁	власний	<i>Cmcm</i>	0,40610	1,3467	3,7624	[79]
La ₂ PbSe ₄	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,7886	–	–	[77]
Ce ₂ PbSe ₄	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,9045	–	–	[77]
Pr ₂ PbSe ₄	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8996	–	–	[77]
– // –	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,89916	–	–	[80]
Nd ₂ PbSe ₄	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8968	–	–	[77]
– // –	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,888	–	–	[81]
Sm ₂ PbSe ₄	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,8909	–	–	[77]
– // –	Th ₃ P ₄	$\bar{I}43d$	0,884	–	–	[81]
Dy ₆ Pb ₂ Se ₁₁	Y ₆ Pb ₂ Se ₁₁	<i>Cmcm</i>	0,40772	1,3458	3,7589	[79]
Ho ₆ Pb ₂ Se ₁₁	Y ₆ Pb ₂ Se ₁₁	<i>Cmcm</i>	0,40561	1,34018	3,7525	[79]
Er ₂ PbSe ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,245	0,412	1,485	[77]
– // –	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,2554	0,40778	1,4885	[82]
– // –	Tm ₂ PbSe ₄	<i>Pnma</i>	1,2541	0,40810	1,4865	[83]
Tm ₂ PbSe ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,259	0,410	1,475	[77]
– // –	власний	<i>Pnma</i>	1,2505	0,40630	1,4820	[84]
Yb ₂ PbSe ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,283	0,408	1,464	[77]
– // –	Tm ₂ PbSe ₄	<i>Pnma</i>	1,2501	0,40380	1,4707	[83]
Lu ₂ PbSe ₄	CaFe ₂ O ₄	<i>Pnma</i>	1,287	0,407	1,459	[77]
– // –	Tm ₂ PbSe ₄	<i>Pnma</i>	1,24718	0,40345	1,47338	[84]

2.3. Системи $R_2X_3 - SiX_2$ ($R - P3M$; $X - S, Se$)

Таблиця 2.3.

Кристалографічні характеристики сполук, що утворюються
у системах $R_2X_3 - SiX_2$ ($R - P3M$; $X - S, Se$)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
$Y_3Si_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,975	–	0,570	[85]
– // –	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,97449	–	0,56985	[86]
La_2SiS_5	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,76208	$0,7606$ $\beta=101,56$	0,78998	[87]
– // –	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,7857	$0,7606$ $\beta=101,55$	1,2627	[88]
Ce_2SiS_5	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,7798	$0,7540$ $\beta=101,60$	1,2524	[89]
– // –	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,75475	$1,25581$ $\beta=101,55$	0,78286	[90]
$Ce_4Si_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,914	–	0,795	[91]
– // –	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,91745	–	0,79943	[90]
$Ce_6Si_4S_{17}$	власний	$P\bar{1}$	$0,89576$ $\alpha = 82,19$	$1,00022$ $\beta=86,89$	$1,42651$ $\gamma = 89,52$	[90]
Pr_2SiS_5	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,7775	$0,7514$ $\beta=101,62$	1,2489	[89]
$Pr_4Si_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,911	–	0,793	[91]
$Pr_6Si_4S_{17}$	$Ce_6Si_4S_{17}$	$P\bar{1}$	$0,8902$ $\alpha = 82,19$	$0,9934$ $\beta = 86,94$	$1,4206$ $\gamma = 89,40$	[92]
Nd_2SiS_5	U_2PbSe_5	$P2_1 / c$	0,7740	$0,7480$ $\beta=101,66$	1,2434	[87]
$Nd_4Si_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,906	–	0,790	[91]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Nd ₆ Si ₄ S ₁₇	Ce ₆ Si ₄ S ₁₇	$P\bar{1}$	0,8880 $\alpha = 82,11$	0,9903 $\beta = 87,04$	1,4168 $\gamma = 89,31$	[92]
Sm ₄ Si ₃ S ₁₂	La ₄ Ge ₃ S ₁₂	<i>R3c</i>	1,897	–	0,783	[91]
Sm ₆ Si ₄ S ₁₇	Ce ₆ Si ₄ S ₁₇	$P\bar{1}$	0,88300 $\alpha = 82,13$	0,9779 $\beta = 87,34$	1,4047 $\gamma = 89,02$	[92]
Gd ₄ Si ₃ S ₁₂	La ₄ Ge ₃ S ₁₂	<i>R3c</i>	1,889	–	0,778	[91]
Gd ₃ Si _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	0,987	–	0,571	[85]
Gd ₄ Si ₃ S ₁₂	Dy ₄ Si ₃ S ₁₂	$P2_1 / c$	0,9867	1,09969 $\beta=102,67$	1,6462	[93]
Tb ₃ Si _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	0,982	–	0,570	[85]
Tb ₄ Si ₃ S ₁₂	Dy ₄ Si ₃ S ₁₂	$P2_1 / c$	0,98360	1,0964 $\beta=102,76$	1,6391	[94]
Dy ₃ Si _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	0,975	–	0,570	[85]
Dy ₄ Si ₃ S ₁₂	власний	$P2_1 / c$	0,9813	1,09387 $\beta=102,86$	1,6360	[95]
Ho ₃ Si _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	0,97306	–	0,57001	[96]
La ₆ Si ₄ Se ₁₇	Ce ₆ Si ₄ S ₁₇	$P\bar{1}$	0,94333 $\alpha = 81,91$	1,04482 $\beta = 87,48$	1,49866 $\gamma = 89,49$	[97]
Ce ₆ Si ₄ Se ₁₇	Ce ₆ Si ₄ S ₁₇	$P\bar{1}$	0,9383 $\alpha = 81,94$	1,0356 $\beta = 87,66$	1,4884 $\gamma = 89,25$	[97]
Pr ₃ Si _{1,25} Se ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	1,05268	–	0,60396	[98]
Nd ₃ Si _{1,25} Se ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	1,04760	–	0,60268	[98]
Sm ₃ Si _{1,25} Se ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	$P6_3$	1,04166	–	0,59828	[98]

2.4. Системи $R_2X_3 - GeX_2$ ($R - PЗМ; X - S, Se$)

Таблиця 2.4.

Кристалографічні характеристики сполук, що утворюються
у системах $R_2X_3 - GeX_2$ ($R - PЗМ; X - S, Se$)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
$Y_3Ge_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,973	–	0,582	[85]
– // –	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,9730	–	0,5826	[99]
$La_3Ge_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	1,02970	–	0,58120	[100]
La_2GeS_5	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,7641	1,2702 $\beta=101,39$	0,7893	[101]
– // –	La_2GeS_5	$P2_1 / c$	0,7887	0,7675 $\beta=101,40$	1,2720	[89]
$La_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,940	–	0,810	[102]
$Ce_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,936	–	0,806	[103]
– // –	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,9375	–	0,8029	[104]
$Ce_3Ge_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	1,022	–	0,583	[89]
$Pr_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,930	–	0,801	[103]
– // –	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,92856	–	0,798049	[105]
$Pr_3Ge_{1,25}S_{14}$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	1,010	–	0,581	[106]
$Nd_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,924	–	0,798	[103]
– // –	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,9250	–	0,7949	[104]
$Sm_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,919	–	0,795	[103]
$Gd_4Ge_3S_{12}$	$La_4Ge_3S_{12}$	$R3c$	1,909	–	0,790	[103]
$Gd_3Ge_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,984	–	0,582	[85]
$Tb_3Ge_{1,25}S_7$	$Dy_3Ge_{1,25}S_7$	$P6_3$	0,979	–	0,582	[85]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	<i>P6₃</i>	0,973	–	0,582	[89]
Ho ₃ Ge _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	<i>P6₃</i>	0,969	–	0,583	[85]
– // –	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	<i>P6₃</i>	0,9686	–	0,5819	[96]
La ₃ Ge _{1,25} Se ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	<i>P6₃</i>	1,067	–	0,610	[107]

2.5. Системи R₂X₃ – SnX₂ (R – PЗМ; X – S, Se)

Таблиця 2.5.

Кристалографічні характеристики сполук, що утворюються
у системах R₂X₃ – SnX₂ (R – PЗМ; X – S, Se)

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
La ₂ SnS ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,122	0,7915	0,396	[108]
– // –	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,126	0,789	0,399	[109]
La ₃ Sn _{1,25} S ₇	Dy ₃ Ge _{1,25} S ₇	<i>P6₃</i>	1,02770	–	0,60030	[100]
Ce ₂ SnSn ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,124	0,786	0,395	[109]
Pr ₂ SnSn ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,117	0,783	0,393	[109]
– // –	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	0,78195	1,12145	0,39462	[110]
Nd ₂ SnS ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,115	0,778	0,392	[109]
– // –	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	0,77721	1,1218	0,39272	[110]
Sm ₂ SnS ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,1276	0,7773	0,3895	[111]
– // –	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,128	0,777	0,3895	[112]
Gd ₂ SnS ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,116	0,775	0,388	[109]
– // –	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	0,77330	1,1290	0,38217	[110]
Tb ₂ SnS ₅	La ₂ SnS ₅	<i>Pbam</i>	1,115	0,775	0,387	[109]

Сполука	СТ	ПГ	Періоди комірки, нм			Літ.
			<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
– // –	La_2SnS_5	<i>Pbam</i>	0,7717	1,12460	0,38056	[110]
Dy_2SnS_5	La_2SnS_5	<i>Pbam</i>	1,114	0,775	0,386	[109]
Ce_2SnSe_5	CaFe_2O_4	<i>Pnma</i>	1,405	0,412	1,180	[113]

РОЗДІЛ 3 СТРУКТУРНІ ТИПИ

3.1. Структурні типи, в яких кристалізуються бінарні сполуки PbX (X – S, Se)

Бінарні сполуки PbS та PbSe можуть кристалізуватись у чотирьох структурних типах: NaCl, GeS, CsCl і TIJ (табл. 3.1.).

Таблиця 3.1.

Структурні типи сполук PbS та PbSe

Сполука	СТ	ПГ	Сполука	СТ	ПГ
PbS	NaCl	$Fm\bar{3}m$	PbSe	NaCl	$Fm\bar{3}m$
	GeS	$Pnma$		GeS	$Pnma$
	CsCl	$Pm\bar{3}m$		CsCl	$Pm\bar{3}m$
	TIJ	$Cmcm$			

3.1.1. Структурний тип NaCl (ПГ $Fm\bar{3}m$): $a = 0,5644$ нм, [114]. У таблиці 3.2. наведені координати атомів для сполуки PbS (СТ *NaCl*), [1]. Елементарна комірка та координаційний многогранник Pb у структурі сполуки PbS зображені на рисунку 3.1. Атоми Pb мають октаедричне оточення і координують навколо себе по шість атомів Сульфуру [PbS₆].

Таблиця 3.2.

**Координати атомів для сполуки PbS
(структурний тип NaCl)**

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	$4a$	0	0	0	1,0
S	$4b$	1/2	1/2	1/2	1,0

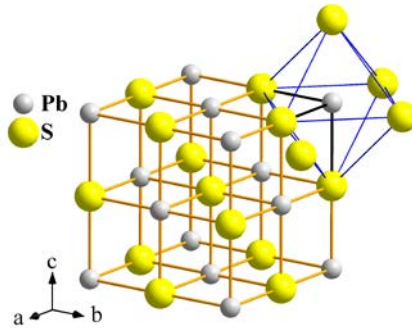


Рис. 3.1. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb сполуки PbS (СТ *NaCl*).

3.1.2. Структурний тип GeS (ПГ *Pnma*): $a = 1,0470$ нм, $b = 0,40297$ нм, $c = 0,3641$ нм, [115]. У таблиці 3.3. наведені координати атомів для сполуки PbS (СТ *GeS*), [2]. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb у структурі сполуки PbS зображені на рисунку 3.2. У структурі PbS (СТ *GeS*) атоми Pb координують навколо себе по шість атомів Сульфуру.

Таблиця 3.3.

Координати атомів для сполуки PbS
(структурний тип *GeS*)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	4c	0,12	1/4	1/8	1,0
S	4c	0,35	1/4	0	1,0

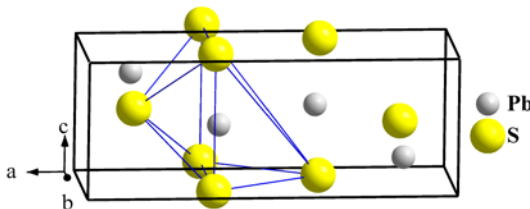


Рис. 3.2. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb сполуки PbS (СТ *GeS*).

3.1.3. Структурний тип CsCl (ПГ $Pm\bar{3}m$): $a = 0,411$ нм, [116].
 У таблиці 3.4. наведені координати атомів для сполуки PbS (СТ $CsCl$), [3]. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb (КЧ = 8) зображені на рисунку 3.3.

Таблиця 3.4.

Координати атомів для сполуки PbS
 (структурний тип $CsCl$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	$1a$	0	0	0	1,0
S	$1b$	1/2	1/2	1/2	1,0

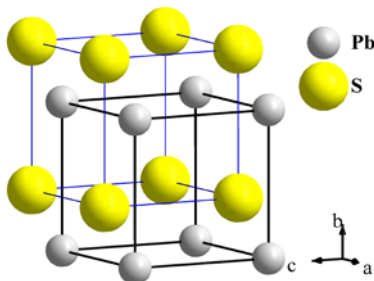


Рис. 3.3. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb сполуки PbS (СТ $CsCl$).

3.1.4. Структурний тип TIJ (ПГ $Cmcm$): $a = 0,457$ нм, $b = 1,292$ нм, $c = 0,524$ нм, [117]. У структурному типі TIJ (табл. 3.5.) атоми Pb координують навколо себе по сім атомів Сульфуру (рисунок 3.4.), [3].

Таблиця 3.5.

Координати атомів для сполуки PbS
 (структурний тип TIJ)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	$4c$	0	0,13	1/4	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S	4c	0	0,40	1/4	1,0

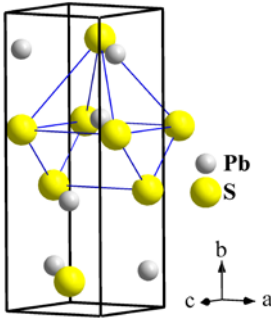


Рис. 3.4. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Pb сполуки PbS (СТ *TIJ*).

3.2. Структурні типи, в яких кристалізуються бінарні сполуки R_2X_3 (R – РЗМ; X – S, Se)

Бінарні сполуки R_2X_3 (R – Sc, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb і Lu; X – S, Se) можуть кристалізуватись в одинадцяти структурних типах (табл. 3.6.)

3.2.1. Структурний тип Sc_2S_3 (ПГ $Fddd$): $a = 1,0376$ нм, $b = 0,73775$ нм, $c = 2,2033$ нм, [6]. Координати атомів для сполуки Sc_2S_3 наведені у таблиці 3.7. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sc1 та Sc2 у структурі сполуки Sc_2S_3 зображені на рисунку 3.5.

Таблиця 3.7.

Координати атомів для сполуки Sc_2S_3
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Sc1	16g	1/8	1/8	0,041	1,0
Sc2	16g	1/8	1/8	0,376	1,0
S1	16f	1/8	0,370	1/8	1,0
S2	32h	0,123	0,378	0,456	1,0

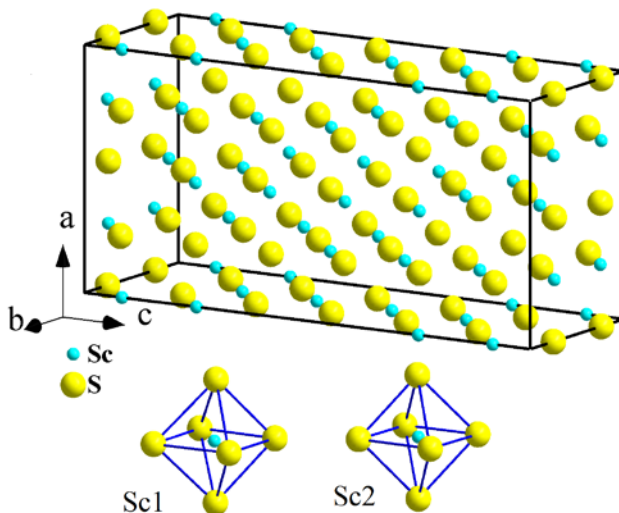


Рис. 3.5. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sc1 та Sc2 у структурі сполуки Sc_2S_3 (СТ Sc_2S_3).

У структурі цієї сполуки атоми Sc1 та Sc2 мають октаедричне

оточення і координують навколо себе по шість атомів Сульфуру [Sc1S1₂S2₄] і [Sc2S1₂S2₄].

3.2.2. Структурний тип YScS₃ (ПГ Pna2₁): $a = 0,700$ нм, $b = 0,636$ нм, $c = 0,946$ нм, [118]. У таблиці 3.8. наведені координати атомів для сполуки Sc₂S₃ (СТ YScS₃) [7]. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Sc у структурі сполуки Sc₂S₃ зображено на рисунку 3.6.

Атоми Sc1 сполуки Sc₂S₃ координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру [Sc1S1₃S2₃S3₂], а атоми Sc2 – шість атомів Сульфуру [Sc2S1₂S2₃S3₂].

Таблиця 3.8.

Координати атомів для сполуки Sc₂S₃

(структурний тип YScS₃)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Sc1	$4a$	0,099	0,039	0	1,0
Sc2	$4a$	0,001	0,499	0,767	1,0
S1	$4a$	0,306	0,327	0,184	1,0
S2	$4a$	0,323	0,323	0,825	1,0
S3	$4a$	0,048	0,358	0,519	1,0

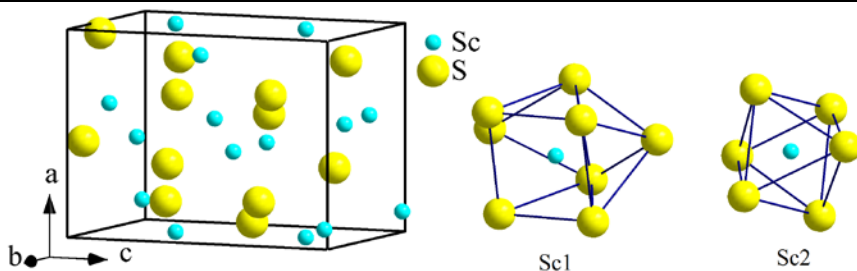


Рис. 3.6. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sc1 та Sc2 у структурі сполуки Sc₂S₃ (СТ YScS₃).

3.2.3. Структурний тип U_2S_3 (ПГ $Pnma$): $a = 1,060$ нм, $b = 0,385$ нм, $c = 1,031$ нм, [119]. У таблиці 3.9. наведені координати атомів для сполуки Y_2S_3 (СТ U_2S_3) [8].

Атоми Y1 та Y2 (рисунок 3.7.) координують навколо себе по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом – $[Y1S1_2S2_3S3_2]$ і $[Y2S1_3S2_2S3_2]$ відповідно.

Таблиця 3.9.

Координати атомів для сполуки Y_2S_3
(структурний тип U_2S_3)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y1	$4c$	0,010	1/4	0,313	1,0
Y2	$4c$	0,192	3/4	0,004	1,0
S1	$4c$	0,046	1/4	0,873	1,0
S2	$4c$	0,119	3/4	0,445	1,0
S3	$4c$	0,227	1/4	0,198	1,0

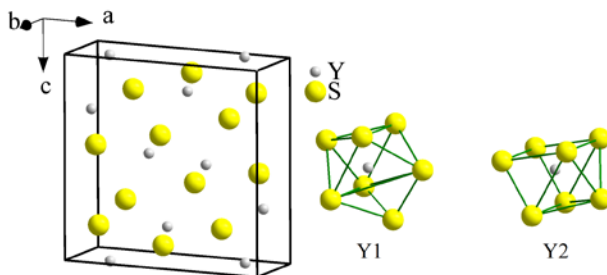


Рис. 3.7. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y1 та Y2 у структурі сполуки Y_2S_3 (СТ U_2S_3).

3.2.4. Структурний тип Ho_2S_3 (ПГ $P2_1/m$): $a = 1,74680$ нм, $b = 0,40026$ нм, $c = 1,0127$ нм, $\beta = 98,54^\circ$, [15]. У таблиці 3.10. наведені координати атомів для сполуки Y_2S_3 (СТ Ho_2S_3), [120]. У структурі сполуки Y_2S_3 атоми Y1 та Y2 координують навколо себе по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним

додатковим атомом $[Y1S2_1S3_2S7_3S8_1]$ і $[Y2S1_3S5_1S6_2S9_1]$, (рис. 3.8.). Атоми Y3, Y4, Y5 та Y6 координують навколо себе по шість атомів Сульфуру $[Y3S5_2S6_1S7_1S8_2]$, $[Y4S1_2S2_1S4_2S5_1]$, $[Y5S4_1S6_2S9_3]$ і $[Y6S2_2S3_2S4_1S8_1]$.

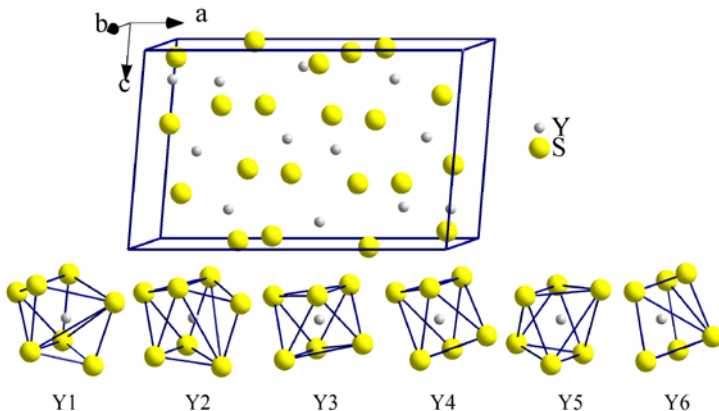


Рис. 3.8. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y1, Y2, Y3, Y4, Y5 та Y6 у структурі сполуки Y_2S_3 (СТ Ho_2S_3).

Таблиця 3.10.

Координати атомів для сполуки Y_2S_3
(структурний тип Ho_2S_3)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y1	$2e$	0,021	1/4	0,189	1,0
Y2	$2e$	0,430	1/4	0,124	1,0
Y3	$2e$	0,781	1/4	0,829	1,0
Y4	$2e$	0,720	1/4	0,187	1,0
Y5	$2e$	0,398	1/4	0,487	1,0
Y6	$2e$	0,116	1/4	0,549	1,0
S1	$2e$	0,576	1/4	0,053	1,0
S2	$2e$	0,873	1/4	0,268	1,0
S3	$2e$	0,927	1/4	0,617	1,0
S4	$2e$	0,281	1/4	0,637	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S5	$2e$	0,269	1/4	0,998	1,0
S6	$2e$	0,631	1/4	0,711	1,0
S7	$2e$	0,924	1/4	0,951	1,0
S8	$2e$	0,182	1/4	0,319	1,0
S9	$2e$	0,532	1/4	0,368	1,0

3.2.5. Структурний тип Th_3P_4 (ПГ $\bar{I}43d$): $a = 0,8637$ нм, [31].
У структурному типі Th_3P_4 (табл. 3.11.), [10] атоми Ітрію сполуки Y_2S_3 координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру [YS_8], утворюючи октаедри (рис. 3.9.).

Таблиця 3.11.

Координати атомів для сполуки Y_2S_3
(структурний тип Th_3P_4)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y	$12a$	0,375	0	1/4	1,0
S	$16c$	0,083	0,083	0,083	1,0

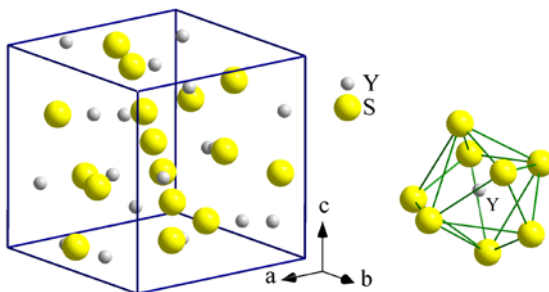


Рис. 3.9. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Y у структурі сполуки Y_2S_3 (СТ Th_3P_4).

3.2.6. Структурний тип La_2S_3 (ПГ $Pnma$): $a = 0,766$ нм,
 $b = 0,422$ нм, $c = 1,588$ нм, [122]. Координати атомів для сполуки

La_2S_3 (СТ власний) наведені у таблиці 3.12., елементарну комірку та координаційні многогранники атомів La у структурі сполуки La_2S_3 зображено на рисунку 3.10.

Таблиця 3.12.

Координати атомів для сполуки La_2S_3
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
La1	$2c$	0,765	$1/4$	0,545	1,0
La2	$2c$	0,146	$1/4$	0,204	1,0
S1	$2c$	0,009	$1/4$	0,391	1,0
S2	$2c$	0,144	$1/4$	0,779	1,0
S3	$2c$	0,371	$1/4$	0,566	1,0

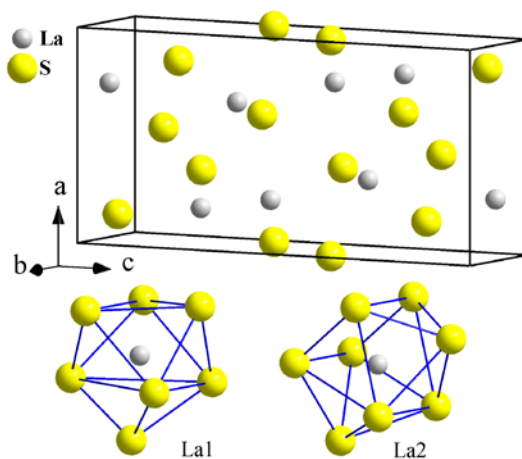


Рис. 3.10. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів La1 та La2 у структурі сполуки La_2S_3 (СТ La_2S_3).

У структурі сполуки La_2S_3 атоми La1 координують навколо себе по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми з одним додатковим атомом $[\text{La}1\text{S}1_3\text{S}2_1\text{S}3_3]$, а для атомів La2 характерним є КЧ = 8 і вони утворюють тригональні призми із двома додатковими

атомами Сульфуру: $[\text{La}_2\text{S}_1_2\text{S}_2_4\text{S}_3_2]$.

3.2.7. Структурний тип Tm_2S_3 (ПГ $P2_1/m$): $a = 1,1110$ нм, $b = 0,3874$ нм, $c = 1,0872$ нм, $\beta = 108,88^\circ$, [123]. Координати атомів для сполуки Er_2S_3 (СТ Tm_2S_3) наведені у таблиці 3.13., [32]. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Er у структурі сполуки Er_2S_3 зображено на рисунку 3.11.

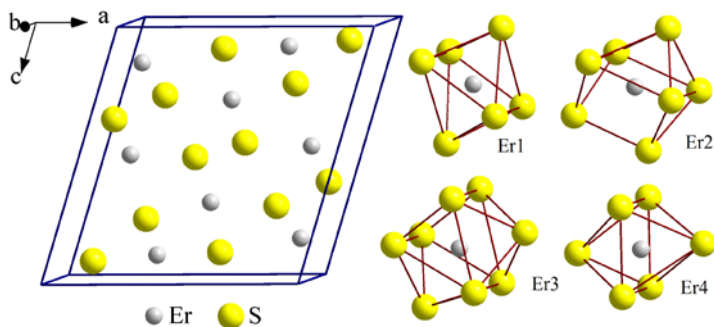


Рис. 3.11. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Er1, Er2, Er3 та Er4 у структурі сполуки Er_2S_3 (СТ Tm_2S_3).

Таблиця 3.13.

Координати атомів для сполуки Er_2S_3
(структурний тип Tm_2S_3)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Er1	$2e$	0,06647	1/4	0,16825	1,0
Er2	$2e$	0,81704	1/4	0,49713	1,0
Er 3	$2e$	0,45528	1/4	0,30917	1,0
Er4	$2e$	0,33877	1/4	0,91614	1,0
S1	$2e$	0,7554	1/4	0,7238	1,0
S2	$2e$	0,1027	1/4	0,9375	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S3	$2e$	0,5816	1/4	-0,0984	1,0
S4	$2e$	0,0219	1/4	0,3868	1,0
S5	$2e$	0,6920	1/4	0,2494	1,0
S6	$2e$	0,3885	1/4	0,5372	1,0

У структурі Er_2S_3 (СТ Tm_2S_3) атоми Er1 та Er4 координують навколо себе по шість атомів Сульфуру [$\text{Er1S1}_2\text{S}_2\text{S}_3\text{S4}_1$] і [$\text{Er4S2}_1\text{S3}_3\text{S5}_2$], атоми Er2 – сім атомів Сульфуру [$\text{Er2S1}_1\text{S4}_3\text{S5}_1\text{S6}_2$] а атоми Er3 – вісім атомів Сульфуру [$\text{Er3S1}_2\text{S}_3\text{S}_2\text{S5}_1\text{S6}_3$].

3.2.8. Структурний тип Al_2O_3 (ПГ $R\bar{3}c$): $a = 0,47617$ нм, $c = 1,29990$ нм, [124]. Координати атомів для сполуки Tm_2S_3 (СТ Al_2O_3) [35] наведені в таблиці 3.14. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Tm у структурі сполуки Tm_2S_3 (СТ Al_2O_3) зображені на рисунку 3.12.

У структурі сполуки Tm_2S_3 (СТ Al_2O_3) атоми Tm координують навколо себе по шість атомів Сульфуру [TmS_6].

Таблиця 3.14.

Координати атомів для сполуки Tm_2S_3

(структурний тип Al_2O_3)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Tm	$12c$	0	0	0,35007	1,0
S	$18e$	0,3026	0	1/4	1,0

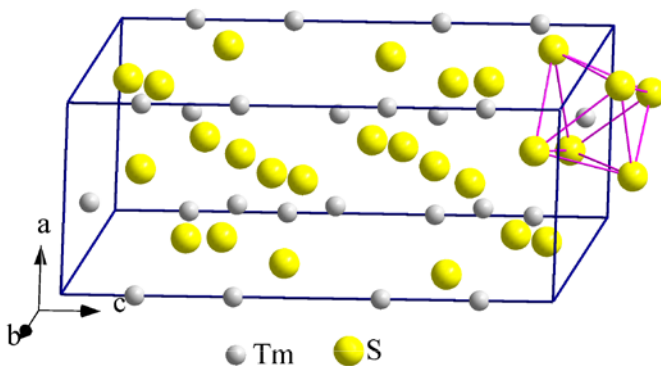


Рис. 3.12. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Тм у структурі сполуки Tm_2S_3 (СТ Al_2O_3).

3.2.9. Структурний тип Mn_2O_3 (ПГ $Ia\bar{3}$): $a = 0,941$ нм, [125]. Координати атомів у структурі сполуки Tm_2S_3 (СТ Mn_2O_3), [36] наведені в таблиці 3.15. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Тм у структурі сполуки Tm_2S_3 зображено на рисунку 3.13.

У структурі Tm_2S_3 (СТ Mn_2O_3) атоми Тм мають октаедричне оточення і координують навколо себе по шість атомів Сульфуру $[Tm1S_6]$ і $[Tm2S_6]$.

Таблиця 3.15.

Координати атомів для сполуки Tm_2S_3
(структурний тип Mn_2O_3)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Tm1	$8b$	$1/4$	$1/4$	$1/4$	1,0
Tm2	$24d$	$1/4$	0,4522	0	1,0
S	$48e$	0,3834	0,3938	0,1609	1,0

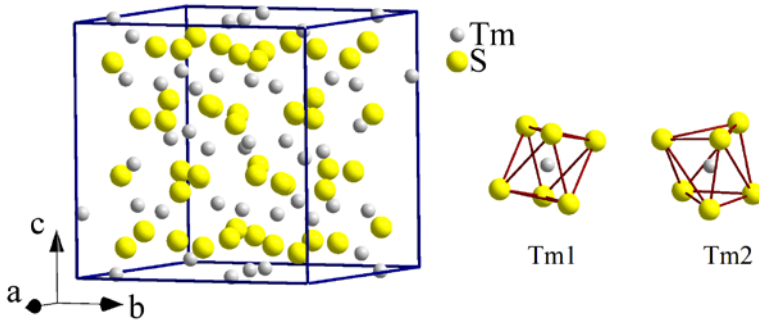


Рис. 3.13. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Tm1 та Tm2 у структурі сполуки Tm_2S_3 (СТ Mn_2O_3).

3.2.10. Структурний тип Yb_2S_3 (ПГ $P6_3cm$): $a = 0,6772$ нм, $c = 1,828$ нм, [38]. Координати атомів для сполуки Yb_2S_3 наведені у таблиці 3.16. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Yb у структурі сполуки Yb_2S_3 зображені на рисунку 3.14.

У структурі сполуки Yb_2S_3 (СТ Yb_2S_3) для атомів Yb характерними є КЧ = 3 (Yb1, Yb3 та Yb4) і КЧ = 6 (Yb2).

Таблиця 3.16.

Координати атомів для сполуки Yb_2S_3
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Yb1	$2a$	0	0	0	1,0
Yb2	$2a$	0	0	1/3	1,0
Yb3	$4b$	1/3	2/3	0	1,0
Yb4	$4b$	1/3	2/3	0,2483	1,0
S1	$6c$	0,3642	0	0,1238	1,0
S2	$6c$	0,3290	0	0,4129	1,0
S3	$6c$	0,6700	0	0,2891	1,0

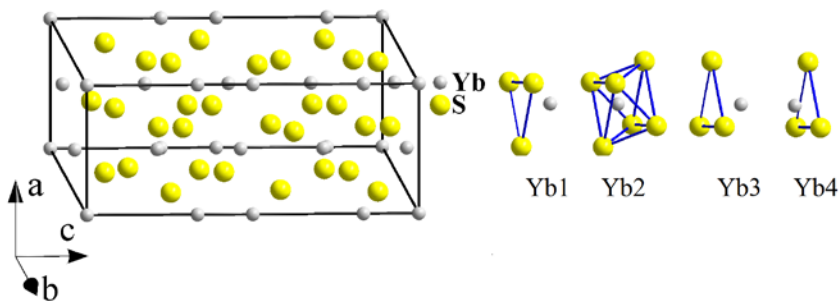


Рис. 3.14. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Yb1, Yb2, Yb3 та Yb4 у структурі сполуки Yb_2S_3 (СТ Yb_2S_3).

3.2.11. Структурний тип UAs_2 (ПГ $P4/nmm$): $a = 0,3954$ нм, $c = 0,8116$ нм, [126]. Координати атомів для сполуки Er_2Se_3 (СТ UAs_2) наведені у таблиці 3.17., [55]. Елементарну комірку та координаційний многогранник атома Er у структурі сполуки Er_2Se_3 зображено на рисунку 3.15.

У структурі сполуки Er_2Se_3 атоми Er координують навколо себе по дев'ять атомів Селену [$\text{ErSe}_{15}\text{Se}_{24}$].

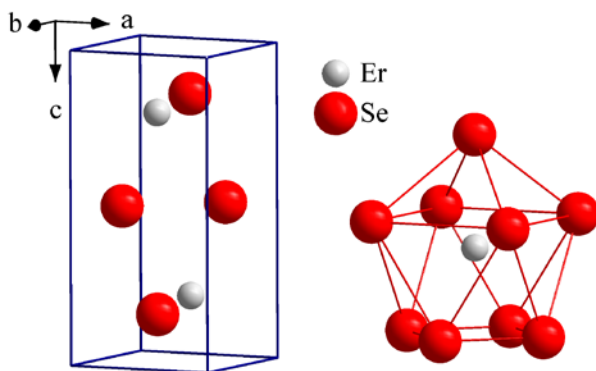


Рис. 3.15. Елементарна комірка та координаційні многогранник атома Er у структурі сполуки Er_2Se_3 (СТ UAs_2).

Таблиця 3.17.

Координати атомів для сполуки Er₂Se₃
(структурний тип UAs₂)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Er	2c	1/4	1/4	0,2272	1,0
Se1	2c	3/4	3/4	0,1322	1,0
Se2	2b	3/4	1/4	1/2	0,5

**3.3. Структурні типи, у яких кристалізуються
бінарні сполуки D^{IV}X₂ (D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)**

Бінарні сполуки D^{IV}X₂ (D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se) можуть кристалізуватись у дев'яти структурних типах (табл. 3.18.).

Таблиця 3.18.

Структурні типи бінарних сполук D^{IV}X₂ (D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)

№ п/п	СТ	ПГ	SiX ₂		GeX ₂		SnX ₂	
			S	Se	S	Se	S	Se
1.	SiS ₂	Ibam	+	+				
2.	ZnCl ₂	I42d	+		+	+		
3.	GeS ₂	Pc			+			
4.	GeS ₂	P2 ₁ /c			+	+		
5.	GeS ₂	Fdd2			+	+		
6.	ZnBr ₂	I4 ₁ /acd			+			
7.	2H-CdJ ₂	P3m1					+	+
8.	GeSe ₂	I4				+		
9.	GeSe ₂	P4				+		

3.3.1. Структурний тип SiS₂ (ПГ Ibam): $a = 0,9545$ нм,

$b = 0,5564$ нм, $c = 0,5552$ нм, [57]. Координати атомів для сполуки SiS_2 наведені у таблиці 3.19. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Si у структурі сполуки SiS_2 зображені на рисунку 3.16.

Таблиця 3.19.

Координати атомів для сполуки SiS_2
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Si	$4a$	0	0	1/4	1,0
S	$8j$	0,1182	0,2088	0	1,0

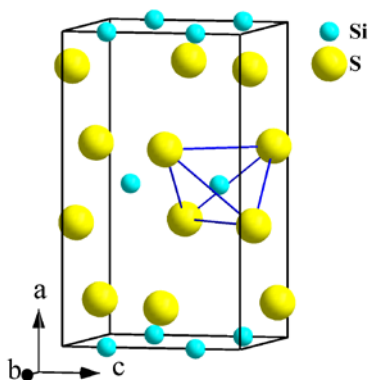


Рис. 3.16. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Si у структурі сполуки SiS_2 (орторомбічна сингонія (ПГ $Ibam$)).

У структурі сполуки SiS_2 атоми Si мають тетрадричне оточення і координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру [SiS_4].

3.3.2. Структурний тип ZnCl_2 (ПГ $\bar{I}42d$): $a = 0,5398$ нм, $c = 1,033$ нм, [127]. У структурному типі ZnCl_2 (табл. 3.20., [58]) атоми Si сполуки SiS_2 координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру [SiS_4], утворюючи тетрадри (рис. 3.17.).

Таблиця 3.20.

Координати атомів для сполуки SiS_2
(структурний тип ZnCl_2)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Si	$4a$	0	0	0	1,0
S	$8d$	0,2272	1/4	1/8	1,0

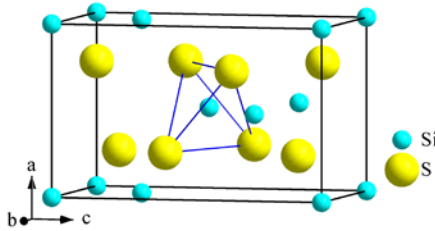


Рис. 3.17. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Si у структурі сполуки SiS_2 (СТ ZnCl_2).

3.3.3. Структурний тип GeS_2 (ПГ Pc): $a = 0,6875$ нм, $b = 2,255$ нм, $c = 0,6809$ нм, $\beta = 120,45^\circ$, [59]. Координати атомів для сполуки GeS_2 наведені у таблиці 3.21. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ge у структурі сполуки GeS_2 зображено на рисунку 3.18.

Таблиця 3.21.

Координати атомів для сполуки GeS_2
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge1	$2a$	0	0,9880	1/2	1,0
Ge2	$2a$	0,2513	0,7375	0,5020	1,0
Ge3	$2a$	0,4957	0,5131	0,9983	1,0
Ge4	$2a$	0,7436	0,7624	0,0001	1,0
Ge5	$2a$	0,1359	0,8749	0,2484	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge6	$2a$	0,6392	0,6248	0,7509	1,0
S1	$2a$	0,287	0,9504	0,154	1,0
S2	$2a$	0,153	0,8976	0,569	1,0
S3	$2a$	0,377	0,7990	0,347	1,0
S4	$2a$	0,883	0,6979	0,843	1,0
S5	$2a$	0,781	0,5519	0,636	1,0
S6	$2a$	0,764	0,9995	0,127	1,0
S7	$2a$	0,832	0,8517	0,921	1,0
S8	$2a$	0,380	0,7536	0,865	1,0
S9	$2a$	0,873	0,7460	0,365	1,0
S10	$2a$	0,304	0,6441	0,433	1,0
S11	$2a$	0,611	0,6056	0,054	1,0
S12	$2a$	0,262	0,5075	0,124	1,0

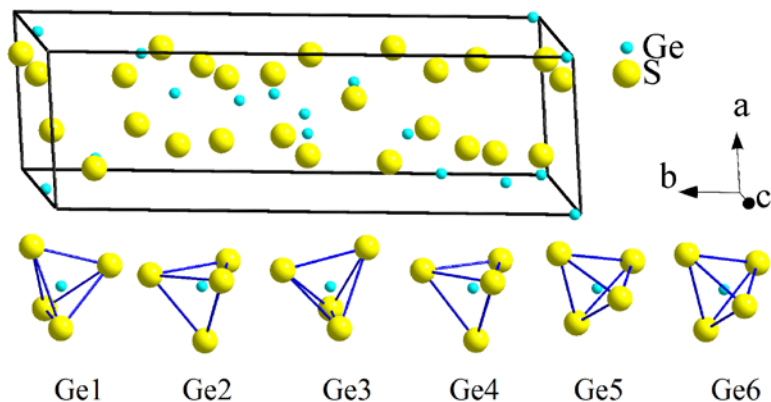


Рис. 3.18. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ge1, Ge2, Ge3, Ge4, Ge5 та Ge6 у структурі сполуки GeS_2 (моноклінна сингонія (ПГ Pc)).

У структурі сполуки GeS_2 (ПГ Pc) атоми Ge1, Ge2, Ge3, Ge4, Ge5 і Ge6 мають тетраедричне оточення і координують навколо себе

по чотири атоми Сульфуру утворюючи відповідні тетраедри: [Ge1S1₁S2₁S6₂], [Ge2S3₁S8₁S9₁S10₁], [Ge3S5₁S11₁S12₂], [Ge4S4₁S7₁S8₁S9₁], [Ge5S1₁S2₁S3₁S7₁] та [Ge6S4₁S5₁S10₁S11₁].

3.3.4. Структурний тип GeS₂ (ПГ P2₁/c): $a = 0,6720$ нм, $b = 1,6101$ нм, $c = 1,1436$ нм, $\beta = 90,88^\circ$, [60]. Координати атомів для сполуки GeS₂ наведені у таблиці 3.22. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ge у структурі сполуки GeS₂ зображено на рисунку 3.19.

У структурі сполуки GeS₂ атоми Ge1, Ge2, Ge3 та Ge4 мають тетраедричне оточення, координуючи навколо себе по чотири атоми Сульфуру, утворюють відповідні тетраедри: [Ge1S1₁S2₁S3₁S4₁], [Ge2S4₁S5₁S6₁S8₁], [Ge3S2₁S3₁S7₁S8₁] і [Ge4S1₁S5₁S6₁S7₁].

Таблиця 3.22.

Координати атомів для сполуки GeS₂
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge1	4e	0,3430	0,1531	0,2213	1,0
Ge2	4e	0,1714	0,1514	0,7798	1,0
Ge3	4e	0,8396	0,0026	0,7057	1,0
Ge4	4e	0,6734	0,3073	0,2777	1,0
S1	4e	0,6687	0,1773	0,2141	1,0
S2	4e	0,2790	0,0370	0,1226	1,0
S3	4e	0,2292	0,1126	0,3933	1,0
S4	4e	0,1726	0,2564	0,1369	1,0
S5	4e	0,4272	0,3319	0,4000	1,0
S6	4e	0,9211	0,3316	0,4020	1,0
S7	4e	0,6767	0,3909	0,1236	1,0
S8	4e	0,1661	0,4745	0,2011	1,0

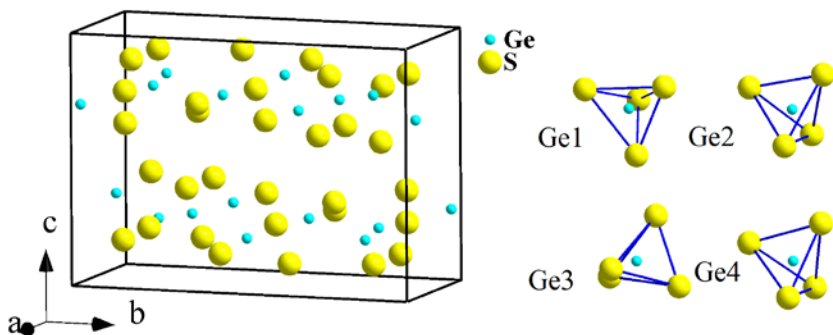


Рис. 3.19. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ge1, Ge2, Ge3 та Ge1 у структурі сполуки GeS₂ (моноклінна сингонія (ПГ $P2_1/c$)).

3.3.5. Структурний тип GeS₂ (ПГ $Fdd2$): $a = 1,1691$ нм, $b = 2,241$ нм, $c = 0,668$ нм, [128]. Координати атомів для сполуки GeS₂ наведені у таблиці 3.23. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ge у структурі сполуки GeS₂ зображено на рисунку 3.20.

Таблиця 3.23.

Координати атомів для сполуки GeS₂
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge1	$8a$	0	0	0	1,0
Ge2	$16b$	1/8	0,139	0	1,0
S1	$16b$	0,022	0,080	0,183	1,0
S2	$16b$	0,152	-0,014	-0,183	1,0
S3	$16b$	0,062	1/8	-0,278	1,0

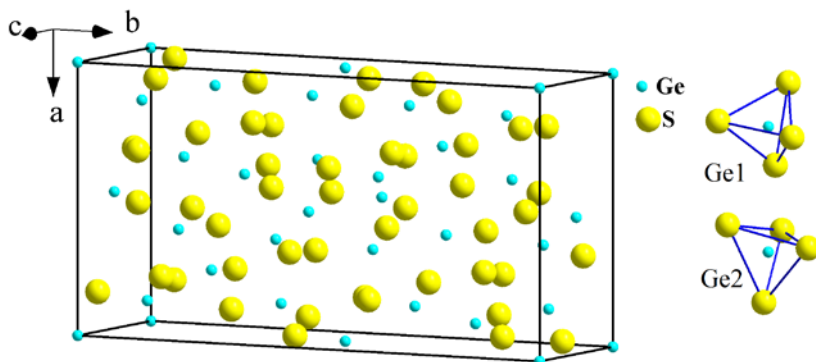


Рис. 3.20. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ge1 та Ge2 у структурі сполуки GeS_2 (ромбічна сингонія (ПГ $Fdd2$)).

У структурі сполуки GeS_2 (ПГ $Fdd2$) атоми Ge1 та Ge2 утворюють тетраедри $[\text{Ge}1\text{S}_1\text{S}_2\text{S}_2]$ і $[\text{Ge}2\text{S}_1\text{S}_2\text{S}_3]$.

3.3.6. Структурний тип ZnBr_2 (ПГ $I4_1/acd$): $a = 1,1389$ нм, $c = 2,1773$ нм, [129]. Координати атомів для сполуки GeS_2 (СТ ZnBr_2), [130] наведені у таблиці 3.24. Елементарну комірку та координаційний многогранник атома Ge у структурі сполуки GeS_2 зображено на рисунку 3.21.

Таблиця 3.24.

Координати атомів для сполуки GeS_2
(структурний тип ZnBr_2)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge	$32g$	0,3745	0,3439	0,0604	1,0
S1	$16d$	0	1/4	0,0124	1,0
S2	$16e$	0,2876	0	1/4	1,0
S3	$32g$	0,0345	0,0166	0,3760	1,0

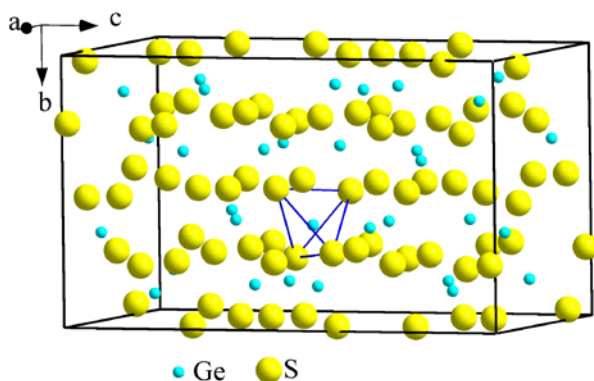


Рис. 3.21. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Ge у структурі сполуки GeS_2 (СТ ZnBr_2).

У структурі сполуки GeS_2 (структурний тип ZnBr_2) усі атоми Ge мають тетраедричне оточення і координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру [$\text{GeS}_1\text{S}_2\text{S}_3$].

3.3.7. Структурний тип 2H-CdJ_2 (ПГ $\overline{P3m1}$): $a = 0,42445$ нм, $c = 0,68642$ нм, [131]. Координати атомів для сполуки SnS_2 (СТ 2H-CdJ_2) [63] наведені у таблиці 3.25. Елементарну комірку та координаційний многогранник атома Sn у структурі сполуки SnS_2 зображено на рисунку 3.22.

Таблиця 3.25.

Координати атомів для сполуки SnS_2
(структурний тип 2H-CdJ_2)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Sn	$1a$	0	0	0	1,0
S	$2d$	$1/3$	$2/3$	$1/4$	1,0

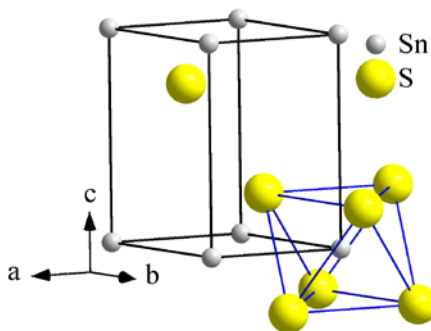


Рис. 3.22. Елементарна комірка та координаційний многогранник атома Sn у структурі сполуки SnS_2 (СТ $2H\text{-CdI}_2$).

У структурі сполуки SnS_2 (СТ $2H\text{-CdI}_2$) усі атоми Sn мають октаедричне оточення і координують навколо себе по шість атомів Сульфору [SnS_6].

3.3.8. Структурний тип GeSe_2 (ПГ $\bar{I}4$): $a = 0,55073$ нм, $c = 0,99374$ нм, [67]. Координати атомів для сполуки GeSe_2 (ПГ $\bar{I}4$) наведені у таблиці 3.26. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ge у структурі сполуки GeSe_2 зображено на рисунку 3.23.

Таблиця 3.26.

Координати атомів для сполуки GeSe_2

(власний структурний тип, ПГ $\bar{I}4$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge1	$2b$	$1/2$	$1/2$	0	1,0
Ge2	$2d$	$1/2$	0	$1/4$	1,0
Se	8g	0,7662	0,260	0,1282	1,0

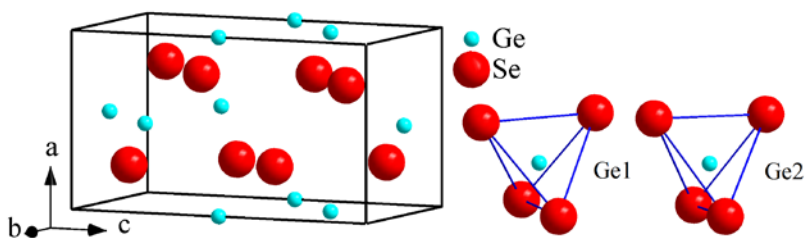


Рис. 3.23. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ge1 та Ge2 у структурі сполуки GeSe_2 (СТ GeSe_2 , ПГ $\bar{I}4$).

3.3.9. Структурний тип GeSe_2 (ПГ $\bar{P}4$): $a = 0,53389$ нм, $c = 1,00361$ нм, [67]. Координати атомів для сполуки GeSe_2 наведені у таблиці 3.27. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ge у структурі сполуки GeSe_2 (ПГ $\bar{P}4$) зображено на рисунку 3.24.

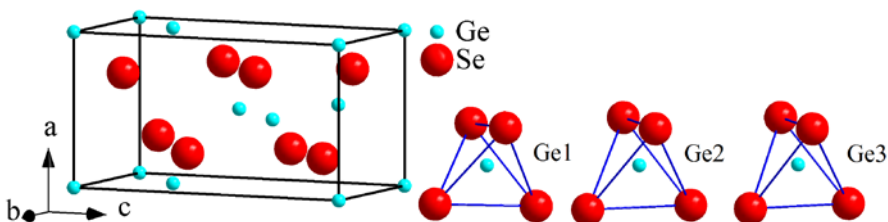


Рис. 3.24. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ge1, Ge2 та Ge3 у структурі сполуки GeSe_2 (СТ GeSe_2 , ПГ $\bar{P}4$).

Таблиця 3.27.

Координати атомів для сполуки GeSe_2
(власний структурний тип, ПГ $\bar{P}4$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge1	$1a$	0	0	0	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ge2	1d	1/2	1/2	1/2	1,0
Ge3	2g	0	1/2	1/4	1,0
Se1	4h	0,2739	0,2340	0,1280	1,0
Se2	4h	0,7711	0,7700	0,6273	1,0

3.4. Структурні типи, у яких кристалізуються сполуки систем $PbX - D^{IV}X_2, PbX - R_2X_3, R_2X_3 - D^{IV}X_2$ ($R - PЗМ; D^{IV} - Si, Ge, Sn; X - S, Se$)

3.4.1. Структурний тип Pb_2SiS_4 (ПГ $P2_1/c$): $a = 0,64721$ нм, $b = 0,66344$ нм, $c = 1,6832$ нм, $\beta = 108,805^\circ$, [69]. Координати атомів для сполуки Pb_2SiS_4 наведені у таблиці 3.28. Елементарну комірку та координаційні многогранники Pb та Si у структурі сполуки Pb_2SiS_4 зображено на рисунку 3.25.

Таблиця 3.28.

Координати атомів для сполуки Pb_2SiS_4
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb1	4e	0,2363	0,2494	0,0223	1,0
Pb2	4e	0,2631	0,3117	0,2854	1,0
Si	4e	0,0052	-0,0007	0,1355	1,0
S1	4e	-0,0008	0,0014	0,3612	1,0
S2	4e	0,5791	0,2279	0,1768	1,0
S3	4e	0,6221	0,2398	0,4773	1,0
S4	4e	0,7939	0,2483	0,1064	1,0

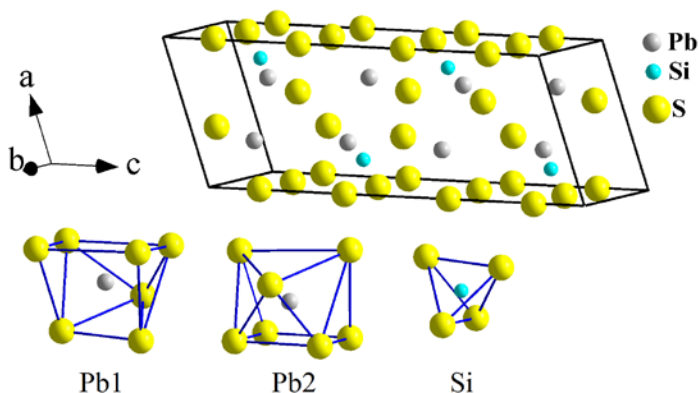


Рис. 3.25. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Pb1, Pb2 та Si у структурі сполуки Pb_2SiS_4 (СТ Pb_2SiS_4).

У структурі сполуки Pb_2SiS_4 атоми Pb координують навколо себе по сім атомів Сульфуру [Pb1S1₂S2₂S3₁S4₂] і [Pb2S1₂S2₂S3₂S4₁], а атом Si – чотири атоми Сульфуру [SiS1₁S2₁S3₁S4₁].

3.4.2. Структурний тип Pb_2GeS_4 (ПГ $P2_1/c$): $a = 0,79742$ нм, $b = 0,89255$ нм, $c = 1,08761$ нм, $\beta = 114,171^\circ$, [70]. Координати атомів для сполуки Pb_2GeS_4 наведені у таблиці 3.29. Елементарну комірку та координаційні многогранники Pb та Ge у структурі сполуки Pb_2GeS_4 зображено на рисунку 3.26.

Таблиця 3.29.

Координати атомів для сполуки Pb_2GeS_4
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb1	$4e$	0,0356	0,3161	0,3407	1,0
Pb2	$4e$	0,4124	0,4326	0,1551	1,0
Ge	$4e$	0,7137	0,1908	0,0063	1,0
S1	$4e$	0,2465	-0,0171	0,1256	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S2	4e	0,7644	0,0900	0,2027	1,0
S3	4e	0,4437	0,2002	0,3980	1,0
S4	4e	0,9193	0,3691	0,0610	1,0

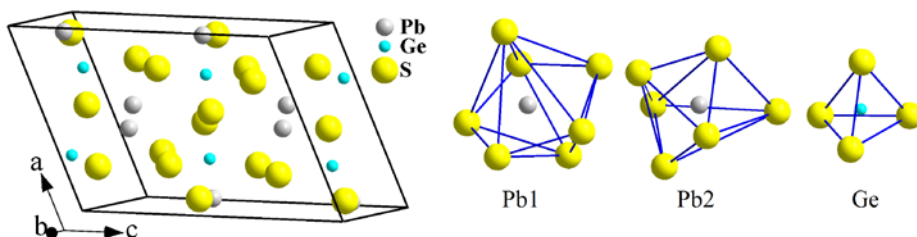


Рис. 3.26. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Pb1, Pb2 та Ge у структурі сполуки Pb_2GeS_4 (СТ Pb_2GeS_4).

У структурі сполуки Pb_2GeS_4 атом Pb1 координує навколо себе по сім атомів Сульфуру [$Pb1S1_2S2_2S3_1S4_2$], атом Pb2 – шість атомів Сульфуру [$Pb2S1_1S2_1S3_3S4_1$], а атом Ge – чотири атоми Сульфуру [$GeS1_1S2_1S3_1S4_1$].

3.4.3. Структурний тип $Na_6Pb_3P_4Se_{16}$ (ПГ $I\bar{4}3d$):
 $a = 1,43479$ нм, [132]. Координати атомів для сполуки Pb_2GeS_4 (СТ $Na_6Pb_3P_4Se_{16}$) [71] наведені у таблиці 3.30. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Pb та Ge у структурі сполуки Pb_2GeS_4 зображено на рисунку 3.27.

Таблиця 3.30.

Координати атомів для сполуки Pb_2GeS_4
(структурний тип $Na_6Pb_3P_4Se_{16}$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb1	24d	3/4	0,2611	0	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb2	24d	3/4	0,5912	0	0,324
Ge	16c	0,9756	0,4756	0,0245	1,0
S1	16c	0,0676	0,5676	0,9324	1,0
S2	48e	0,0719	0,3719	0,0921	1,0

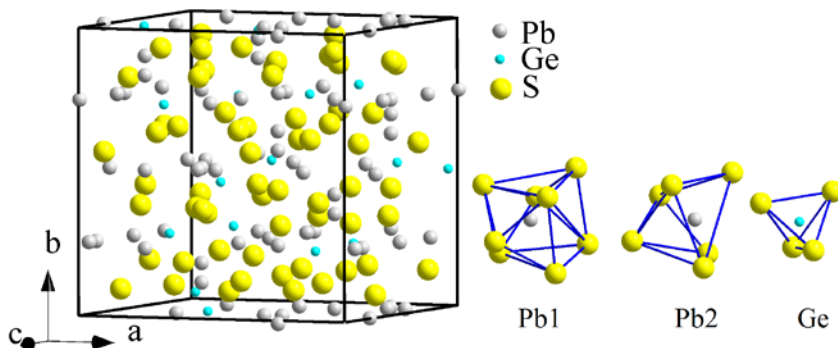


Рис. 3.27. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Pb1, Pb2 та Ge у структурі сполуки Pb_2GeS_4 (СТ $Na_6Pb_3P_4Se_{16}$).

У структурі сполуки Pb_2GeS_4 (СТ $Na_6Pb_3P_4Se_{16}$) атоми Свинцю утворюють два види координаційних многогранників: атоми Pb1 центровані у тригональних призмах із двома додатковими атомами $[Pb1S1_2S2_6]$, а Pb2 – у несиметричних октаедрах $[Pb2S2_6]$. Атоми Ge координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру, утворюючи тетраедри $[GeS1_1S2_3]$.

3.4.4. Структурний тип $PbGeS_3$ (ІІГ $P2_1/c$): $a = 0,7224$ нм, $b = 1,0442$ нм, $c = 0,6825$ нм, $\beta = 105,7^\circ$, [78]. Координати атомів для сполуки $PbGeS_3$ наведені у таблиці 3.31. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Pb та Ge у структурі сполуки $PbGeS_3$ зображено на рисунку 3.28.

Таблиця 3.31.

Координати атомів для сполуки $PbGeS_3$
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	$4e$	0,1371	0,0796	0,2808	1,0
Ge	$4e$	0,3183	0,7063	0,4908	1,0
S1	$4e$	0,4870	0,2191	0,6904	1,0
S2	$4e$	0,2305	0,5079	0,4159	1,0
S3	$4e$	0,0573	0,8209	0,4103	1,0

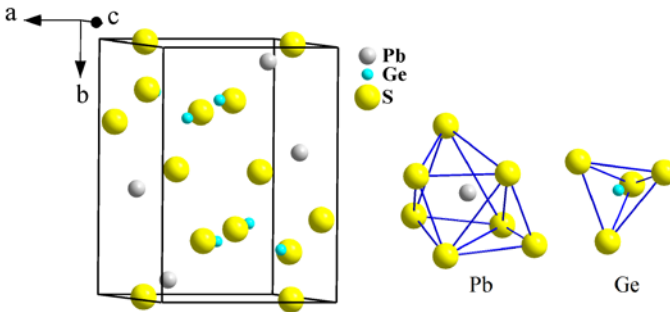


Рис. 3.28. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Pb та Ge у структурі сполуки $PbGeS_3$ (СТ $PbGeS_3$).

У структурі сполуки $PbGeS_3$ атоми Pb координують навколо себе по сім атомів Сульфуру [$PbS_1_2S_2_2S_3_3$], а атоми Ge – чотири атоми Сульфуру [$GeS_1_2S_2_1S_3_1$].

3.4.5. Структурний тип $[NH_4]CdCl_3$ (ПГ $Pnma$): $a = 0,898$ нм, $b = 1,490$ нм, $c = 0,398$ нм, [133]. Координати атомів для сполуки $PbSnS_3$ (СТ $[NH_4]CdCl_3$) [73] наведені у таблиці 3.32. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Pb та Sn у структурі сполуки $PbSnS_3$ зображено на рисунку 3.29.

У структурі сполуки $PbSnS_3$ (СТ $[NH_4]CdCl_3$) атоми Плюмбуму утворюють тригональні призми з двома додатковими атомами

[PbSn₁S₂S₃S₄], а атоми Sn координують навколо себе по шість атомів Сульфуру, утворюючи октаедри [SnS₁S₂S₃].

Таблиця 3.32.

Координати атомів для сполуки PbSnS₃

(структурний тип [NH₄]CdCl₃)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb	4c	0,5063	3/4	0,1729	1,0
Sn	4c	0,1685	1/4	0,0524	1,0
S1	4c	-0,0167	3/4	0,1048	1,0
S2	4c	0,3387	3/4	-0,0063	1,0
S3	4c	0,2827	1/4	0,2132	1,0

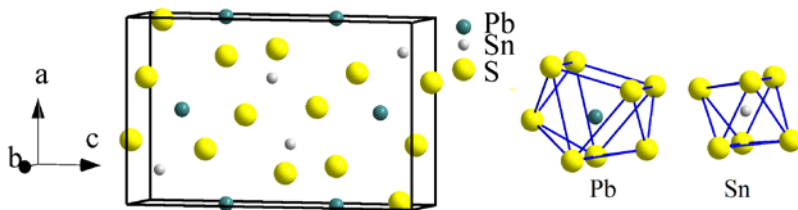


Рис. 3.29. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів у структурі сполуки PbSnS₃ (СТ [NH₄]CdCl₃)

3.4.6. Структурний тип Pb₂SiSe₄ (ПГ P2₁/c): $a = 0,85670$ нм, $b = 0,70745$ нм, $c = 1,36160$ нм, $\beta = 108,355^\circ$, [69]. Координати атомів для сполуки Pb₂SiS₄ наведені у таблиці 3.33. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Pb та Si у структурі сполуки Pb₂SiSe₄ зображено на рисунку 3.30.

Таблиця 3.33.

Координати атомів для сполуки Pb₂SiSe₄

(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb1	4e	0,0543	0,1581	0,3715	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Pb2	4e	0,5602	0,1479	0,3672	1,0
Si	4e	0,2037	0,2400	0,1449	1,0
Se1	4e	0,2737	0,4779	0,2640	1,0
Se2	4e	0,7437	0,4726	0,2603	1,0
Se3	4e	0,3668	0,2626	0,0420	1,0
Se4	4e	0,9313	0,2602	0,0557	1,0

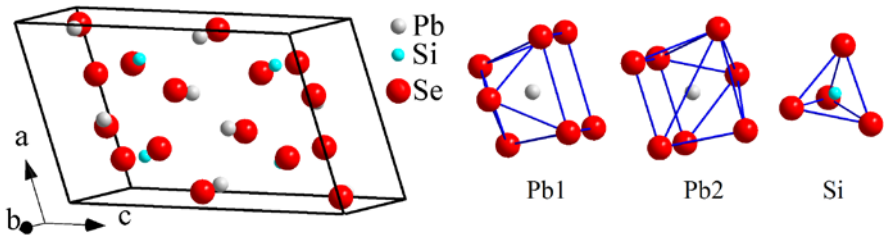


Рис. 3.30. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Pb1, Pb2 та Si у структурі сполуки Pb_2SiSe_4 (СТ Pb_2SiSe_4).

У структурі сполуки Pb_2SiSe_4 для атомів Pb1 і Pb2 характерним є КЧ = 7 ($[Pb1Se1_2Se2_2Se3_1Se4_2]$ і $[Pb2Se1_2Se2_2Se3_2Se4_1]$), а атоми Si координують по чотири атоми Селену $[SiSe1_1Se2_1Se3_1Se4_1]$.

3.4.7. Структурний тип $CaFe_2O_4$ (ПГ $Pnma$): $a = 0,9922$ нм, $b = 0,3017$ нм, $c = 1,0689$ нм, [154]. Координати атомів для сполуки Sc_2PbS_4 (СТ $CaFe_2O_4$) [75] наведені у таблиці 3.34. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sc та Pb у структурі сполуки Sc_2PbS_4 зображені на рисунку 3.31.

Таблиця 3.34.

Координати атомів для сполуки Sc_2PbS_4
(структурний тип $CaFe_2O_4$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Sc1	4c	0,4420	1/4	0,3893	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Sc2	4c	0,4178	1/4	0,9025	1,0
Pb	4c	0,76042	1/4	0,33074	1,0
S1	4c	0,2037	1/4	0,8424	1,0
S2	4c	0,1221	1/4	0,5279	1,0
S3	4c	0,5293	1/4	0,2156	1,0
S4	4c	0,4119	1/4	0,5729	1,0

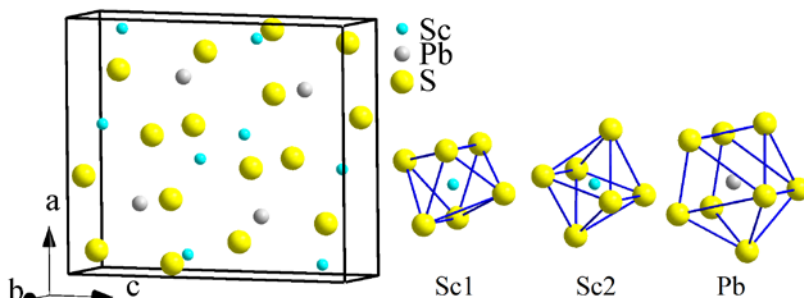


Рис. 3.31. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Sc1, Sc2 та Pb у структурі сполуки Sc_2PbS_4 (СТ CaFe_2O_4).

У структурі сполуки Sc_2PbS_4 атоми Sc1 та Sc2 координують навколо себе по шість атомів Сульфуру, утворюючи октаедри $[\text{Sc1S1}_2\text{S3}_1\text{S4}_3]$ і $[\text{Sc2S1}_1\text{S2}_3\text{S3}_2]$ відповідно, а атом Pb – вісім атомів Сульфуру $[\text{PbS1}_2\text{S2}_2\text{S3}_2\text{S4}_2]$.

3.4.8. Структурний тип Er_2PbS_4 (ПГ $Pnma Cmc2_1$):

$a = 0,7863$ нм, $b = 2,8525$ нм, $c = 1,1995$ нм, [76]. Координати атомів для сполуки Y_2PbS_4 (СТ Er_2PbS_4) [76] наведені у таблиці 3.35. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Y та Pb у структурі сполуки Y_2PbS_4 зображено на рисунку 3.32.

Таблиця 3.35.

Координати атомів для сполуки Y_2PbS_4
(структурний тип Er_2PbS_4)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y1	8b	0,249	0,0762	0,2670	1,0
Y2	4a	0	0,0694	0,9111	1,0
Y3	4a	1/2	0,0713	0,9336	1,0
Y4	8b	0,257	0,1796	0,7864	1,0
Y5	4a	1/2	0,1738	0,4359	1,0
Y6	4a	0	0,1772	0,4261	1,0
Pb1	4a	0	0,0477	0,5596	1,0
Pb2	4a	1/2	0,0375	0,6271	1,0
Pb3	8b	0,2351	0,2062	0,1323	0,5
Pb4	8b	0,248	0,2093	0,0918	0,5
S1	8b	0,249	0,0608	0,0608	1,0
S2	4a	1/2	0,1426	0,227	1,0
S3	4a	0	0,1649	0,938	1,0
S4	4a	1/2	0,1630	0,952	1,0
S5	8b	0,252	0,0870	0,7589	1,0
S6	4a	0	0,0187	0,337	1,0
S7	4a	1/2	0,0163	0,311	1,0
S8	8b	0,261	0,2365	0,372	1,0
S9	4a	0	0,1338	0,229	1,0
S10	8b	0,231	0,1161	0,4776	1,0
S11	4a	1/2	0,2056	0,658	1,0
S12	4a	0	0,2162	0,645	1,0

У структурі сполуки Y_2PbS_4 атоми Y координують навколо себе по шість атомів Сульфуру, утворюючи октаедри: [Y1S1,S2,S6,S7,S9,S10], [Y2S1,S3,S5,S6], [Y3S1,S4,S5,S7], [Y4S3,S4,S5,S8,S11,S12], [Y5S2,S8,S10,S11], [Y6S8,S9,S10,S12].

Атоми Плюмбуму утворюють два види многогранників: тригональні призми із одним додатковим атомом – $[Pb1S1_2S5_2S6_1S10_2]$ і $[Pb2S1_2S5_2S7_1S10_2]$ та тригональні призми із двома додатковими атомами – $[Pb3S2_1S3_1S4_1S8_2S9_1S11_1S12_1]$ і $[Pb4S2_1S3_1S4_1S8_2S9_1S11_1S12_1]$.

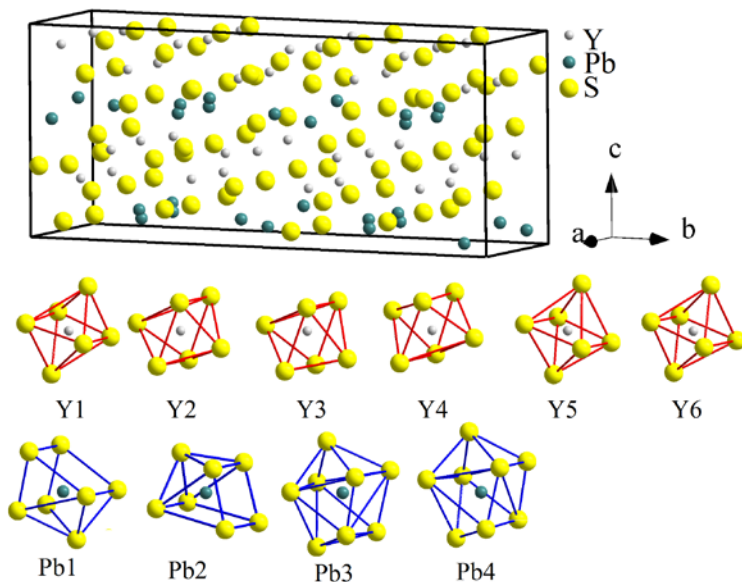


Рис. 3.32. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Pb1, Pb2, Pb3 та Pb4 у структурі сполуки Y_2PbS_4 (СТ Er_2PbS_4).

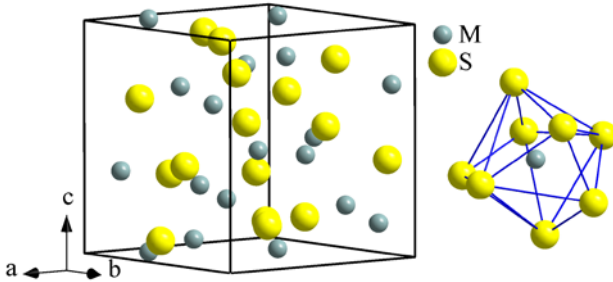
3.4.9. Структурний тип Th_3P_4 (ПГ $I\bar{4}3d$): $a = 0,8637$ нм, [121]. Координати атомів для сполуки La_2PbS_4 (СТ Th_3P_4) [77] наведені у таблиці 3.36. Елементарну комірку та координаційний многогранник статистичної суміші M (66,7 % La + 33,3 % Pb) у структурі сполуки La_2PbS_4 зображено на рисунку 3.33.

У структурі сполуки La_2PbS_4 атоми статистичної суміші M координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру $[MS_8]$.

Таблиця 3.36.

Координати атомів для сполуки La_2PbS_4 (структурний тип Th_3P_4)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
M	$12a$	0,375	0	$1/4$	0,667 La + 0,333 Pb
S	$16c$	0,083	0,083	0,083	1,0

Рис. 3.33. Елементарна комірка та координаційний многогранник у структурі сполуки La_2PbS_4 (СТ Th_3P_4).

3.4.10. Структурний тип Tm_2PbSe_4 (ПГ $Pnma$): $a = 1,2505$ нм, $b = 0,40630$ нм, $c = 1,4820$ нм, [84]. Координати атомів для сполуки Yb_2PbS_4 (СТ Tm_2PbSe_4) [78] наведені у таблиці 3.37. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Yb та Pb у структурі сполуки Yb_2PbS_4 зображено на рисунку 3.34.

Таблиця 3.37.

Координати атомів для сполуки Yb_2PbS_4 (структурний тип Tm_2PbSe_4)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Yb1	$4c$	0,43733	$1/4$	0,38884	1,0
Yb2	$4c$	0,41635	$1/4$	0,90142	1,0
Pb1	$4c$	0,7763	$1/4$	0,3391	0,5
Pb2	$4c$	0,7420	$1/4$	0,3304	0,5

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Se1	4 c	0,2054	1/4	0,8326	1,0
Se2	4 c	0,1263	1/4	0,5286	1,0
Se3	4 c	0,5268	1/4	0,2157	1,0
Se4	4 c	0,4120	1/4	0,5756	1,0

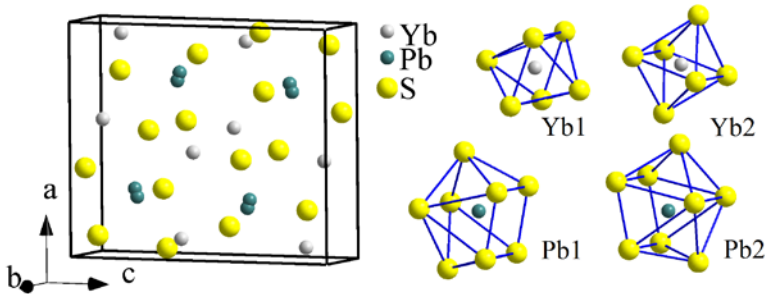


Рис. 3.34. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Yb1, Yb2, Pb1 та Pb2 у структурі сполуки Yb_2PbS_4 (СТ Tm_2PbSe_4).

У структурі сполуки Yb_2PbS_4 атоми Yb1 та Yb2 координують навколо себе по шість атомів Сульфуру, утворюючи октаедри $[\text{Yb1S}_1\text{S}_2\text{S}_3\text{S}_4\text{S}_5\text{S}_6]$ і $[\text{Yb2S}_1\text{S}_2\text{S}_3\text{S}_4\text{S}_5\text{S}_6]$. Атоми Плюмбуму утворюють тригональні призми з двома додатковими атомами $[\text{Pb1S}_1\text{S}_2\text{S}_2\text{S}_3\text{S}_4\text{S}_4]$ і $[\text{Pb2S}_1\text{S}_2\text{S}_2\text{S}_3\text{S}_4\text{S}_4]$.

3.4.11. Структурний тип $\text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$ (ПГ $Cmct$):
 $a = 0,40620$ нм, $b = 1,3467$ нм, $c = 3,7624$ нм, [79]. Координати атомів для сполуки $\text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$ наведені у таблиці 3.38. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів у структурі сполуки $\text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$ зображено на рисунку 3.35.

Таблиця 3.38.

Координати атомів для сполуки $Y_6Pb_2Se_{11}$
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y1	$8f$	0	0,0257	0,63328	1,0
Y2	$8f$	0	0,2462	0,18144	1,0
Y3	$4a$	0	0	0	1,0
M	$8f$	0	0,2761	0,55707	$0,5Y + 0,5Pb$
Pb	$4c$	0	0,5148	1/4	1,0
Se1	$8f$	0	0,0810	0,06902	1,0
Se2	$8f$	0	0,1203	0,70071	1,0
Se3	$8f$	0	0,3394	0,11226	1,0
Se4	$8f$	0	0,3575	0,01521(5)	1,0
Se5	$8f$	0	0,6047	0,16219	1,0
Se6	$4c$	0	0,1629	1/4	1,0

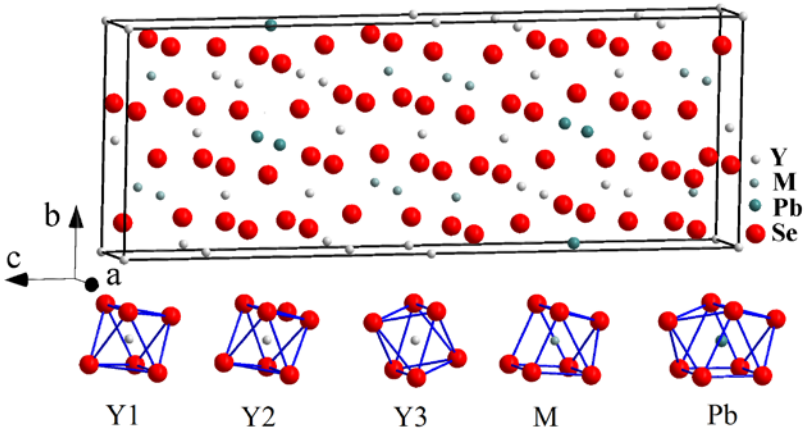


Рис. 3.35. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y1, Y2, Y3, Y4, M ($0,5Y + 0,5Pb$) та Pb у структурі сполуки $Y_6Pb_2Se_{11}$ (СТ $Y_6Pb_2Se_{11}$).

У структурі сполуки $Y_6Pb_2Se_{11}$ атоми Y1, Y2 та Y3 координують навколо себе по шість атомів Селену, утворюючи октаедри $[Y1Se1_1Se2_1Se3_2Se5_2]$, $[Y2Se2_2Se3_1Se5_2Se6_1]$ і $[Y3Se1_2Se4_4]$, атоми статистичної суміші М координують по сім атомів Селену, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом $[MSe1_2Se3_2Se4_3]$, а атоми Pb координують навколо себе по вісім атомів Селену, утворюючи тригональні призми із двома додатковими атомами $[PbSe2_4Se5_2Se6_2]$.

3.4.12. Структурний тип $Dy_3Ge_{1,25}S_7$ (ПГ $P6_3$): $a = 0,973$ нм, $c = 0,582$ нм, [89]. Координати атомів для сполуки $Y_3Si_{1,25}S_7$ (СТ $Dy_3Ge_{1,25}S_7$) [86] наведені у таблиці 3.39. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Y та Si у структурі сполуки $Y_3Si_{1,25}S_7$ зображено на рисунку 3.36.

Таблиця 3.39.

Координати атомів для сполуки $Y_3Si_{1,25}S_7$

(структурний тип $Dy_3Ge_{1,25}S_7$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y	$6c$	0,2247	0,3569	0,759	1
Si1	$2b$	1/3	2/3	1/3	1
Si2	$2a$	0	0	0,980	0,25
S1	$2b$	1/3	2/3	0,976	1
S2	$6c$	0,9042	0,1541	0,710	1
S3	$6c$	0,4222	0,8966	0,481	1

У структурі сполуки $Y_3Si_{1,25}S_7$ атоми Y координують навколо себе по сім атомів Сульфору, утворюючи тетраедри із одним додатковим атомом $[YS1_1S2_3S3_3]$. Атоми Si утворюють два види многогранників: тетраедри $[Si1S1_1S3_3]$ і октаедри $[Si2S2_6]$.

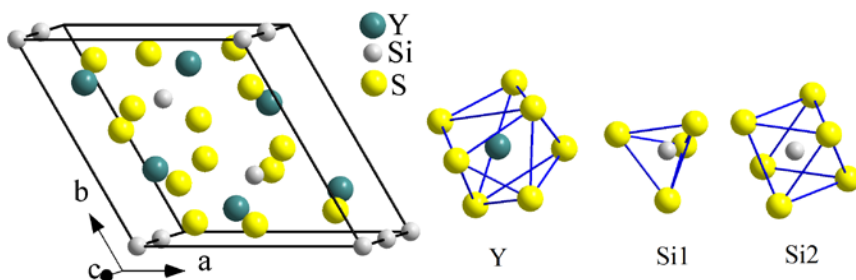


Рис. 3.36. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y, Si1 та Si2 у структурі сполуки $Y_3Si_{1,25}S_7$ (CT $Dy_3Ge_{1,25}S_7$).

3.4.13. Структурний тип La_2GeS_5 (ПГ $P2_1/c$): $a = 0,7641$ нм, $b = 1,2702$ нм, $c = 0,7893$ нм, $\beta = 101,39^\circ$, [135]. Координати атомів для сполуки La_2SiS_5 (CT La_2GeS_5) [88] наведені у таблиці 3.40. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів La та Si у структурі сполуки La_2SiS_5 зображено на рисунку 3.37.

Таблиця 3.40.

Координати атомів для сполуки La_2SiS_5
(структурний тип La_2GeS_5)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
La1	$4e$	0,74054	0,09529	0,04559	1,0
La2	$4e$	0,66488	0,66522	0,13363	1,0
Si	$4e$	0,83032	0,38347	0,09619	1,0
S1	$4e$	1,02312	0,27396	0,05064	1,0
S2	$4e$	0,92134	0,50034	0,28160	1,0
S3	$4e$	0,36080	0,12101	0,00203	1,0
S4	$4e$	0,67558	0,47033	-0,11162	1,0
S5	$4e$	0,62829	0,29811	0,19537	1,0

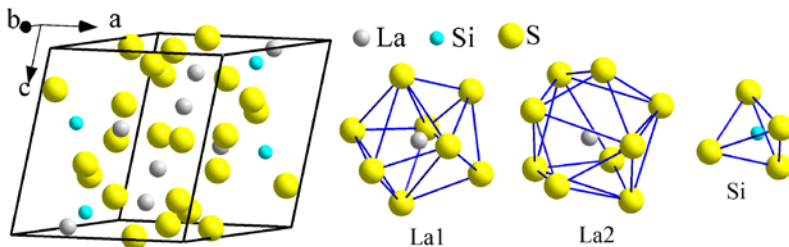


Рис. 3.37. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів La1, La2 та Si у структурі сполуки La_2SiS_5 (СТ La_2GeS_5).

У структурі сполуки La_2SiS_5 атоми La1 координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із двома додатковими атомами $[\text{La1S1}_1\text{S2}_2\text{S3}_2\text{S4}_1\text{S5}_2]$, атоми La2 координують навколо себе по дев'ять атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із трьома додатковими атомами $[\text{La2S1}_2\text{S2}_1\text{S3}_2\text{S4}_2\text{S5}_2]$, а атоми Si координують навколо себе по чотири атоми Сульфуру $[\text{SiS1}_1\text{S2}_1\text{S4}_1\text{S5}_1]$, утворюючи симетричні тетраедри.

3.4.14. Структурний тип $\text{La}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$ (ПГ $R3c$): $a = 1,940$ нм, $c = 0,810$ нм, [136]. Координати атомів для сполуки $\text{Ce}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ (СТ $\text{La}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$) [90] наведені у таблиці 3.41. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ce та Ge у структурі сполуки $\text{Ce}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ зображено на рисунку 3.38.

Таблиця 3.41.

Координати атомів для сполуки $\text{Ce}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$
(структурний тип $\text{La}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ce1	$6a$	0	0	0	1,0
Ce2	$18b$	0,2284	0,2307	0,7032	1,0
Si	$18b$	0,2010	0,1864	0,153	1,0
S1	$18b$	0,2861	0,1794	-0,002	1,0

АТОМ	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S2	$18b$	0,1258	0,0675	0,247	1,0
S3	$18b$	0,1178	0,2019	0,006	1,0
S4	$18b$	0,2677	0,2684	0,344	1,0

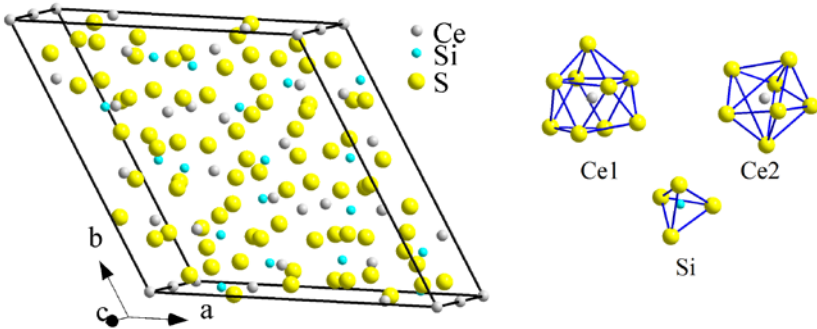


Рис. 3.38. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ce1, Ce2 та Si у структурі сполуки $Ce_4Si_3S_{12}$ (СТ $La_4Ge_3S_{12}$).

У структурі сполуки $Ce_4Si_3S_{12}$ атоми Ce1 координують навколо себе по дев'ять атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із трьома додатковими атомами $[Ce1S_2S_6S_3]$, атоми Ce2 координують навколо себе по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом $[Ce2S1_2S2_1S3_2S4_2]$. Атоми Si центровані у тетрадрах, утворених із чотирьох атомів Сульфуру $[SiS1_1S2_1S3_1S4_1]$.

3.4.15. Структурний тип $Ce_6Si_4S_{17}$ (ПГ $P\bar{1}$): $a = 0,89576$ нм, $b = 1,00022$ нм, $c = 1,42651$ нм, $\alpha = 82,19^\circ$, $\beta = 86,89^\circ$, $\gamma = 89,51^\circ$, [90]. Координати атомів для сполуки $Ce_6Si_4S_{17}$ наведені у таблиці 3.42. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Ce та Si у структурі сполуки $Ce_6Si_4S_{17}$ зображено на рисунку 3.39.

Таблиця 3.42.

Координати атомів для сполуки $\text{Ce}_6\text{Si}_4\text{S}_{17}$
(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Ce1	2i	0,47753	0,73133	0,54087	1,0
Ce2	2i	0,58162	0,57886	0,16660	1,0
Ce3	2i	0,83025	0,91349	0,34206	1,0
Ce4	2i	0,12796	0,43096	0,32673	1,0
Ce5	2i	0,39393	0,11542	0,18165	1,0
Ce6	2i	0,94665	0,23952	0,00062	1,0
Si1	2i	0,2500	0,0000	0,4154	1,0
Si2	2i	0,2487	0,4410	0,0773	1,0
Si3	2i	0,7311	0,9382	0,0987	1,0
Si4	2i	0,7735	0,5567	0,3949	1,0
S1	2i	0,8407	0,5015	0,0567	1,0
S2	2i	0,4863	0,0036	0,3771	1,0
S3	2i	0,3159	0,5179	0,4673	1,0
S4	2i	0,6059	0,7000	0,3460	1,0
S5	2i	0,1785	0,0192	0,0428	1,0
S6	2i	0,7972	0,4107	0,3047	1,0
S7	2i	0,5097	0,8719	0,1133	1,0
S8	2i	0,2415	0,6149	0,1498	1,0
S9	2i	0,4578	0,3527	0,0476	1,0
S10	2i	0,1145	0,2886	0,1605	1,0
S11	2i	0,4282	0,3547	0,2790	1,0
S12	2i	0,2054	0,1905	0,4598	1,0
S13	2i	0,1883	0,8649	0,5373	1,0
S14	2i	0,8674	0,7844	0,1666	1,0
S15	2i	0,1445	-0,0297	0,2926	1,0
S16	2i	0,7477	0,1134	0,1681	1,0

АТОМ	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S17	$2i$	0,9818	0,6520	0,3981	1,0

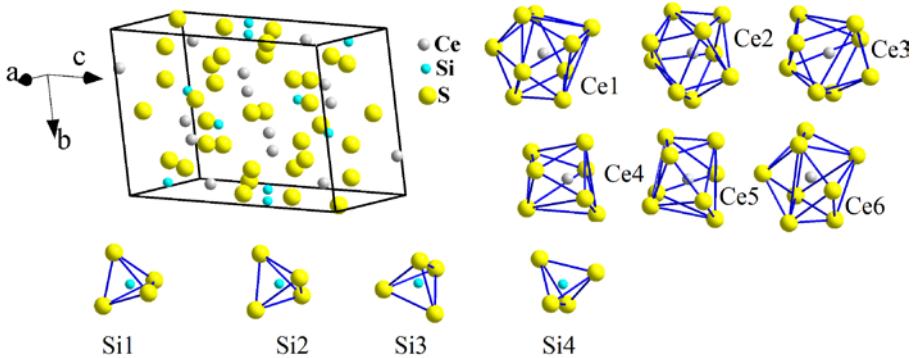


Рис. 3.39. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Ce1, Ce2, Ce3, Ce4, Ce5, Ce6, Si1, Si2, Si3 та Si4 у структурі сполуки $Ce_6Si_4S_{17}$ (СТ $Ce_6Si_4S_{17}$).

У структурі сполуки $Ce_6Si_4S_{17}$ атоми Ce4 координують навколо себе по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом $[Ce4S6_1S8_1S10_1S11_1S12_1S17_2]$, атоми Ce3, Ce5 та Ce6 координують по вісім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із двома додатковими атомами $[Ce3S2_1S4_1S13_1S12_1S14_1S15_1S16_1S17_1]$, $[Ce5S2_1S5_1S7_1S9_1S10_1S11_1S15_1S16_1]$ і $[Ce6S1_2S5_2S8_1S10_1S14_1S16_1]$, атоми Ce1 та Ce2 координують по дев'ять атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із трьома додатковими атомами $[Ce1S2_2S3_2S4_1S6_1S11_1S12_1S13_1]$ і $[Ce2S1_1S4_1S6_1S7_1S8_1S11_2S14_2]$.

Атоми Si утворюють тетрадри $[Si1S2_1S12_1S13_1S15_1]$, $[Si2S1_1S8_1S9_1S10_1]$, $[Si3S5_1S7_1S14_1S16_1]$ та $[Si4S3_1S4_1S6_1S17_1]$.

3.4.16. Структурний тип U_2PbSe_5 (ПГ $P2_1/c$): $a = 0,8605$ нм, $b = 0,7788$ нм, $c = 1,227$ нм, $\beta = 90,0^\circ$, [137]. Координати атомів для сполуки Nd_2SiS_5 (СТ U_2PbSe_5) [87] наведені у таблиці 3.43. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Nd та Si у структурі сполуки Nd_2SiS_5 зображено на рисунку 3.40.

Таблиця 3.43.

Координати атомів для сполуки Nd_2SiS_5
(структурний тип U_2PbSe_5)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Nd1	4e	0,503	0,022	0,819	1,0
Nd2	4e	0,252	0,920	0,491	1,0
Si	4e	-0,012	0,486	0,320	1,0
S1	4e	0,452	0,163	0,599	1,0
S2	4e	0,041	0,335	0,088	1,0
S3	4e	0,276	0,168	0,316	1,0
S4	4e	0,280	0,541	0,498	1,0
S5	4e	0,267	0,804	0,719	1,0

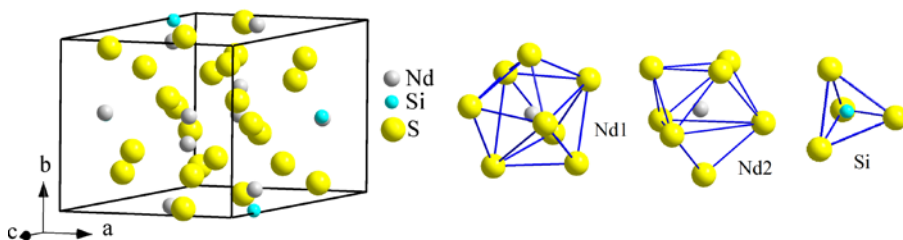


Рис. 3.40. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Nd1, Nd2 та Si у структурі сполуки Nd_2SiS_5 (СТ U_2PbSe_5).

У структурі сполуки Nd_2SiS_5 атоми Nd1 координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із

двома додатковими атомами $[\text{Nd1S1}_2\text{S3}_2\text{S4}_2\text{S5}_2]$, атоми Nd2 координують по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом $[\text{Nd2S1}_2\text{S2}_2\text{S3}_1\text{S4}_1\text{S5}_1]$. Для атомів Si характерним є тетраедричне оточення – $[\text{SiS2}_1\text{S3}_1\text{S4}_1\text{S5}_1]$.

3.4.17. Структурний тип $\text{Dy}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ (ПГ $P2_1/c$): $a = 0,9813$ нм, $b = 1,09387$ нм, $c = 1,6360$ нм, $\beta = 102,86^\circ$, [95]. Координати атомів для сполуки $\text{Gd}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ (СТ $\text{Dy}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$) [93] наведені у таблиці 3.44. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів Gd та Si у структурі сполуки $\text{Gd}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ зображено на рисунку 3.41.

Таблиця 3.44.

Координати атомів для сполуки $\text{Gd}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$
(структурний тип $\text{Dy}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Gd1	4e	0,61132	0,98313	0,12507	1,0
Gd2	4e	0,87752	0,65265	0,06004	1,0
Gd3	4e	0,53286	0,37699	0,12985	1,0
Gd4	4e	0,32365	0,75955	0,28899	1,0
Si1	4e	0,50585	0,77564	0,18821	1,0
Si2	4e	0,41893	0,15293	0,18301	1,0
Si3	4e	0,74990	0,21297	0,13600	1,0
S1	4e	0,84781	0,83566	0,18881	1,0
S2	4e	0,61310	0,76168	0,01339	1,0
S3	4e	0,90927	0,84820	-0,05348	1,0
S4	4e	0,04408	0,43704	0,09415	1,0
S5	4e	0,34910	0,48027	0,22733	1,0
S6	4e	0,66637	0,47328	-0,02218	1,0
S7	4e	0,15249	0,73108	0,12630	1,0
S8	4e	0,65817	0,05906	-0,02814	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S9	4e	0,75819	0,54314	0,18856	1,0
S10	4e	0,22182	0,55396	0,11670	1,0
S11	4e	0,70031	0,88416	-0,06081	1,0
S12	4e	0,70969	0,71551	0,23358	1,0

У структурі сполуки $Gd_4Si_3S_{12}$ атоми Gd1, Gd2 та Gd3 координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із двома додатковими атомами [Gd1S1,S2,S3,S4,S5,S8,S11₂], [Gd2S4,S5,S6,S7,S9,S10,S12₁] і [Gd3S1,S2,S3,S5,S8,S9,S2,S12₁], атоми Gd4 координують по сім атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із одним додатковим атомом [Gd4S1,S2,S6,S7,S8,S10₁]. Атоми Si координують по чотири атоми Сульфуру [Si1S7,S8,S9,S10₁], [Si2S2,S5,S6,S11₁] і [Si3S1,S2,S4,S12₁].

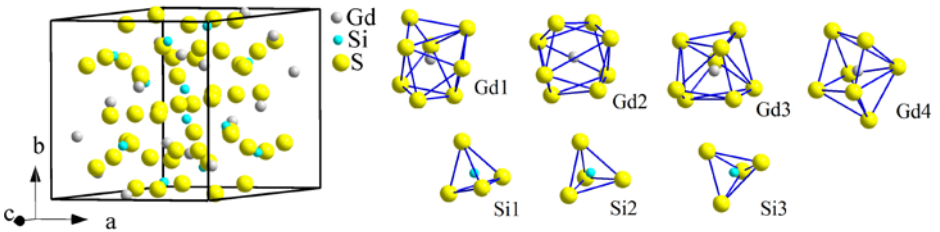


Рис. 3.41. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Gd1, Gd2, Gd3, Gd4, Si1, Si2 та Si3 у структурі сполуки $Gd_4Si_3S_{12}$ (СТ $Dy_4Si_3S_{12}$).

3.4.18. Структурний тип La_2SnS_5 (ПГ $Pbam$): $a = 1,126$ нм, $b = 0,789$ нм, $c = 0,399$ нм, [109]. Координати атомів для сполуки La_2SnS_5 наведені у таблиці 3.45. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів La та Sn у структурі сполуки La_2SnS_5 зображено на рисунку 3.42.

У структурі сполуки La_2SnS_5 атоми La координують навколо себе по дев'ять атомів Сульфуру, утворюючи тригональні призми із

трьома додатковими атомами $[\text{LaS}_1\text{S}_2\text{S}_4\text{S}_3]$. Атоми Sn центровані в октаедрах: $[\text{SnS}_2\text{S}_3\text{S}_4]$.

Таблиця 3.45.

Координати атомів для сполуки La_2SnS_5

(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
La	$4h$	0,3310	0,0740	1/2	1,0
Sn	$2a$	0	0	0	1,0
S1	$2c$	0	1/2	0	1,0
S2	$4g$	0,2980	0,3570	0	1,0
S3	$4h$	0,0690	0,1870	1/2	1,0

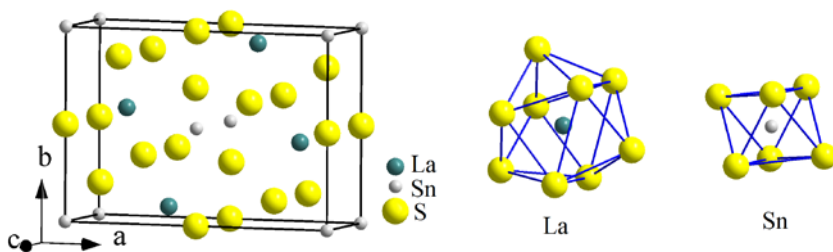


Рис. 3.42. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів La та Sn у структурі сполуки La_2SnS_5 (СТ La_2SnS_5).

РОЗДІЛ 4
КВАЗИПОТРІЙНІ СИСТЕМИ
 $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$
 (R – PЗМ; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)

4.1. Ізотермічні перерізи.

4.1.1. Системи $R_2S_3 - PbS - SiS_2$ [138-143].

Фазові рівноваги за температури 770 К у системах $R_2S_3 - PbS - SiS_2$ (R – Y, La і Er) зображено на рисунках 4.1.-4.3.

Фазові поля у досліджених системах зазначені у таблицях 4.1.-4.3.

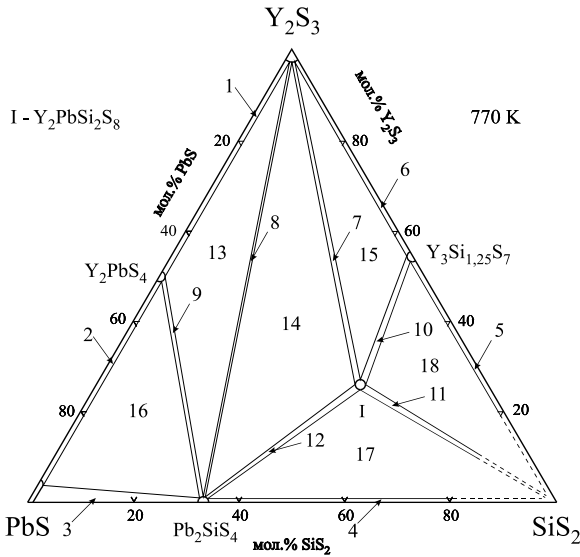


Рис. 4.1. Ізотермічний переріз системи $Y_2S_3 - PbS - SiS_2$ за температури 770 К.

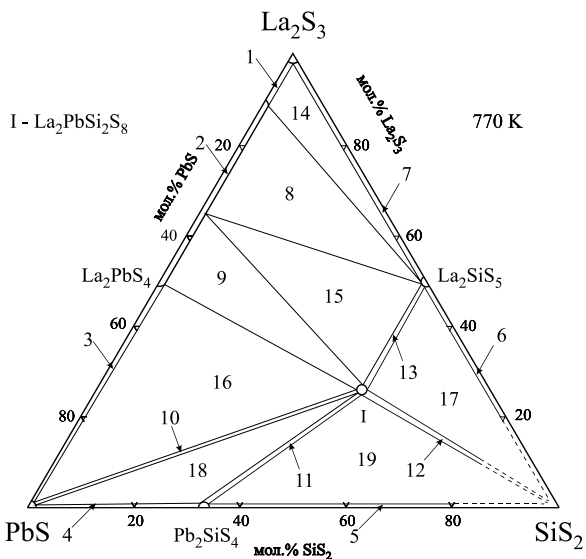


Рис. 4.2. Изотермичний переріз системи $\text{La}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$ за температури 770 К.

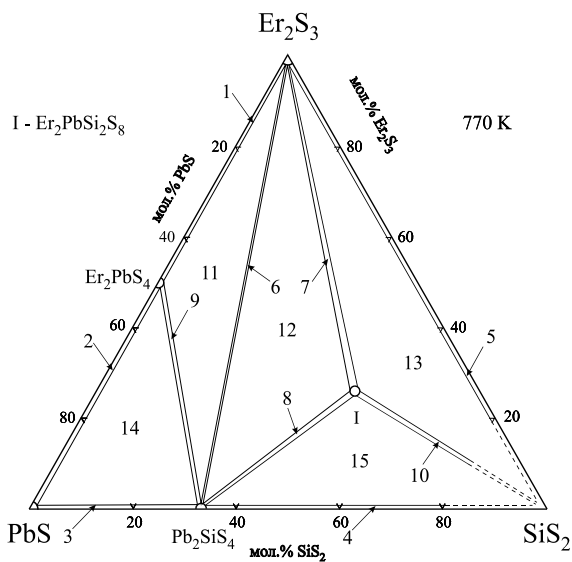


Рис. 4.3. Изотермичний переріз системи $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$ за температури 770 К.

Таблиця 4.1.

Фазові поля системи $Y_2S_3 - PbS - SiS_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$Y_2S_3 + Y_2PbS_4$
2	$PbS + Y_2PbS_4$
3	$PbS + Pb_2SiS_4$
4	$SiS_2 + Pb_2SiS_4$
5	$SiS_2 + Y_3Si_{1,25}S_7$
6	$Y_2S_3 + Y_3Si_{1,25}S_7$
7	$Y_2S_3 + Y_2PbSi_2S_8$
8	$Y_2S_3 + Pb_2SiS_4$
9	$Y_2PbS_4 + Pb_2SiS_4$
10	$Y_3Si_{1,25}S_7 + Y_2PbSi_2S_8$
11	$SiS_2 + Y_2PbSi_2S_8$
12	$Pb_2SiS_4 + Y_2PbSi_2S_8$
13	$Y_2S_3 + Y_2PbS_4 + Pb_2SiS_4$
14	$Y_2S_3 + Pb_2SiS_4 + Y_2PbSi_2S_8$
15	$Y_2S_3 + Y_3Si_{1,25}S_7 + Y_2PbSi_2S_8$
16	$PbS + Y_2PbS_4 + Pb_2SiS_4$
17	$SiS_2 + Pb_2SiS_4 + Y_2PbSi_2S_8$
18	$SiS_2 + Y_3Si_{1,25}S_7 + Y_2PbSi_2S_8$

Таблиця 4.2.

Фазові поля системи $La_2S_3 - PbS - SiS_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$La_2S_3 + La_{2+2/3x}Pb_{1-x}S_4$ ($x = 0,86$)
2	$La_{2+2/3x}Pb_{1-x}S_4$ ($x = 0 - 0,86$)
3	$PbS + La_2PbS_4$
4	$PbS + Pb_2SiS_4$
5	$SiS_2 + Pb_2SiS_4$

№ п/п поля	Фазові поля
6	$\text{SiS}_2 + \text{La}_2\text{SiS}_5$
7	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_2\text{SiS}_5$
8	$\text{La}_2\text{SiS}_5 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,39 - 0,86$)
9	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,39$) + $\text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
10	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
11	$\text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
12	$\text{SiS}_2 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
13	$\text{La}_2\text{SiS}_5 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
14	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_2\text{SiS}_5 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$)
15	$\text{La}_2\text{SiS}_5 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,39$)
16	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbS}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
17	$\text{SiS}_2 + \text{La}_2\text{SiS}_5 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
18	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
19	$\text{SiS}_2 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$

Таблиця 4.3.

Фазові поля системи $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
2	$\text{PbS} + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
3	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{SiS}_4$
4	$\text{SiS}_2 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4$
5	$\text{SiS}_2 + \text{Er}_2\text{S}_3$
6	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4$
7	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
8	$\text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
9	$\text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4$
10	$\text{SiS}_2 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
11	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4$

№ п/п поля	Фазові поля
12	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
13	$\text{SiS}_2 + \text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$
14	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
15	$\text{SiS}_2 + \text{Pb}_2\text{SiS}_4 + \text{Er}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$

4.1.2. Системи $\text{R}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ [138], [139], [141], [142], [144].

Фазові рівноваги за температури 770 К у системах $\text{R}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}$) представлено на рисунках 4.4. та 4.5.

Фазові поля у цих системах зазначені у таблицях 4.4. та 4.5.

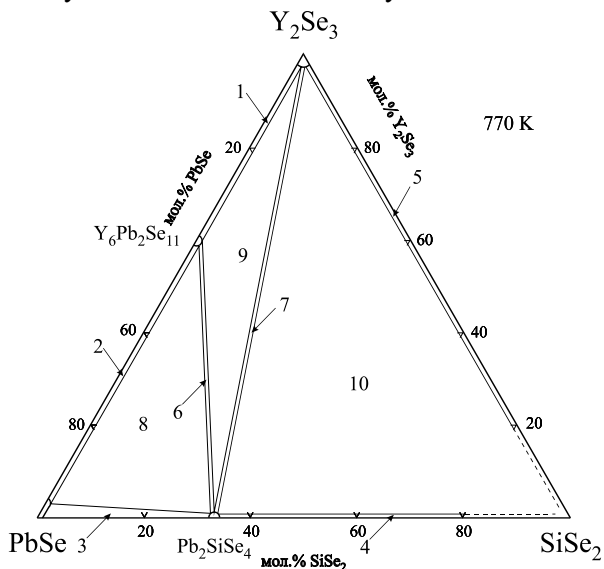


Рис. 4.4. Ізотермічний переріз системи $\text{Y}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К.

Таблиця 4.4.

Фазові поля системи $\text{Y}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Y}_2\text{Se}_3 + \text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$

№ п/п поля	Фазові поля
2	$\text{PbSe} + \text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$
3	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
4	$\text{SiSe}_2 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
5	$\text{Y}_2\text{Se}_3 + \text{SiSe}_2$
6	$\text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
7	$\text{Y}_2\text{Se}_3 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
8	$\text{Y}_2\text{Se}_3 + \text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
9	$\text{PbSe} + \text{Y}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
10	$\text{Y}_2\text{Se}_3 + \text{SiSe}_2 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$

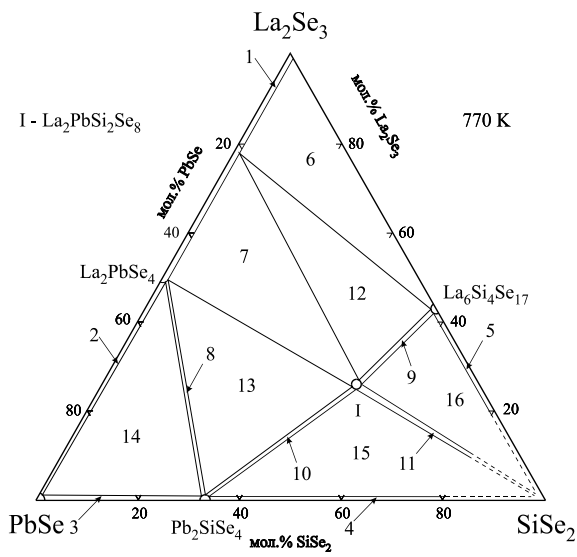


Рис. 4.5. Ізотермічний перерізи системи $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К.

Таблиця 4.5.

Фазові поля системи $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0 - 1$)

№ п/п поля	Фазові поля
2	$\text{PbSe} + \text{La}_2\text{PbSe}_4$
3	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
4	$\text{SiSe}_2 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
5	$\text{SiSe}_2 + \text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_7$
6	$\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_7 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,66 - 1$)
7	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0 - 0,66$) + $\text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
8	$\text{La}_2\text{PbSe}_4 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
9	$\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
10	$\text{Pb}_2\text{SiSe}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
11	$\text{SiSe}_2 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
12	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,66$) + $\text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
13	$\text{La}_2\text{PbSe}_4 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
14	$\text{PbSe} + \text{La}_2\text{PbSe}_4 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4$
15	$\text{SiSe}_2 + \text{Pb}_2\text{SiSe}_4 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$
16	$\text{SiSe}_2 + \text{La}_6\text{Si}_4\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$

4.1.3. Системи $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ [138], [141], [145], [147].

Фазові рівноваги за температури 770 К у системах $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ ($\text{R} - \text{Y}, \text{La}$ і Pr) представлено на рисунку 4.6.-4.8.

Фазові поля у досліджених системах зазначені у таблицях 4.6.-4.8.

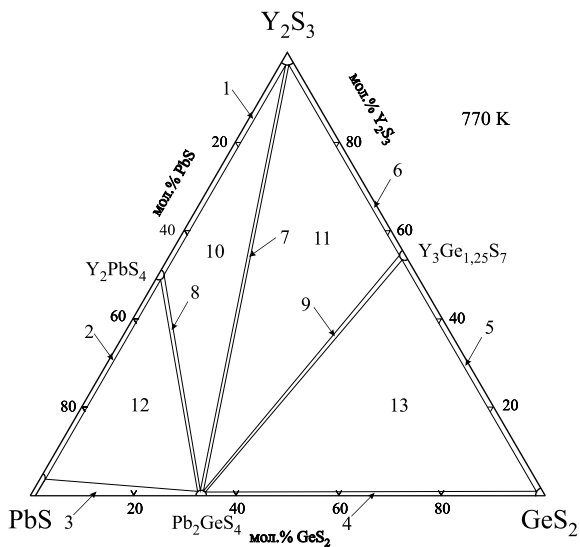


Рис. 4.6. Ізотермічний переріз системи $Y_2S_3 - PbS - GeS_2$ за температури 770 К.

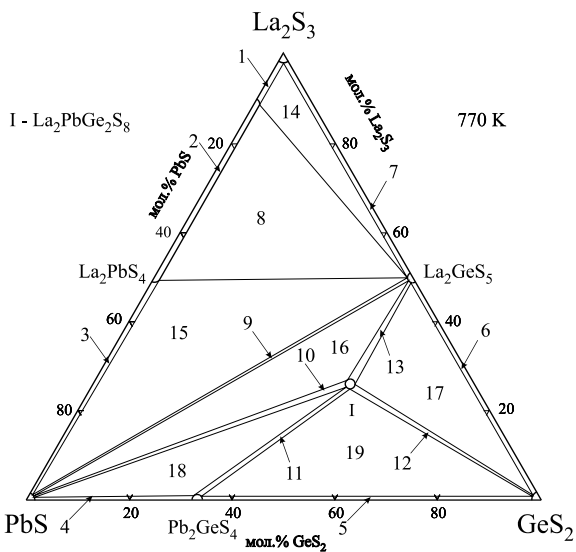


Рис. 4.7. Ізотермічний переріз системи $La_2S_3 - PbS - GeS_2$ за температури 770 К.

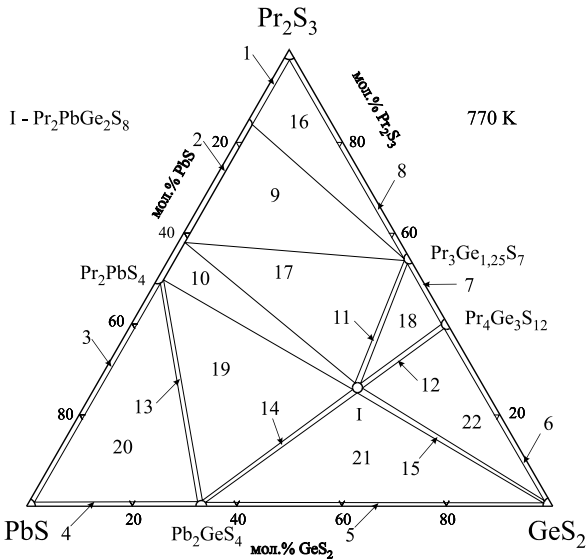


Рис. 4.8. Ізотермічний переріз системи $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ за температури 770 К.

Таблица 4.6.

Фазові поля системи $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_2\text{PbS}_4$
2	$\text{PbS} + \text{Y}_2\text{PbS}_4$
3	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
4	$\text{GeS}_2 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
5	$\text{GeS}_2 + \text{Y}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$
6	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$
7	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
8	$\text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
9	$\text{Y}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
10	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
11	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$

№ п/п поля	Фазові поля
12	$\text{PbS} + \text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
13	$\text{GeS}_2 + \text{Y}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$

Таблиця 4.7.

Фазові поля системи $\text{La}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$)
2	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,86$)
3	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbS}_4$
4	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
5	$\text{GeS}_2 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
6	$\text{GeS}_2 + \text{La}_2\text{GeS}_5$
7	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_2\text{GeS}_5$
8	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,86$) + La_2GeS_5
9	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{GeS}_5$
10	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
11	$\text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
12	$\text{GeS}_2 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
13	$\text{La}_2\text{GeS}_5 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
14	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$) + La_2GeS_5
15	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbS}_4 + \text{La}_2\text{GeS}_5$
16	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{GeS}_5 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
17	$\text{GeS}_2 + \text{La}_2\text{GeS}_5 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
18	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
19	$\text{GeS}_2 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$

Таблиця 4.8.

Фазові поля системи $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,78$)
2	$\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,78$)
3	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$
4	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
5	$\text{GeS}_2 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
6	$\text{GeS}_2 + \text{Pr}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$
7	$\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pr}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$
8	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$
9	$\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,22 - 0,78$)
10	$\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,22$) + $\text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
11	$\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
12	$\text{Pr}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12} + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
13	$\text{Pr}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4$
14	$\text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
15	$\text{GeS}_2 + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
16	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,78$) + $\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$
17	$\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x=0,22$) + $\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7$ + $\text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
18	$\text{Pr}_3\text{Ge}_{1,25}\text{S}_7 + \text{Pr}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12} + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
19	$\text{Pr}_2\text{PbS}_4 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
20	$\text{PbS} + \text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$
21	$\text{GeS}_2 + \text{Pb}_2\text{GeS}_4 + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$
22	$\text{GeS}_2 + \text{Pr}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12} + \text{Pr}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$

4.1.4. Системи $\text{R}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ [138], [141], [147 –150].

Фазові рівноваги за температури 770 К у системах $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{GeS}_2$ ($\text{R} - \text{Y}, \text{La}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Ho}$ і Er) представлено на рисунках 4.9.-4.14. Фазові поля у досліджених системах зазначені у таблицях 4.9.-4.14.

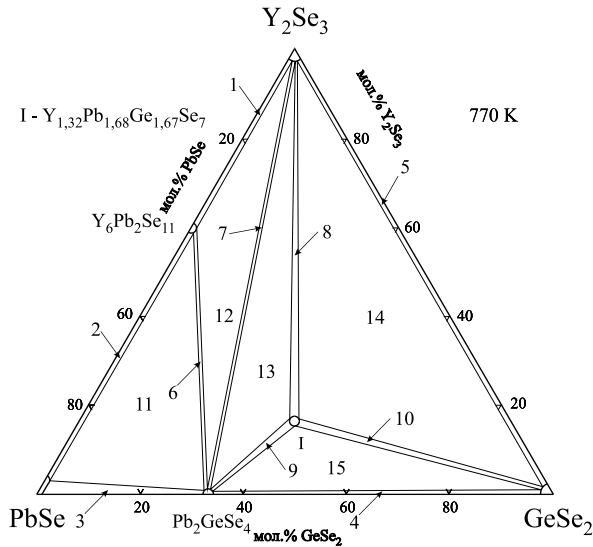


Рис. 4.9. Ізотермічний переріз системи $Y_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ за температури 770 К.

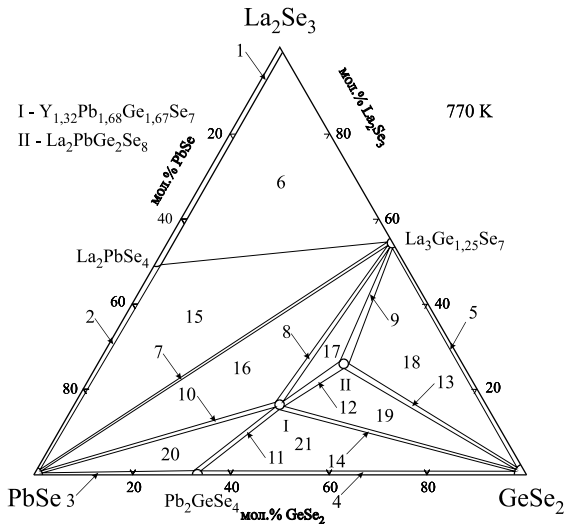


Рис. 4.10. Ізотермічний переріз системи $La_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ за температури 770 К.

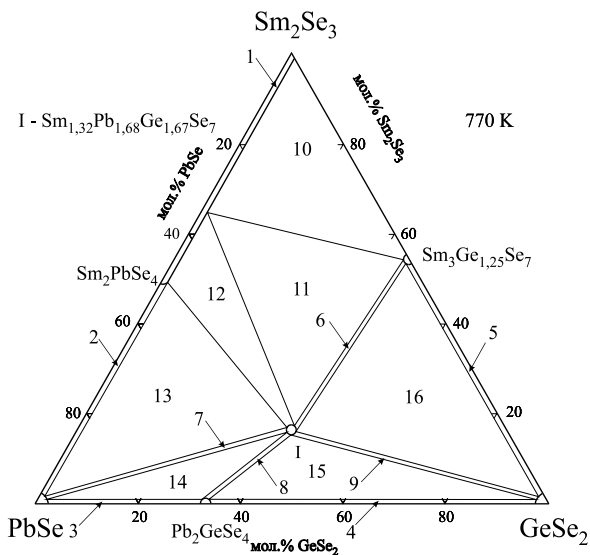


Рис. 4.11. Ізотермічний переріз системи $\text{Sm}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К.

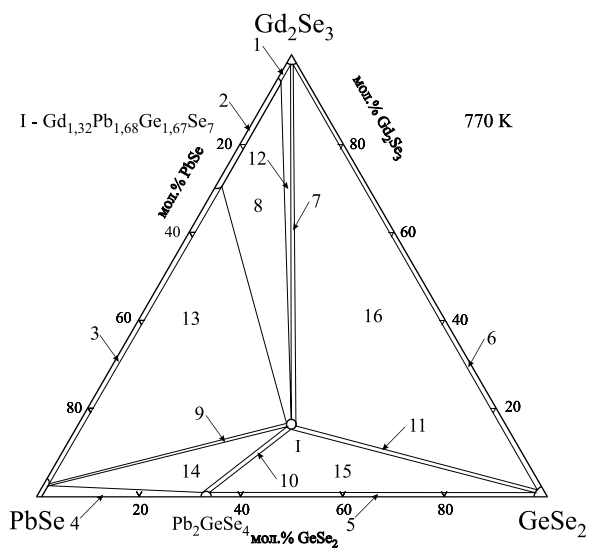


Рис. 4.12. Ізотермічний переріз системи $\text{Gd}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К.

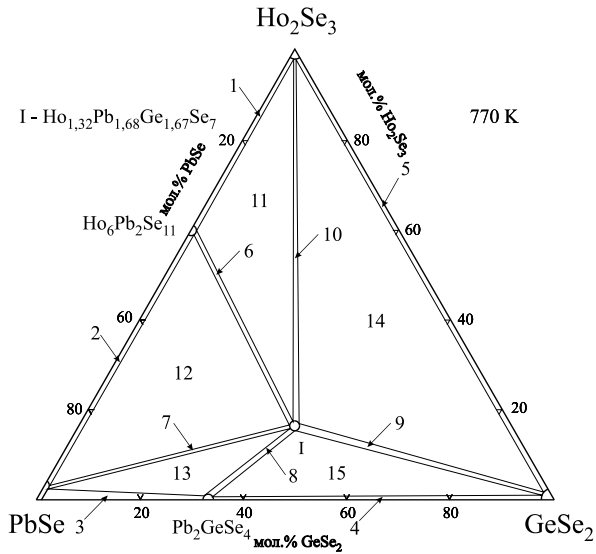


Рис. 4.13. Ізотермічний переріз системи $\text{Ho}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К.

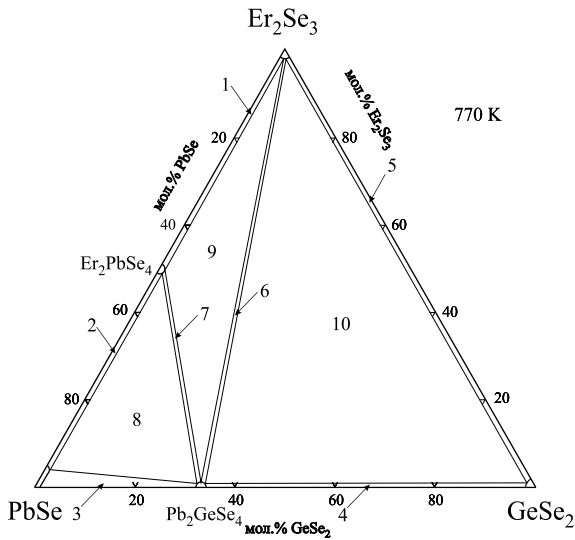


Рис. 4.14. Ізотермічний переріз системи $\text{Er}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К.

Таблиця 4.9.

Фазові поля системи $Y_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$Y_2Se_3 + Y_6Pb_2Se_{11}$
2	$PbSe + Y_6Pb_2Se_{11}$
3	$PbSe + Pb_2GeSe_4$
4	$GeSe_2 + Pb_2GeSe_4$
5	$Y_2Se_3 + GeSe_2$
6	$Y_6Pb_2Se_{11} + Pb_2GeSe_4$
7	$Y_2Se_3 + Pb_2GeSe_4$
8	$Y_2Se_3 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$
9	$Pb_2GeSe_4 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$
10	$GeSe_2 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$
11	$PbSe + Y_6Pb_2Se_{11} + Pb_2GeSe_4$
12	$Y_2Se_3 + Y_6Pb_2Se_{11} + Pb_2GeSe_4$
13	$Y_2Se_3 + Pb_2GeSe_4 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$
14	$Y_2Se_3 + GeSe_2 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$
15	$GeSe_2 + Pb_2GeSe_4 + Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$

Таблиця 4.10.

Фазові поля системи $La_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$La_{2+2/3x}Pb_{1-x}Se_4$ ($x = 0 - 1$)
2	$PbSe + La_2PbSe_4$
3	$PbSe + Pb_2GeSe_4$
4	$GeSe_2 + Pb_2GeSe_4$
5	$GeSe_2 + La_3Ge_{1,25}Se_7$
6	$La_{2+2/3x}Pb_{1-x}Se_4$ ($x = 0 - 1$) + $La_3Ge_{1,25}Se_7$
7	$PbSe + La_3Ge_{1,25}Se_7$
8	$La_3Ge_{1,25}Se_7 + La_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$

№ п/п поля	Фазові поля
9	$\text{La}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8$
10	$\text{PbSe} + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
11	$\text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
12	$\text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
13	$\text{GeSe}_2 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8$
14	$\text{GeSe}_2 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
15	$\text{PbSe} + \text{La}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbSe}_4$
16	$\text{PbSe} + \text{La}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
17	$\text{La}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
18	$\text{GeSe}_2 + \text{La}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8$
19	$\text{GeSe}_2 + \text{La}_2\text{PbGe}_2\text{Se}_8 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
20	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
21	$\text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{La}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$

Таблиця 4.11.

Фазові поля системи $\text{Sm}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0 - 1$)
2	$\text{Sm}_2\text{Se}_3 + \text{PbSe}$
3	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
4	$\text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
5	$\text{GeSe}_2 + \text{Sm}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7$
6	$\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7 + \text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
7	$\text{PbSe} + \text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
8	$\text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
9	$\text{GeSe}_2 + \text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
10	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,14 - 1$) + $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7$
11	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0 - 0,14$) + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$

№ п/п поля	Фазові поля
12	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,14$) + $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7$ + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
13	Sm_2PbSe_4 + PbSe + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
14	GeSe_2 + $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,25}\text{Se}_7$ + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
15	PbSe + Pb_2GeSe_4 + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
16	GeSe_2 + Pb_2GeSe_4 + $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$

Таблиця 4.12.

Фазові поля системи $\text{Gd}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	Gd_2Se_3 + $\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,9$)
2	$\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,5 - 0,9$)
3	PbSe + $\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,5$)
4	PbSe + Pb_2GeSe_4
5	GeSe_2 + Pb_2GeSe_4
6	GeSe_2 + Gd_2Se_3
7	Gd_2Se_3 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
8	$\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,5 - 0,9$) + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
9	PbSe + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
10	Pb_2GeSe_4 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
11	GeSe_2 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
12	Gd_2Se_3 + $\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,9$) + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
13	PbSe + $\text{Gd}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{Se}_4$ ($x = 0,5$) + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
14	PbSe + Pb_2GeSe_4 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
15	GeSe_2 + Gd_2Se_3 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
16	GeSe_2 + Pb_2GeSe_4 + $\text{Gd}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$

Таблиця 4.13.

Фазові поля системи $\text{Ho}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Ho}_2\text{Se}_3 + \text{Ho}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$
2	$\text{PbSe} + \text{Ho}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$
3	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
4	$\text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
5	$\text{Ho}_2\text{Se}_3 + \text{GeSe}_2$
6	$\text{Ho}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
7	$\text{PbSe} + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
8	$\text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
9	$\text{GeSe}_2 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
10	$\text{Ho}_2\text{Se}_3 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
11	$\text{Ho}_2\text{Se}_3 + \text{Ho}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
12	$\text{PbSe} + \text{Ho}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11} + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
13	$\text{GeSe}_2 + \text{Ho}_2\text{Se}_3 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
14	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$
15	$\text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{Ho}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$

Таблиця 4.14.

Фазові поля системи $\text{Er}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Er}_2\text{Se}_3 + \text{Er}_2\text{PbSe}_4$
2	$\text{PbSe} + \text{Er}_2\text{PbSe}_4$
3	$\text{PbSe} + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
4	$\text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
5	$\text{Er}_2\text{Se}_3 + \text{GeSe}_2$
6	$\text{Er}_2\text{Se}_3 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
7	$\text{Pb}_2\text{GeSe}_4 + \text{Er}_2\text{PbSe}_4$
8	$\text{Er}_2\text{Se}_3 + \text{Er}_2\text{PbSe}_4 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$

№ п/п поля	Фазові поля
9	$\text{PbSe} + \text{Er}_2\text{PbSe}_4 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$
10	$\text{Er}_2\text{Se}_3 + \text{GeSe}_2 + \text{Pb}_2\text{GeSe}_4$

4.1.5. Системи $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ [138], [141], [151 – 158].

Фазові рівноваги за температури 770 К у системах $\text{R}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Ho}$ і Er) представлено на рисунках 4.15.-4.20. Фазові поля у досліджених системах зазначені у таблицях 4.15.-4.20.

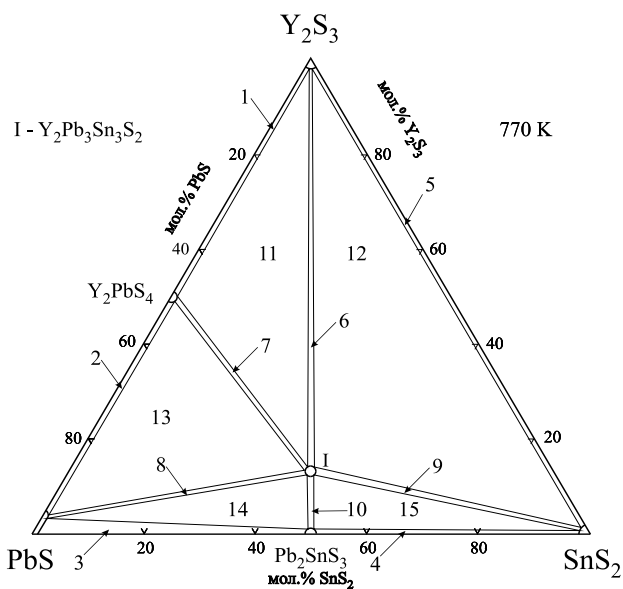


Рис. 4.15. Ізотермічний переріз системи $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

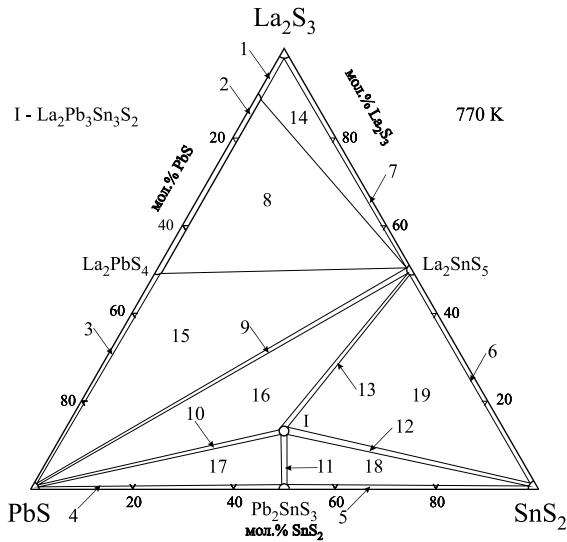


Рис. 4.16. Ізотермічний переріз системи $\text{La}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

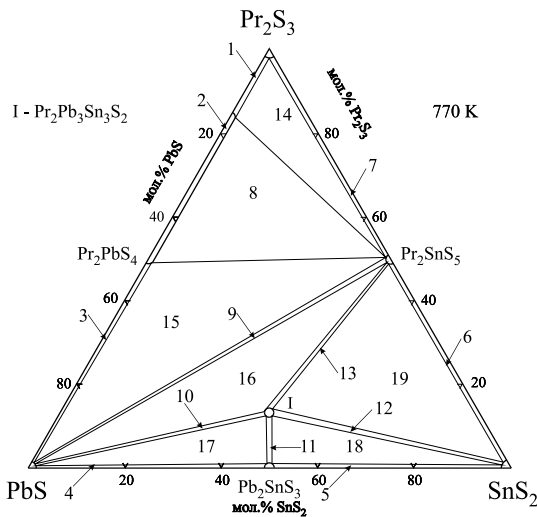


Рис. 4.17. Ізотермічний переріз системи $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

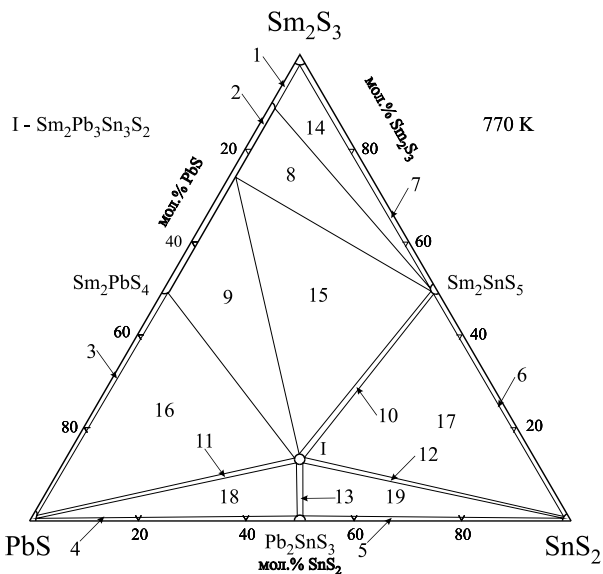


Рис. 4.18. Ізотермічний переріз системи $\text{Sm}_2\text{S}_3 - \text{Pb} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

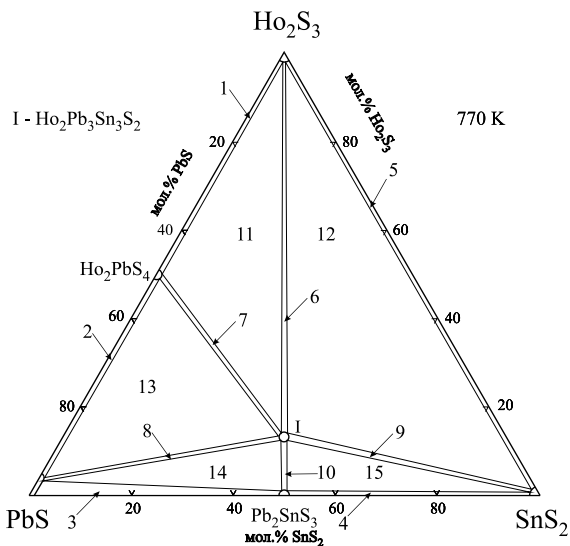


Рис. 4.19. Ізотермічний переріз системи $\text{Ho}_2\text{S}_3 - \text{Pb} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

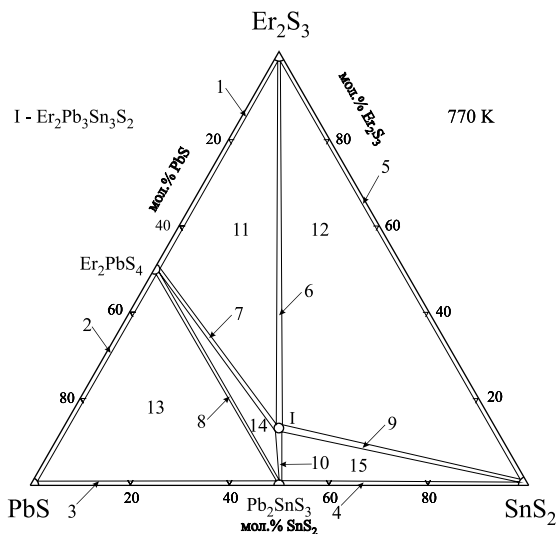


Рис. 4.20. Ізотермічний переріз системи $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К.

Таблиця 4.15.

Фазові поля системи $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_2\text{PbS}_4$
2	$\text{PbS} + \text{Y}_2\text{PbS}_4$
3	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$
4	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
5	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2$
6	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
7	$\text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
8	$\text{PbS} + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
9	$\text{SnS}_2 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
10	$\text{PbSnS}_3 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
11	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{Y}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

№ п/п поля	Фазові поля
13	$\text{PbS} + \text{Y}_2\text{PbS}_4 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
14	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
15	$\text{PbSnS}_3 + \text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12} + \text{SnS}_2$

Таблиця 4.16.

Фазові поля системи $\text{La}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$)
2	$\text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,86$)
3	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{PbS}_4$
4	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$
5	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
6	$\text{SnS}_2 + \text{La}_2\text{SnS}_5$
7	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_2\text{SnS}_5$
8	$\text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,86$)
9	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{SnS}_5$
10	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
11	$\text{PbSnS}_3 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{SnS}_2 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
13	$\text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
14	$\text{La}_2\text{S}_3 + \text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$)
15	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_2\text{PbS}_4$
16	$\text{PbS} + \text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
17	$\text{SnS}_2 + \text{La}_2\text{SnS}_5 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
18	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
19	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3 + \text{La}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

Таблиця 4.17.

Фазові поля системи $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,78$)
2	$\text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,78$)
3	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$
4	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$
5	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
6	$\text{SnS}_2 + \text{Pr}_2\text{SnS}_5$
7	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_2\text{SnS}_5$
8	$\text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,78$)
9	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{SnS}_5$
10	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
11	$\text{PbSnS}_3 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{SnS}_2 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
13	$\text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
14	$\text{Pr}_2\text{S}_3 + \text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,78$)
15	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_2\text{PbS}_4$
16	$\text{PbS} + \text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
16	$\text{SnS}_2 + \text{Pr}_2\text{SnS}_5 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
18	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
19	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3 + \text{Pr}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

Таблиця 4.18.

Фазові поля системи $\text{Sm}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Sm}_2\text{S}_3 + \text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0,86$)
2	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4$ ($x = 0 - 0,86$)
3	$\text{PbS} + \text{Sm}_2\text{PbS}_4$
4	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$

№ п/п поля	Фазові поля
5	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
6	$\text{SnS}_2 + \text{Sm}_2\text{SnS}_5$
7	$\text{Sm}_2\text{S}_3 + \text{Sm}_2\text{SnS}_5$
8	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4 (x = 0,60 - 0,86) + \text{Sm}_2\text{SnS}_5$
9	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4 (x = 0 - 0,60) + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
10	$\text{Sm}_2\text{SnS}_5 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
11	$\text{PbS} + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{SnS}_2 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
13	$\text{PbSnS}_3 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
14	$\text{Sm}_2\text{S}_3 + \text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4 (x = 0,86) + \text{Sm}_2\text{SnS}_5$
15	$\text{Sm}_{2+2/3x}\text{Pb}_{1-x}\text{S}_4 (x = 0,60) + \text{Sm}_2\text{SnS}_5 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
16	$\text{PbS} + \text{Sm}_2\text{PbS}_4 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
17	$\text{SnS}_2 + \text{Sm}_2\text{SnS}_5 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
18	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
19	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3 + \text{Sm}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

Таблиця 4.19.

Фазові поля системи $\text{Ho}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Ho}_2\text{S}_3 + \text{Ho}_2\text{PbS}_4$
2	$\text{PbS} + \text{Ho}_2\text{PbS}_4$
3	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$
4	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
5	$\text{Ho}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2$
6	$\text{Ho}_2\text{S}_3 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
7	$\text{Ho}_2\text{PbS}_4 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
8	$\text{PbS} + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
9	$\text{SnS}_2 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
10	$\text{PbSnS}_3 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

№ п/п поля	Фазові поля
11	$\text{Ho}_2\text{S}_3 + \text{Ho}_2\text{PbS}_4 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{Ho}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
13	$\text{PbS} + \text{Ho}_2\text{PbS}_4 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
14	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
15	$\text{PbSnS}_3 + \text{Ho}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12} + \text{SnS}_2$

Таблиця 4.20.

Фазові поля системи $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К

№ п/п поля	Фазові поля
1	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
2	$\text{PbS} + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
3	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3$
4	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3$
5	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2$
6	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
7	$\text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
8	$\text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{PbSnS}_3$
9	$\text{SnS}_2 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
10	$\text{PbSnS}_3 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
11	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
12	$\text{Er}_2\text{S}_3 + \text{SnS}_2 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
13	$\text{PbS} + \text{PbSnS}_3 + \text{Er}_2\text{PbS}_4$
14	$\text{Er}_2\text{PbS}_4 + \text{PbSnS}_3 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$
15	$\text{SnS}_2 + \text{PbSnS}_3 + \text{Er}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$

4.2. Тетрарні сполуки.

У системах $R_2X_3 - PbX - D^{IV}X_2$ ($R - PЗМ, D^{IV} - Si, Ge, Sn; X - S, Se$) утворюється сорок три (табл. 4.21.) тетрарні сполуки $R_2PbSi_2S_8$ ($R - Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er$), $R_2PbSi_2Se_8$, ($R - La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd$), $R_2PbGe_2S_8$ ($R - La, Ce, Pr$), $R_2PbGe_2S_8$ ($R - La$), $R_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ ($R - Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho$) і $R_2Pb_3Sn_3S_{12}$ ($R - Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm$). Сполуки $R_2PbSi(Ge)_2S(Se)_8$ утворюються у відповідних системах при співвідношенні вихідних компонентів 1 : 1 : 2, сполуки $R_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ – при співвідношенні вихідних компонентів 0,66 : 1,68 : 1,67, а сполуки $R_2Pb_3Sn_3S_{12}$ – при співвідношенні вихідних компонентів 1 : 3 : 3.

Таблиця 4.21.

Кристалографічні характеристики тетрарних сполук

№ п/п	Сполука	Періоди комірки, нм			Літ.
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
(СТ $La_2PbSi_2S_8$, ПГ $R3c$)					
1.	$Y_2PbSi_2S_8$	0,88433	–	2,59745	[159]
2.	$La_2PbSi_2S_8$	0,90522	–	2,6964	[160]
3.	$Ce_2PbSi_2S_8$	0,90030	–	2,6765	[160]
5.	$Pr_2PbSi_2S_8$	0,89744	–	2,6640	[160]
6.	$Nd_2PbSi_2S_8$	0,8942	–	2,6492	[160]
7.	$Sm_2PbSi_2S_8$	0,88854	–	2,6283	[160]
8.	$Gd_2PbSi_2S_8$	0,88633	–	2,6185	[160]
9.	$Tb_2PbSi_2S_8$	0,88604	–	2,61184	[160]
10.	$Dy_2PbSi_2S_8$	0,88422	–	2,60033	[160]
11.	$Ho_2PbSi_2S_8$	0,88428	–	2,5963	[160]
12.	$Er_2PbSi_2S_8$	0,8830	–	2,584	[143]
13.	$La_2PbSi_2Se_8$	0,93984	–	2,8089	[160]
14.	$Ce_2PbSi_2Se_8$	0,9351	–	2,7908	[160]

№ п/п	Сполука	Періоди комірки, нм			Літ.
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
15.	Pr ₂ PbSi ₂ Se ₈	0,93264	–	2,7779	[160]
16.	Nd ₂ PbSi ₂ Se ₈	0,92998	–	2,7670	[160]
17.	Sm ₂ PbSi ₂ Se ₈	0,92620	–	2,7487	[160]
18.	Gd ₂ PbSi ₂ Se ₈	0,92320	–	2,7329	[160]
19.	La ₂ PbGe ₂ S ₈	0,90613	–	2,7187	[160]
20.	Ce ₂ PbGe ₂ S ₈	0,90176	–	2,6980	[160]
21.	Pr ₂ PbGe ₂ S ₈	0,89840	–	2,68670	[160]
22.	La ₂ PbGe ₂ Se ₈	0,93994	–	2,8098	[149]
(CT $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$, III $P6_3$)					
23.	Y _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0394	–	0,66361	[161]
24.	La _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0590	–	0,6612	[161]
25.	Ce _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0542	–	0,6604	[161]
26.	Pr _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0520	–	0,6623	[161]
27.	Nd _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0499	–	0,6640	[161]
28.	Sm _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0442	–	0,6627	[161]
29.	Gd _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0428	–	0,6638	[161]
30.	Tb _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0406	–	0,66384	[161]
31.	Dy _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0389	–	0,6647	[161]
32.	Ho _{1,32} Pb _{1,68} Ge _{1,67} Se ₇	1,0381	–	0,6646	[161]
(CT $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$, III $Pmc2_1$)					
33.	Y ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39021	2,01003	1,15169	[151]
34.	La ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39697	2,0329	1,1606	[154]
35.	Ce ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39575	2,0275	1,1590	[154]
36.	Pr ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39448	2,0071	1,1702	[154]
37.	Nd ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39361	2,0049	1,1680	[154]
38.	Sm ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39230	2,0119	1,1611	[154]
39.	Gd ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39153	2,0206	1,1556	[154]

№ п/п	Сполука	Періоди комірки, нм			Літ.
		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
40.	Tb ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39076	2,0174	1,1532	[154]
41.	Dy ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39000	2,0153	1,1524	[154]
42.	Ho ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,38992	2,01175	1,15140	[154]
43.	Tm ₂ Pb ₃ Sn ₃ S ₁₂	0,39006	2,0029	1,1513	[154]

4.3. Кристалічна структура тетрарних сполук.

4.3.1. Структурний тип La₂PbSiS₈ (ПГ $R\bar{3}c$): $a = 0,90522$ нм, $c = 2,6964$ нм, [160]. Координати атомів для сполуки La₂PbSiS₈ наведені у таблиці 4.22. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів M (La, Pb) та Si у структурі сполуки La₂PbSiS₈ зображено на рисунку 4.6.

Таблиця 4.22.

Координати атомів для сполуки La₂PbSiS₈

(власний структурний тип)

АТОМ	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
M	18e	0,34803	0,01470	0,0833	0,696 La + 0,304 Pb
Si	12c	2/3	1/3	-0,00684	1,0
S1	12c	1/3	-1/3	0,08575	1,0
S2	36f	0,43233	0,30201	0,01982	1,0

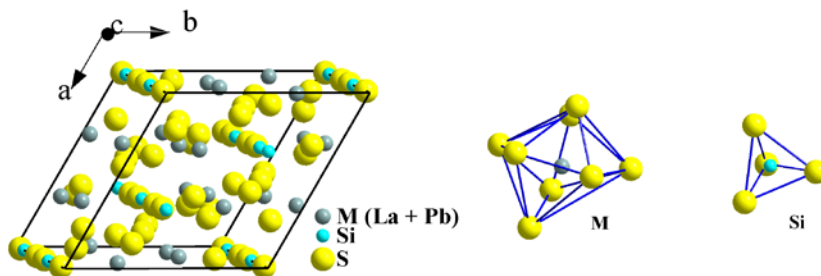


Рис. 4.6. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів M (La + Pb) та Si у структурі сполуки La₂PbSiS₈.

У кристалічній структурі сполуки $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$ атоми статистичної суміші координують навколо себе по вісім атомів Сульфуру $[\text{M}(\text{La} + \text{Pb})\text{Si}_2\text{S}_6]$, а атоми Si – чотири атоми Сульфуру $[\text{SiSi}_1\text{S}_3]$.

Кристалічну структуру сполуки $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$ можна розглядати як похідну від кристалічної структури сполуки $\text{Eu}_3\text{As}_2\text{S}_8$ [162] ($2\text{Eu}^{3+} \rightarrow 2\text{La}^{3+}$, $\text{Eu}^{2+} \rightarrow \text{Pb}^{2+}$). Атоми La і Pb у структурі $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$ займають відповідні позиції атомів Eu у структурі сполуки $\text{Eu}_3\text{As}_2\text{S}_8$ (рис. 4.7.), а атоми Si – відповідні позиції атомів As.

Особливістю сполуки $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$ є існування у її кристалічній структурі двовимірних сіток 3^6 та 6^3 , утворених атомами $\text{M}(\text{La} + \text{Pb})$ і Si відповідно (рис. 4.8.). Ці сітки є паралельними площині ab .

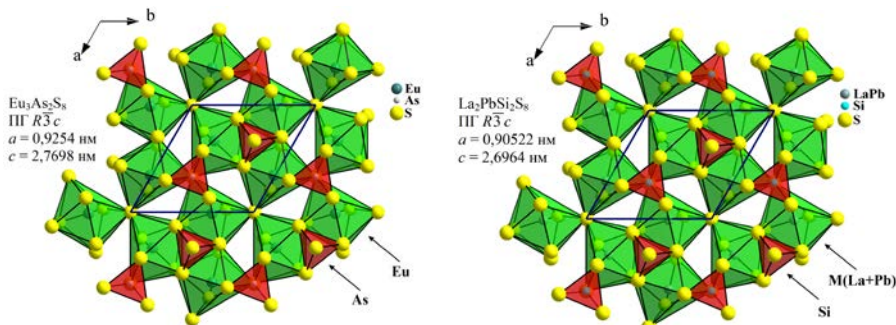


Рис. 4.7. Укладка многогранників у структурі сполук $\text{Eu}_3\text{As}_2\text{S}_8$ та $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$.

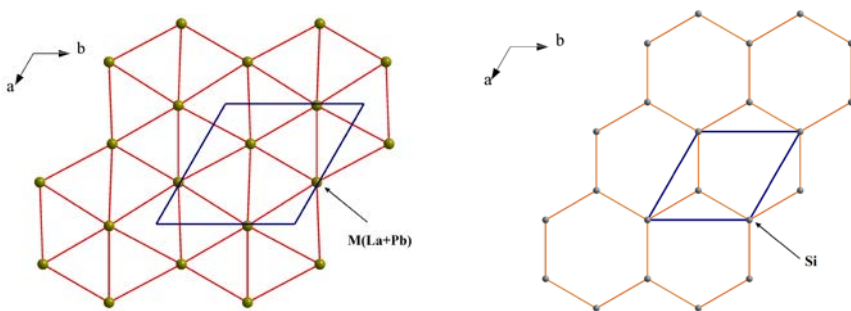


Рис. 4.8. Двовимірні сітки 3^6 і 6^3 у структурі сполуки $\text{La}_2\text{PbSi}_8\text{S}_8$.

4.3.2. Структурний тип $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ (ПГ $P6_3$):

$a = 1,0394$ нм, $c = 0,66361$ нм, [161]. Координати атомів для сполуки $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ наведені у таблиці 4.23. Елементарну комірку та координаційні многогранники атомів $M(Y, Pb)$ та Ge у структурі сполуки $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ зображено на рисунку 4.9.

Таблиця 4.23.

Координати атомів для сполуки $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$

(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
M	$6c$	0,3843	0,1631	0,402	0,44 Y + 0,56 Pb
Ge1	$2b$	1/3	2/3	0,324	1,0
Ge2	$2a$	0	0	0	0,67
Se1	$6c$	0,255	0,106	0,986	1,0
Se2	$6c$	0,529	0,441	0,692	1,0
Se3	$2b$	1/3	2/3	0,679	1,0

Кристалічна структура сполуки $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ сформована тригональними призмами (із одним додатковим атомом) $[M(Y + Pb)Se_1_2Se_2_4Se_3_1]$, тетраедрами $[Ge_1Se_2_3Se_3_1]$ і трикутниками $[Ge_2Se_1_3]$.

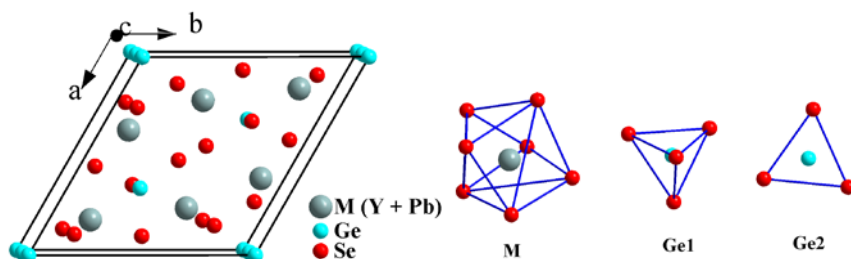


Рис. 4.9. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів $M(Y + Pb)$ та Ge у структурі сполуки $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$.

Особливості укладки координаційних многогранників у структурному типі $Y_{1,32}Pb_{1,68}Ge_{1,67}Se_7$ можна розглянути на прикладі

сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$, $a = 1,0442$, $c = 0,6627$ нм). Кристалічна структура сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ побудована із тригональних призм (із одним додатковим атомом) $[\text{M}(\text{Sm}+\text{Pb})\text{Se}_7]$, тетраєдрів – $[\text{Ge}_1\text{Se}_4]$ і трикутників – $[\text{Ge}_2\text{Se}_3]$ (рис. 4.10.). У структурі сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ атом Ge2 лежить всередині октаедра, утвореного шістьма атомами Se. Оскільки він знаходиться недалеко від однієї із граней цього октаедра, то реальним координаційним многогранником для Ge2 є трикутник.

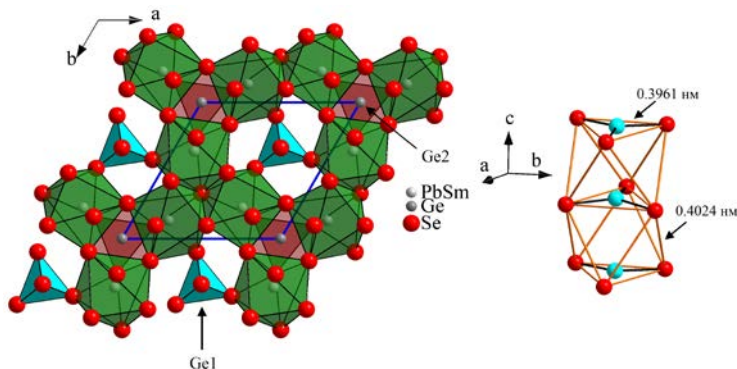


Рис. 4.10. Катіонні поліедри у структурі сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$.

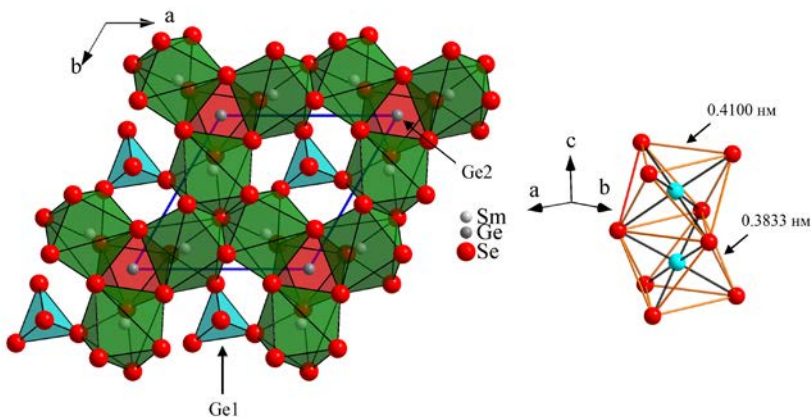


Рис. 4.11. Катіонні поліедри у структурі сполуки $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$.

Із літературного джерела [163] відомо, що у системі Sm – Ge – Se утворюється тернарна сполука $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$ (ПГ $P6_3$, $a = 1,04419$ і $c = 0,60283$ нм).

Кристалічна структура сполуки $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$ аналогічно сформована із тригональних призм $[\text{SmSe}_7]$, тетраедрів $[\text{Ge}_1\text{Se}_4]$ і октаедрів $[\text{Ge}_2\text{Se}_6]$ (рис. 4.11.). Обидві структури $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ та $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$ мають подібні структурні елементи. Атоми Ge2 в структурі сполуки $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$ розташовані майже в центрах октаедрів, утворених атомами Se, а атоми Ge2 в структурі $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ розташовані поруч з однією з трикутних граней, таких октаедрів.

Структура сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ може бути отримана із структури сполуки $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$ шляхом заміни атомів Sm, що займають одну кристалографічну позицію, атомами Pb.

Об'єм елементарної комірки сполуки $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ дорівнює $0,6257 \text{ нм}^3$ і є більшим, ніж для $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$, $0,5692 \text{ нм}^3$. Параметри решітки a для обох сполук мають приблизно однакові значення, тоді як параметр c для $\text{Sm}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ значно більший, ніж для $\text{Sm}_3\text{Ge}_{1,48}\text{Se}_7$. Аналогічні закономірності простежуються в тернарних $\text{R}_3\text{Ge}_{1+x}\text{Se}_7$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Sm}, \text{Gd}$ and Tb ; $x = 0,43\text{--}0,49$) і тетрарних сполуках $\text{R}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ і Ho).

Збільшення співвідношення c/a для тетрарних сполук $\text{R}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ в порівнянні з тернарними сполуками $\text{R}_3\text{Ge}_{1+x}\text{Se}_7$ пов'язане з існуванням у їх структурі великих за розміром іонів Pb^{2+} . Як результат, у структурі сполук $\text{R}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ і Ho) спостерігається видовження октаедра $[\text{Ge}_2\text{Se}_6]$ вздовж осі c .

4.3.3. Структурний тип $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$ (ПГ $Pmc2_1$).

Досліджуючи фазові рівноваги у системі $Y_2S_3 - PbS - SnS_2$ за температури 770 К [151] при співвідношенні вихідних компонентів 1 : 3 : 3, нами встановлено існування нової тетравної сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$.

Кристалічна структура цієї сполуки досліджена рентгенівським методом порошку. Відбиття на рентгенограмі проіндексовані в ромбічній сингонії (ПГ $Pmc2_1$, $a = 0,39021$ нм, $b = 2,01003$ нм, $c = 1,15169$ нм. Координати атомів для сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$ наведені у таблиці 4.24.

Таблиця 4.24.

Координати атомів для сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$

(власний структурний тип)

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
Y1	$2a$	0	0,4108	0,9567	1,0
Y2	$2a$	0	0,1061	0,6305	1,0
Pb1	$2a$	0	0,3782	0,5739	1,0
Pb2	$2a$	0	0,2589	0,2121	1,0
Pb3	$2a$	0	0,0869	0	1,0
Sn1	$2b$	1/2	0,2501	0,8060	1,0
Sn2	$2b$	1/2	0,0868	0,3214	1,0
Sn3	$2b$	1/2	0,4258	0,2927	1,0
S1	$2a$	0	0,0150	0,2510	1,0
S2	$2a$	0	0,1660	0,4020	1,0
S3	$2a$	0	0,2380	0,6430	1,0
S4	$2a$	0	0,2570	0,9590	1,0
S5	$2a$	0	0,4800	0,2470	1,0
S6	$2b$	1/2	0,0240	0,5240	1,0
S7	$2b$	1/2	0,1190	0,8020	1,0

Атом	ПСТ	x/a	y/b	z/c	G
S8	$2b$	$1/2$	0,1600	0,1380	1,0
S9	$2b$	$1/2$	0,3180	0,4020	1,0
S10	$2b$	$1/2$	0,3540	0,1090	1,0
S11	$2b$	$1/2$	0,3770	0,8000	1,0
S12	$2b$	$1/2$	0,4930	0,4990	1,0

У структурі сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$ атоми Y утворюють два види многогранників (рис. 4.12.): тригональні призми з двома додатковими атомами $[Y1S4_1S5_1S10_2S11_2S12_2]$ та тригональні призми з одним додатковим атомом $[Y2S1_1S2_1S3_1S6_2S7_2]$. Атоми Pb1 та Pb3 координують по сім атомів Сульфуру $[Pb1S3_1S9_2S11_2S12_2]$ і $[Pb3S1_1S6_2S7_2S8_2]$, а атоми Pb2 – по вісім атомів Сульфуру $[Pb2S2_1S4_1S8_2S9_2S10_2]$. Атоми Sn1 та Sn2 утворюють октаедри $[Sn1S3_2S4_2S7_1S11_1]$ і $[Sn2S1_2S2_2S6_1S8_1]$, а атоми Sn3 координують навколо себе по п'ять атомів Сульфуру $[Sn3S5_2S9_1S10_1S12_1]$.

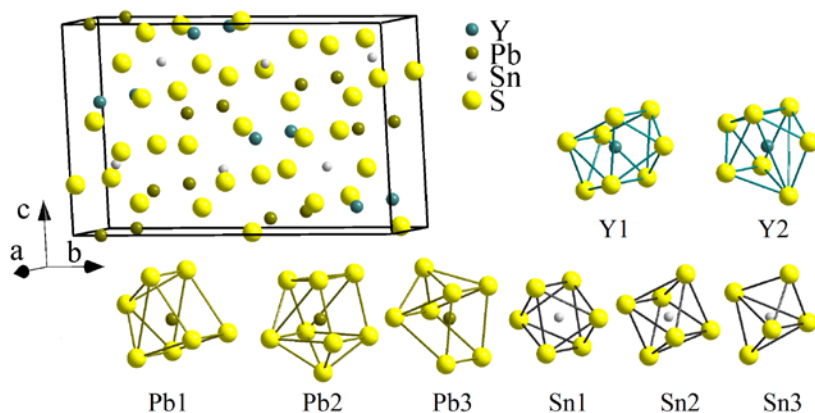


Рис. 4.12. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів Y, Pb та Sn у структурі сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$.

Кристалічна структура сполуки $Y_2Pb_3Sn_3S_{12}$ є похідною від

кристалічної структури сполуки $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ [164] ($2\text{Eu}^{3+} \rightarrow 2\text{Y}^{3+}$, $3\text{Eu}^{2+} \rightarrow 3\text{Pb}^{2+}$). Атоми Y і Pb у структурі $\text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ займають еквівалентні позиції атомів Eu у структурі $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ (рис. 4.13.), позиції решти атомів є ідентичними.

Елементарна комірка сполуки $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ утворена із фрагментів елементарних комірок сполук La_2SnS_5 [108] і $\text{Eu}_3\text{Sn}_2\text{S}_7$ [165]. Оскільки кристалічна структура сполуки $\text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ походить зі структури $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ впорядкованим заміщенням атомів Європію атомами Y і Pb, то фрагменти елементарних комірок сполук La_2SnS_5 і $\text{Eu}_3\text{Sn}_2\text{S}_7$ також спостерігаються у структурі сполуки $\text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ (рис. 4.14.).

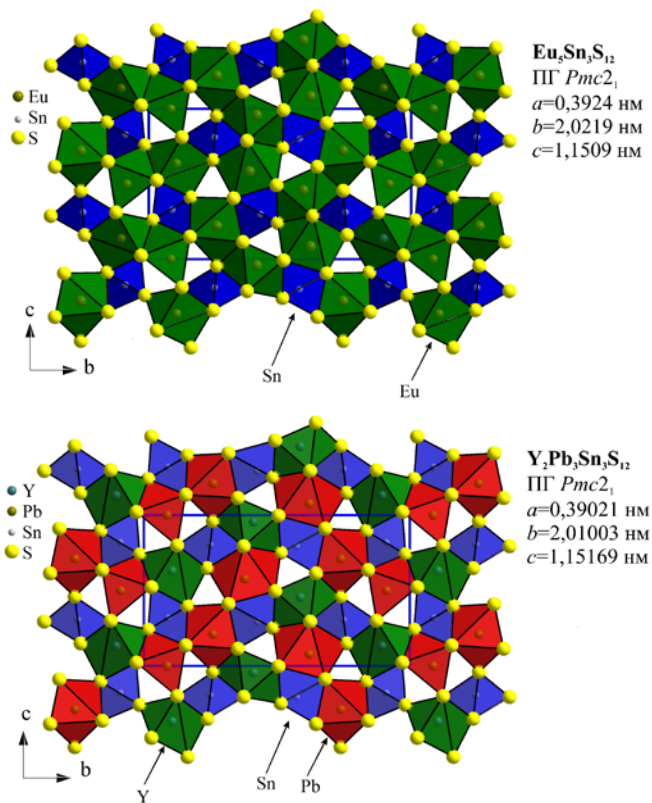


Рис. 4.13. Укладка многогранників у структурі сполук $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ та $\text{Y}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$.

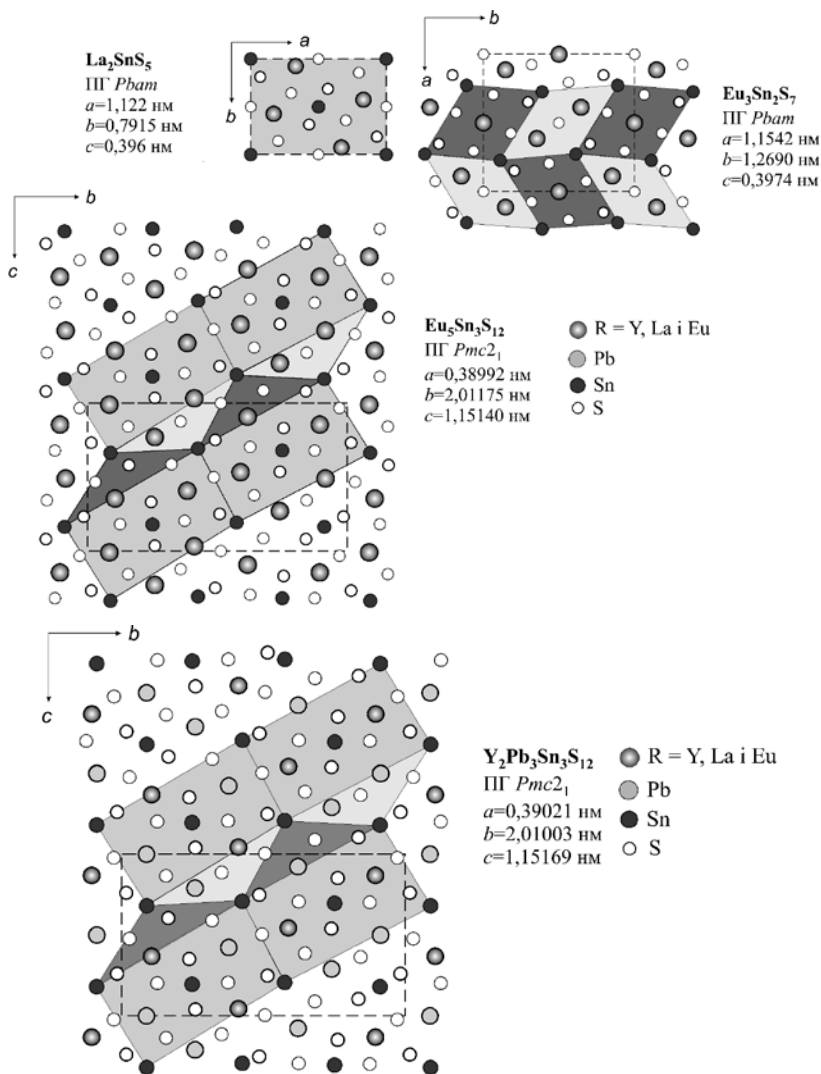


Рис. 4.14. Фрагменти елементарних комірок сполук La₂SnS₅ і Eu₅Sn₃S₁₂ у структурі сполуки Y₂Pb₃Sn₃S₁₂.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1]. Skums V. F. Solid solutions of the PbSe – PbS system at high pressures / V. F. Skums, R. L. Pink, M. R. Allasov // *Inorganic Materials*. – 1991. – № 27(8). – P.1336-1340.
- [2]. Kabalkina S. S. Phase transitions in group IV-VI compounds at high pressure / S. S. Kabalkina, N. R. Serebryanaya, L. F. Vereshchagin // *Solid State* – 1968. – № 10(3). – P.574-579.
- [3]. High pressure X-ray diffraction study on the structural phase transitions in PbS, PbSe and PbTe with synchrotron radiation / [Chattopadhyay T. K., von Schnering H. G., Grosshans W., Holzapfel W. B.] // *Physica B and C (Netherland)* – 1986. – Vol. 139-140. – P.356-360.
- [4]. Structural, electronic, optical and thermodynamic properties of PbS, PbSe and their ternary alloy $\text{PbS}_{1-x}\text{Se}_x$ / Labidi M., Meradji H., Ghemid S. et al. // *Modern Physics Letters B* – 2011. – № 25(7). – P.473-486.
- [5]. Mariano A. N. Polymorphism in some IV-VI compounds induced by high pressure and thin-film epitaxial growth / A. N. Mariano, K. L. Chopra // *Appl. Phys. Lett.* – 1967. – № 10. – P.282-284.
- [6]. An electron microscope examination of scandium sesquisulphide, Sc_2S_3 , and its mode of disordering in the electron beam / [Otero-Diaz L. C., Hiraya K., Sellar J. R., Hyde B. G.] // *Acta Crystallogr. B* – 1984. – № 40. – P.355-359.
- [7]. Rodier N. Chimie minerale. Sur une nouvelle serie de combinaisons des sesquisulfures de terres rares et d'yttrium avec le sesquisulfure de scandium / N. Rodier, P. Laruelle, J. Flahaut // *Comptes Rendus*

- Hebdomadaires des Seances de l'Academie des Sciences, Serie C, Sciences Chimiques – 1969. – № 269. – P.1391-1393.
- [8]. Range K. -J. Hochdruckmodifikationen der Lanthaniden (III) sulfide Ln_2S_3 (Ln = Lu - Ho, Y) mit U_2S_3 -Struktur / K. -J. Range, R. Leeb // Z. Naturforsch. – 1975. – Bd. 30. – S.889-895.
- [9]. Schleid T. Crystal structure of $\text{D-Y}_2\text{S}_3$ and Y_2OS_2 / T. Schleid // Eur. J. Solid State Inorg. Chem. – 1992. – Vol. 29. – P.1015-1028.
- [10]. Eatough N. L. High-Pressure Th_3P_4 -Type Polymorphs of Rare Earth Sesquichalcogenides / N. L. Eatough, A. W. Webb, H. T. Hall // Inorg. Chem. – 1969. – Vol. 8. – P.2069-2071.
- [11]. Елисеев А. А. Взаимосвязь геометрии и структуры элементарных ячеек веществ в неорганической химии / А. А. Елисеев, Г. М. Кузьмичева // Доклады Академии наук СССР – 1979. – V. 246. – P.1162-1165.
- [12]. Zachariasen W. H. Crystal Chemical Studies of the 5f-Series of Elements. I. New Structure Types / W. H. Zachariasen // Acta Cryst. – 1948. – Vol. 1. – P.265-268.
- [13]. Marcon J. P. Sulfures et seleniures superieurs de plutonium et des lanthanides / J. P. Marcon, R. Pascard // J. of Inorg. Nucl. Chemi. – 1966. – Vol. 28. – P.2551-2560.
- [14]. Schleid Th. Röntgenstrukturanalysen an Einkristallen von Ce_2S_3 im A- und C-Typ / Th. Schleid, P. Lauxmann // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1999. – V. 625. – P.1053-1055.
- [15]. Schleid Th. $\text{A-Pr}_2\text{S}_3$, $\text{D-Ho}_2\text{S}_3$ und $\text{E-Yb}_2\text{S}_3$: Synthese und Einkristallstrukturuntersuchungen / Th. Schleid, F. Lissner // Z. Naturforsch. – 1996. – Vol. B51. – P.733-738.

- [16]. Lauxmann P. Einkristalle von CuPrS_2 im A- und Pr_2S_3 im C-Typ bei Versuchen zur Synthese ternärer Kupfer (I) – Praseodym (III) – Sulfide / P. Lauxmann, S. Strobel, Th. Schleid // *Z. Anorg. Allg. Chem.* – 2002. – Vol. 628. – P.2403-2408.
- [17]. Schleid Th. Einkristalle von A- Nd_2S_3 , U- Ho_2S_3 , D- Er_2S_3 und E- Lu_2S_3 durch Oxidation reduzierter Chloride der Lanthanide mit Schwefel / Th. Schleid, F. Lissner // *Z. Anorg. Allg. Chem.* – 1992. – Vol. 615. – P.19-26.
- [18]. Comparative study of some rare earth sulfides: doped γ -[A] M_2S_3 (M = La, Ce and Nd, A = Na, K and Ca) and undoped γ - M_2S_3 (M = La, Ce and Nd) / [Mauricot R. Gressier P, Evain M, Brec R.] // *J. Alloys Compd.* – 1995. – Vol. 223. – P.130-138.
- [19]. Рентгеноструктурное исследование монокристаллов халькогенидов самария SmSe_{2-x} и Sm_2Se_3 / А. А. Елисеев, Ж. Лаурьер, Г. Кола и др. // *Журн. структ. химии.* – 1968. – Т.9. – С.464-465.
- [20]. Sur les varietes alpha et beta des sulfures L_2S_3 des terres rares / [Basancon P., Adolphe C., Flahaut J., Laruelle P.] // *Mater. Res. Bull.* – 1969. – Vol. 4. – P.227-238.
- [21]. Lissner F. Über Sulfide und Oxidsulfide des Samariums / F Lissner, Th. Schleid // *Z. Naturforsch.* – 1992. – V. 47. – P.1614-1620.
- [22]. Aruga A. Crystal structure of samarium sesquisulfide / A. Aruga, S. Tsujimi, I. Nakai // *Phase Transition.* – 1992. – V. 38. – P.127-220.
- [23]. Определение кристаллических структур γ - La_2S_3 и γ - Sm_2S_3 . Соотношение структур Th_3P_4 и циркона / Н. В. Подберезская, Н. В. Кожемяк, Л. Г. Голубева и др. // *Журн. структ. химии.* –

1979. – Т. 20. – С. 1092-1095.
- [24]. Palazzi M. Affinement de la structure cristalline de Eu_3S_4 / M. Palazzi, S. Jaulmes // Mater. Res. Bull. – 1978. – Vol. 13. – P.1153-1155.
- [25]. Schleid Th. Das System $\text{Na}_2\text{GdClH}_x/\text{S}$. II. Einkristalle von Gd_2S_3 im U_2S_3 -Typ / Th. Schleid // Z. Anorg. Allgem. Chem. – 1990. – V. 590. – P.111-119.
- [26]. Schleid Th. C- Gd_2S_3 und C- Tb_2S_3 : Darstellung und Röntgenstrukturanalyse von Einkristallen / Th. Schleid, F. A. Weber // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1998. – V. 624. – P.557-558.
- [27]. Schleid Th. Neue Sesquisulfide der Lanthanoide im U_2S_3 -Typ: Tb_2S_3 und Dy_2S_3 / Th. Schleid // Z. Naturforsch. – 1992. – Bd. B47. – S.45-50.
- [28]. Орлова И. Г. Физико-химическое исследование взаимодействия серы и тербия / И. Г. Орлова, А. А. Елисеев // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. – 1983. – Т. 28, Вып. 1. – С.65-68.
- [29]. Ballestracci R. Combinaisons sulfurée de terres rares et d'argent de type Th_3P_4 / R. Ballestracci // C. R. Acad. Sci. Paris. – 1966. – № 262. – P.1155-1156.
- [30]. Structure of Two Modifications of Dysprosium Sesquisulfide Dy_2S_3 / A. Meetsma, G. A. Wieggers, R. J. Haange et al. // Acta Cryst. – 1991. – Vol. 47. – P.2287-2291.
- [31]. White J. G. Structure determination and crystal preparation of monoclinic rare earth sesquisulfides / J. G. White, P. N. Yocom, S. Lerner // Inorg. Chem. – 1967. – Vol.6. – P.1872-1875.
- [32]. Synthesis and crystal structure of F-type erbium sesquisulfide, $\text{F-Er}_2\text{S}_3$

- / [Fang C. M., Meetsma A., Wiegers G. A., Boom G.] // J. Alloys Compd. – 1993. – V. 201. – P.255-259.
- [33]. Range K.-J. Darstellung und Kristallstruktur der Hochdruckphase Tm_2S_3 -II / K.-J. Range, R. Leeb // Z. Naturforsch. – 1976. – Bd. B31. – S.311-314.
- [34]. Structure refinement of Tm_2S_3 -IV, a defect- Th_3P_4 -type high pressure modification of thulium sesquisulphide / [Range K. J., Gietl A, Klement U, Lange K. G.] // J. Less-Common Met. – 1990. – Vol. 158. – P.L21-L25.
- [35]. Tm_2S_3 -V a Corundum-Type Modification of Thulium Sesquisulfide / Range K. J., Drexler H., Gietl A. et al. // Acta Cryst. – 1990. – Vol. 46. – P.487-488.
- [36]. Кристаллическая структура Θ - Tm_2S_3 / [Кузьмичева Г. М., Смарина Е. И., Хлыстова С. Ю., Чернышев В. В.] // Журн. неорган. химии. – 1990. – Т. 35, Вып. 4. – С.869-873.
- [37]. Flahaut J. Structure cristalline des sulfures de lutécium et d'ytterbium Lu_2S_3 et Yb_2S_3 / J. Flahaut, L. Domange, M. P. Pardo // C. R. Acad. Sci. Paris. – 1964. – Т. 258. – P.594-596.
- [38]. Кузьмичева Г. М. Кристаллическая структура ε - Yb_2S_3 / Г. М. Кузьмичева, А. А. Елисеев // Журн. неорган. химии. – 1977. – Т. 22, Вып. 4. – С.897-900.
- [39]. Кузьмичева Г. М. Кристаллическая структура δ - Yb_2S_3 / Г. М. Кузьмичева, А. А. Елисеев // Журн. неорган. химии. – 1976. – Т. 21. – С.2838-2840.
- [40]. Schleid Th. Single crystals of F- Tm_2S_3 and T- Yb_2S_3 / Th. Schleid, F. Lissner // J. Alloys Compd. – 1992. – V. 189. – P.69-74.

- [41]. Range K. J. Die Kristallstruktur von Lu_2S_3 / K. J. Range, R. Leeb // Z. Naturforsch. – 1975. – Bd. B30. – S.637-638.
- [42]. Les sulfures, seleniures et tellures L_2X_3 de terres rares, d'yttrium et de scandium orthorhombiques du type Sc_2S_3 / [Flahaut J., Laruelle P., Pardo M. P., Guittard M.] // Inorg. Chem. – 1965. – № 4(7). – P.970-973.
- [43]. N₀ 206.- Les sulfures, sélénieurs et tellures L_2X_3 de terres rares, d'yttrium et de scandium orthorhombiques du type Sc_2S_3 / [Flahaut J., Laruelle P., Pardo M. P., Guittard M.] // Bull. Soc. Chim. Fr. – 1965. – № 1965. – P.1399-1404.
- [44]. Eatough N. L. High-Pressure Th_3P_4 -Type Polymorphs of Rare Earth Sesquiselenides / N. L. Eatough, Webb A. W., H. T. Hall // Inorg. Chem. – 1970. – Vol. 9. – P.417–418.
- [45]. Folchnandt M. Single Crystals of C- La_2Se_3 , C- Pr_2Se_3 , and C- Gd_2Se_3 with Cation-Deficient Th_3P_4 -Type Structure / M. Folchnandt, Th. Schleid // Z. Anorg. Allg. Chem. – 2001. – Vol. 627. – P.1411-1413.
- [46]. Folchnandt M. Über Sesquiselenide der Lanthanoide: Einkristalle von Ce_2Se_3 im C- Gd_2Se_3 im U- und Lu_2Se_3 im Z-Typ / M. Folchnandt, Ch. Schneck, Th. Schleid // Z. Anorg. Allg. Chem.– 2004. – V. 630. – P.149-155.
- [47]. Guittard M. Les seleniures L_2Se_3 et L_3Se_4 des elements des terres rares / M. Guittard, M. A. Benacerraf, J. Flahaut // Ann. Chim. – 1964. – T.9. – P. 25-34.
- [48]. Grundmeier T. Zur Polymorphie von Sm_2Se_3 / T. Grundmeier, W. Urland // Z. Anorg. Allg. Chemie. – 1995. – Vol. 621. – P.1977-1979.

- [49]. Елисеев А. А. Рентгенографическое исследование селенидов европия / А. А. Елисеев, О. С. Садовская, Ван Там Нгуен // Изв. АН СССР. Неорганич. материалы. – 1975. – Т. 11. – С.361-364.
- [50]. Grundmeier T. Zur Kristallstruktur von Tb_2Se_3 / T. Grundmeier, W. Urland // Z. Anorg. Allg. Chem. – 1997. – Vol. 623. – P.1744-1746.
- [51]. Demoncy P. Combinaisons des composés d'uranium UX et U_3X_4 ($X = S, Se, Te$) avec les sulfures, seleniures et tellurures de lanthanides, d'yttrium et de scandium / P. Demoncy, P. Khodadad // Ann. Chim. – 1970. – Т. 5. – P.341-356.
- [52]. Range K. J. Die Kristallstruktur von Dy_2Se_3 / K. J. Range, R. Leeb // Z. Naturforsch. – 1976. – Bd. B31. – S.685-686.
- [53]. Urland W. Zur Kristallstruktur von Ho_2Se_3 / W. Urland, P. Helmut // Z. Naturforsch. – 1998. – V. 53. – P.900-902.
- [54]. Range K. J. Crystal data for rare earth sesquiselenides Ln_2Se_3 ($Ln = Ho, Er, Tm, Yb, Lu$) and structure refinement of Er_2Se_3 / K. J. Range, C. Eglmeier // J. Less-Common Met. – 1991. – V. 171. – P.L27-L30.
- [55]. Synthesis and crystal structure of erbium sesquiselenide Er_2Se_3 / G.-C. Guo, J.-N. Zhuang, J.-T. Chen et al. // Jiegou Huaxue. – 1996. – Vol. 15. – P.243-245.
- [56]. Dismukes J. P. Rare Earth Sesquiselenides and Sesquitellurides with the Sc_2S_3 Structure / J. P. Dismukes, J. G. White // Inorg. Chem. – 1965. – Vol. 4. – P.970-973.
- [57]. Peters J. Silicon disulphide and silicon diselenide: A reinvestigation / J. Peters, B. Krebs // Acta Cryst. – 1982. – Vol. B38. – P.1270-1272.

- [58]. Prewitt C. T. Germanium and silicon disulfides: Structure and synthesis / C. T. Prewitt, H. S. Young // *Science*. – 1965. – Vol. 149. – P.535-537.
- [59]. Dittmar G. Die Kristallstruktur von L.T.-GeS₂ / G. Dittmar, H. Schäfer // *Acta Cryst.* – 1976. – Vol. 32. – P.1188-1192.
- [60]. Dittmar G. Die Kristallstruktur von H.T.-GeS₂ / G. Dittmar, H. Schäfer // *Acta Cryst.* – 1975. – Vol. 31. – P.2060-2064.
- [61]. Zachariasen W. H. The Crystal Structure of Germanium Disulphide / W. H. Zachariasen // *J. Chem. Phys.* – 1936. – Vol. 4. – P.618-619.
- [62]. Synthesis and Crystal Structure of δ -GeS₂, The First Germanium Sulfide with an Expanded Framework Structure / M. J. MacLachlan, S. Petrov, R. L. Bedard et al. // *Angew. Chem.* – 1998. – Vol. 37. – P.2075-2079.
- [63]. Arora S. K. Microtopographical Characterization of Vapour-grown SnS₂ Single Crystals / S. K. Arora, D. H. Patel, M. K. Agarwal // *Crystal Research and Technology*. – 1993. – Vol.28. – P.623-627.
- [64]. Popovic Z. V. Infrared and Raman spectra of germanium dichalcogenides-II: GeSe₂ / Z. V. Popovic, H. J. Stolz // *Physica Status Solidi, Sectio B: Basic Research* – 1981. – Vol. 108. – P.153.
- [65]. Shimizu Y. Germanium disulfide and diselenide: Phase diagram and polymorphs / Y. Shimizu, T. Kobayashi // *Kristallografiya*. – 1979. – V. 24. – P.83-87.
- [66]. Structural properties of GeSe₂ at high pressures / T. Grande, M. Ishii, M. Akaishi et al. // *J. Solid State Chem.* – 1999. – Vol. 145. – P.167-173.
- [67]. Structural Transformations in Three-Dimensional Crystalline GeSe₂ at

- High Pressures and High Temperatures / A. Grzechnik, S. Stølen, E. Bakken et al. // *J. Solid State Chem.* – 2000. – Vol. 150. – P.121-127.
- [68]. Liu Huifang. Phase relations in systems of tin chalcogenides / Huifang Liu, Chang L. Y. // *J. Alloys Compd.* – 1992. – Vol. 185(1). – P.183-190.
- [69]. Iglesias J. E. Ternary Chalcogenide compounds AB_2X_4 : The crystal structures of $SiPb_2S_4$ and $SiPb_2Se_4$ / J. E. Iglesias, H. Steinfink // *J. Solid State Chem.* – 1973. – Vol.6. – P.93-98.
- [70]. Susa K. Ternary sulfide compounds AB_2S_4 : The crystal structures of $GePb_2S_4$ and $SnBa_2S_4$ / K. Susa, H. Steinfink // *J. Solid State Chem.* – 1971. – V.3. – P.75-82.
- [71]. Structural studies of a cubic, high-temperature (α) polymorph of Pb_2GeS_4 and the isostructural $Pb_{2-x}Sn_xGeS_{4-y}$ *Sey* solid solution / K. M. Poduska, L. Cario, F. J. DiSalvo et al. // *J. Alloys Compd.* – 2002. – V.335. – P.105-110.
- [72]. Structure cristalline d'un thiogermanate de plomb a chaines infinies $(PbGeS_3)_n$ / [Ribes M., Olivier-Fourcade J., Philippot E., Maurin M.] // *Acta Cryst.* – 1974. – Vol.30. – P.1391-1395.
- [73]. Sur le systeme $SnS_2 - PbS$. Structure cristalline de $PbSnS_3$ / [Jumas J. C., Ribes M., Philippot E., Maurin M.] // *C. R. Seances Acad. Sci.* – 1972. – Vol.275. – P.269-272.
- [74]. Glass formation and properties of chalcogenide systems XII. The phase diagram of the system $PbSe - GeSe_2$ and on the compound Pb_2GeSe_4 / [Feltz A., Ludwig W., Senf L., Simon C.] // *Kristall und Technik.* – 1980. – Bd.15., №8. – S.895-901.

- [75]. Crystal structure of the Sc_2PbX_4 ($X = \text{S}$ and Se) compounds / V. Ya. Shemet, L. D. Gulay, Yu. Stepen' Damm et al. // *J. Alloys Compd.* – 2006. – Vol.407. – P.94-97.
- [76]. Gulay L. D. Crystal structure of the RE_2PbS_4 ($\text{RE} = \text{Y}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}$) compounds and a comparison with the crystal structures of other rare earth lead chalcogenides / L. D. Gulay, M. Daszkiewicz, V. Ya. Shemet // *Z. Anorg. Allg Chem.* – 2008. – Vol.634(11). – P.1887-1895.
- [77]. Patrie M. N° 655 - Systèmes $\text{L}_2\text{X}_3 - \text{PbX}$ ($\text{L} = \text{lanthanides}, \text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) / M. Patrie, M. Guittard, M. P. Pardo // *Bull. Soc. Chim. Fr.* – 1969. – P.3832-3834.
- [78]. Crystal structure of the R_2PbS_4 ($\text{R} = \text{Yb}$ and Lu) compounds / [Gulay L. D., Daszkiewicz M., Shemet V. Ya., Pietraszko A.] // *J. Alloys Compd.* – 2008. – Vol.453. – P.143-146.
- [79]. Crystal structure of the $\text{R}_6\text{Pb}_2\text{Se}_{11}$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Dy}$ and Ho) compounds / Gulay L. D., Shemet V. Ya., Stepen' Damm Yu. et al. // *J. Alloys Compd.* – 2005. – Vol.403. – P.206-210.
- [80]. Investigation of the $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Cu}_2\text{Se} - \text{PbSe}$ and $\text{Pr}_2\text{Se}_3 - \text{Ag}_2\text{Se} - \text{PbSe}$ systems / [Marchuk O. V., Gulay L. D., Shemet V. Ya., Olekseyuk I. D.] // *J. Alloys Compd.* – 2006. – Vol.416. – P.106-109.
- [81]. Синтез и свойства Ln_2PbSe_4 и $\text{Ln}_2\text{Pb}_4\text{Se}_7$ ($\text{Ln} - \text{Nd}, \text{Sm}$) / [Насибов И. О., Султанов Т. И., Шафагатова Г. Г., Мамедханова С. А.] // *Изв. АН СССР. Неорган. материалы.* – 1992. – Т. 28, № 7. – С.1572-1574.
- [82]. Investigation of the $\text{Ho}_2\text{Se}_3 - \text{Cu}_2\text{Se} - \text{PbSe}$ and $\text{Er}_2\text{Se}_3 - \text{Cu}_2\text{Se} - \text{PbSe}$ systems at 870 K / Gulay L. D., Olekseyuk I. D., Wolcyrz M.

- et al. // *J. Alloys Compd.* – 2006. – Vol.416. – P.173-178.
- [83]. Crystal structure of the R_2PbSe_4 ($R = Er$ and Yb) compounds / [Gulay L. D., Daszkiewicz M., Stepen' Damm Yu., Pietraszko A.] // *J. Alloys Compd.* – 2007. – Vol.429. – P.111-115.
- [84]. Investigation of the $Tm_2Se_3 - Cu_2Se - PbSe$ and $Lu_2Se_3 - Cu_2Se - PbSe$ systems at 870 K / [Gulay L. D., Wolcyrz M., Pietraszko A., Olekseyuk I. D.] // *Polish J. Chem.* – 2006. – V.80. – P.1703-1714.
- [85]. Michelet A. Chimie minerale. Sur de nouvelles familles de composés formes par les sulfures des terres rares avec le sulfure de germanium ou le sulfure de silicium / A. Michelet, J. Flahaut // *J. Solid State Chem.* – 1975. – Vol.13. – P.65-86.
- [86]. Личманюк О. С. Дослідження систем $Y_2S_3 - Cu_2S - SiS_2$ та $Y_2Se_3 - Cu_2Se - SiSe_2$ при 870 К / О. С. Личманюк, Л. Д. Гулай, І. Д. Олексеюк // *Науковий Вісник ВДУ, хім. науки.* – 2006. – №4. – С.118-124.
- [87]. Chimie minerale. Sur une nouvelle famille de combinaisons des terres rares de formules Ln_2SiS_5 ($Ln = La$ a Nd) et Ln_2GeS_5 ($Ln = La$) / [Michelet A., Perez G., Etienne J., Darriet-Duale M.] // *J. Solid State Chem.* – 1975. – Vol.13. – P.65-76.
- [88]. La_2SiS_5 / M. Daszkiewicz, L. D. Gulay, I. R. Ruda et al. // *Acta Cryst.* – 2007. – Vol. 63(12). – i197.
- [89]. Etude structurale des systèmes $Ln_2S_3 - GeS_2$ / A. Michelet, A. Mazurier, G. Collin et al. // *J. Solid State Chem.* – 1975. – Vol. 13. – P.65-76.
- [90]. Syntheses, structures and optical properties of yellow Ce_2SiS_5 , $Ce_6Si_4S_{17}$ and $Ce_4Si_3S_{12}$ materials / G. Gauthier, S. Jobic, M. Evain

- et al. // Chem. Mat. – 2003. – Vol.15. – P.828-837.
- [91]. Perez G. Chimie minerale. Sur une nouvelle famille de combinaisons sulfurees des terres rares de formule generale $\text{Ln}_4\text{Si}_3\text{S}_{12}$ ($\text{Ln} = \text{Ce-Gd}$) / G. Perez, M. Duale // C. R. Acad. Sci., Serie C. – 1969. – Vol.269. – P.984-986.
- [92]. The crystal structure of the $\text{R}_6\text{Si}_4\text{S}_{17}$ ($\text{R} = \text{Pr, Nd and Sm}$) compounds / [Gulay L. D., Daszkiewicz M., Lychmanyuk O. S., Pietraszko A.] // J. Alloys Compd. – 2008. – Vol.453. – P.197-202.
- [93]. Hatscher S. T. Synthesis, structure and magnetic behaviour of a new gadolinium thiosilicate: $\text{Gd}_4(\text{SiS}_4)_3$ / S. T. Hatscher, W. Urland // J. Solid State Chem. – 2003. – Vol.172. – P.417-423.
- [94]. Hatscher S. T. Kristallstruktur und magnetische Eigenschaften eines neuen Thiosilicats des Terbiiums: $\text{Tb}_4(\text{SiS}_4)_3$ / S. T. Hatscher, W. Urland // Z. Anorg. Allg. Chem. – 2002. – Vol.628. – P.1673-1677.
- [95]. Hatscher S. T. Dysprosium thiosilicate, $\text{Dy}_4(\text{SiS}_4)_3$ / S. T. Hatscher, W. Urland // Acta Cryst. – 2002. – Vol.58. – P.74-75.
- [96]. Investigation of the $\text{Ho}_2\text{X}_3 - \text{Cu}_2\text{X} - \text{ZX}_2$ ($\text{X} = \text{S, Se; Z} = \text{Si, Ge}$) systems / O. S. Lychmanyuk, L. D. Gulay, I. D. Olekseyuk et al. // Polish J. Chem. – 2007. – Vol.81 – P.353-367.
- [97]. Crystal structure and magnetic properties of the $\text{R}_6\text{Si}_4\text{Se}_{17}$ ($\text{R} = \text{La and Ce}$) compounds / [Marchuk O. V., Daszkiewicz M., Gulay L. D., Kaczorowski D.] // J. Alloys Compd. – 2012. – Vol.528. – P.99-102.
- [98]. Gulay L. D. Crystal structure of the $\text{R}_3\text{Si}_{1.25}\text{Se}_7$ ($\text{R} = \text{Pr, Nd and Sm}$) compounds / L. D. Gulay, O. S. Lychmanyuk // J. Alloys Compd. – 2008. – Vol.458. – P.174-177.
- [99]. Isothermal section of the $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{Cu}_2\text{S} - \text{GeS}_2$ system at 870 K and

- crystal structures of the $Y_3Ge_{1.25}S_7$ and Y_3CuGeS_7 compounds / L. D. Gulay, O. S. Lychmanyuk, Yu. Stepen' Damm et al. // *J. Alloys Compd.* – 2006. – Vol.414 – P.113-117.
- [100]. Syntheses and single-crystal structures of La_3AgSnS_7 , $Ln_3M_xMS_7$ (Ln = La, Ho, Er; M = Ge, Sn; $0,25 \leq x \leq 0,5$) / [Huiyi Zeng, Fakun Zheng, Cong Guo Guo, Jinshun Huang] // *J. Alloys Compd.* – 2008. – Vol.458. – P.123-129.
- [101]. Mazurier A. Structure cristalline de $LaGeS_5$ / A. Mazurier, J. Etienne // *Acta Cryst.* – 1973. – Vol.29. – P.817-821
- [102]. Mazurier A. Structure cristalline de La_4GeS_{12} / A. Mazurier, J. Etienne // *Acta Cryst.* – 1974. – Vol.30. – P.759-762.
- [103]. Michelet A. Chimie minerale. Sur une nouvelle famille de combinaisons sulfurees des terres rares, de formule generale $L_4Ge_3S_{12}$, avec L = La a Gd / A. Michelet, P. Laruelle, J. Flahaut // *C. R. Acad. Sci., Serie C.* – 1966. – Vol.262 – P.753-755.
- [104]. Choudhury A. Synthesis, structure, magnetic and optical properties of ternary thiogermanates: $Ln_4(GeS_4)_3$ (Ln – Ce, Nd) / A. Choudhury, P. K. Dorhout // *Z. Anorg. Allg. Chem.* – 2008. – Vol.634(4). – P.649-656.
- [105]. $Pr_4Ge_3S_{12}$: structure determination from high-resolution powder diffraction data / [Helmholdt R. B., Goubitz K., Sonneveld E. J., Schenk H.] // *Acta Cryst.* – 2003. – Vol. 59 – P.i119-i121.
- [106]. Bakakin V. V. Crystal structure of praseodymium thiogermanate / V. V. Bakakin, E. N. Ipatova, L. P. Solov'eva // *Zhurnal Strukturnoi Khimii.* – 1974. – Vol.15(3) – P.460-464.
- [107]. Loireau-Lozach A. M Systeme ternaire $La_2Se_3 - Ga_2Se_3 - GeSe_2$.

- Diagramme de phase – Etude des verres / A. M Loireau-Lozach, M. Guittard // *Mat. Res. Bull.* – 1977. – Vol.12. – P.887-893.
- [108]. Jaulmes S. Structure cristalline du sulfure d'étain et de lanthane La_2SnS_5 / S. Jaulmes // *Acta Cryst.* – 1974. – Vol.30. – P.2283-2285.
- [109]. Systemes $\text{Ln}_2\text{X}_3 - \text{SnX}_2$ (Ln = terres rares et X = S ou Se). Composes Ln_2SnS_5 , definition et etude structurale / [Guittard M., Julien-Pouzol M., Jaulmes S., Lavenant C.] // *Mat. Res. Bull.* – 1976. – Vol.11. – P.1073-1080.
- [110]. Daszkiewicz M. Crystal architecture of R_2SnS_5 (R = Pr, Nd, Gd and Tb): crystal relationships in chalcogenides / M. Daszkiewicz, L. D. Gulay, V. Ya. Shemet // *Acta Cryst.* – 2008. – Vol.64(2). – P.172-176.
- [111]. Julien-Pouzol M. Structure du pentasulfure de disamarium et d'étain / M. Julien-Pouzol, S. Jaulmes // *Acta Cryst.* – 1979. – Vol.35. – P.2672-2674.
- [112]. Sulfures ternaires d'euporium et d'étain, contenant l'euporium aux états de valence II et III / J. Flahaut, P. Laruelle, M. Guittard et al. // *J. Solid State Chem.* – 1979. – Vol.29 – P.125-136.
- [113]. Murguzov M. I. The $\text{SnSe} - \text{Ce}_2\text{Se}_3$ System / M. I. Murguzov, A. P. Gurshumov, B. Sh. Gadirov // *J. Inorg. Chem.* – 1986. – Vol.31(7). – P.1098-1100.
- [114]. Srinivasa R. B. Structural and elastic properties of sodium halides at high pressure / R. B. Srinivasa, S. P. Sanyal // *Physical Review., Condensed Matter.* – 1990. – Vol.42. – P.1810-1816.
- [115]. Bissert G. Verfeinerung der Struktur von Germanium(II)-sulfid, GeS / G. Bissert, K. F. Hesse // *Acta Cryst.* – 1978. – Vol.34. – P.1322-

1323.

- [116]. Cortona P. Direct determination of self-consistent total energies and and charge densities of solids: a study of the cohesive properties of the alkali halides / P. Cortona // *Physical Review*. – 1992. – Vol.46. – P.2008-2014.
- [117]. Helmholtz L. The crystal structure of the low temperature modification of thallos iodide. / L. Helmholtz // *Phase Transition*. – 1992. – Vol.38. – P.127-220.
- [118]. Rodier N. Structure du sulfure mixte d'yttrium et de scandium $YScS_3$ et de certains composés isotypes / N. Rodier, P. Laruelle // *C. R. Acad. Sci., Serie C*. – 1970. – Vol.270. – P.2127-2130.
- [119]. Magnetic propertie of the uranium sesquichalcogenides / Suski W., Wojakowski A., Blaise A. et al. // *J. of Magnetism and Magnetic Materials*. – 1976. – Vol.3. – P.195-200.
- [120]. Rasneur J. Determination des propriétés électrique et de la stoechiométrie de Y_2S_3 à haute température en fonction de la pression de soufre d'équilibre / J. Rasneur, C. Cauchemont // *C. R. Acad. Sci., Serie C*. – 1978. – *Вид.*21. – P.3208-3211.
- [121]. Le ferro- and antiferromagnetisme des composés d'uranium avec les éléments du Vème groupe / W. Trzebiatowski, T. Palewski, A. Sepichowska et al. // *J. of Nuclear Materials*. – 1967. – Vol.24. – P.74-79.
- [122]. Besancon P. Sur la variété alpha des sulfures de terres rares / P. Besancon, P. Laruelle // *C. R. Acad. Sci., Serie C*. – 1969. – Vol.48. – P.48-53.
- [123]. Range K. J. Darstellung und Kristallstruktur der Hochdruckphase

- $\text{Tm}_2\text{S}_3\text{-II}$ / K. J. Range, R. Leeb // Golden Book of Phase Transitions. – 2002. – Vol.1. – 123 p.
- [124]. Kondo S. Structural evolution of corundum at high temperatures / S. Kondo, K. Tateishi, N. Ishizawa // Jpn. J. Appl. Phys. – 2008. – Vol.47. – P.616-619.
- [125]. Klein H. The quality of precession electron diffraction data is higher than necessary for structure solution of unknown crystalline phases / H. Klein, J. David // Acta Cryst. – 2011. – Vol.67. – P.297-302.
- [126]. Oles A. Neutron diffraction study of UAs_2 / A. Oles // J. Phys. France – 1965. – Vol.26. – P.561-564.
- [127]. Oswald H. R. Zur Struktur der wasserfreien Zinkhalogenide. I. Die wasserfreien Zinkchloride / H. R. Oswald, H. Jaggi // Golden Book of Phase Transitions, Wroclaw. – 2002. – Vol.1. – P.1-123.
- [128]. Shimizu Y. Germanium disulfide and diselenide: Phase diagram and polymorphs / Y. Shimizu, T. Kobayashi // Reference unknown. – 1982. – Vol.21. – P.1-13.
- [129]. Chieh C. Crystal structure of anhydrous zinc bromide / C. Chieh, M. A. White // Zeitschrift fuer Kristallographie. – 1984. – Vol.166. – P.189-197.
- [130]. Synthesis and crystal structure of delta- (GeS_2) , the first germanium sulfide with an expanded framework structure / M. J. MacLachlan, S. Petrov, R. L. Bedard et al. // Angew. Chem. Int. ed. – 1998. – Vol.37(15). – P.2076-2079.
- [131]. Palosz B. Lattice parameters and spontaneous strain in AX_2 polytypes: CdI_2 , PbI_2 , SnS_2 and SnSe_2 / B. Palosz, E. Salje // J. Appl. Cryst. – 1989. – Vol.22. – P.622-623.

- [132]. Flux synthesis and isostructural relationship of cubic $\text{Na}_{1.5}\text{Pb}_{0.75}\text{PSe}_4$, $\text{Na}_{0.5}\text{Pb}_{1.75}\text{GeS}_4$ and $\text{Li}_{0.5}\text{Pb}_{1.75}\text{GeS}_4$ / J. A. Aitken, G. A. Marking, M. Evain et al. // *J. Solid State Chem.* – 2000. – Vol.153 – P.158-169.
- [133]. Brasseur H. The crystal structure of ammonium cadmium chloride, NH_4CdCl_3 / H. Brasseur, L. Pauling // *J. of the American Chemical Society.* – 1938. – Vol.60 – P.2886-2890.
- [134]. Structural and magnetic properties of the $(\text{Ca}_{1-x}\text{Na}_x)(\text{Fe}_{2-x}\text{Ti}_x)\text{O}_4$ solid solution ($0 \leq x \leq 1$) / S. Zouari, L. Ranno, A. Cheikhrouhou et al. // *J. Alloys Compd.* – 2008. – Vol.452. – P.234-240.
- [135]. Mazurier A. Structure cristalline de La_2GeS_5 / A. Mazurier, J. Etienne // *Acta Cryst.* – 1973. – Vol.29. – P.817-821.
- [136]. Mazurier A. Structure cristalline de $\text{La}_4\text{Ge}_3\text{S}_{12}$ / A. Mazurier, J. Etienne // *Acta Cryst.* – 1974. – Vol.30. – P.759-762.
- [137]. Potel M. Structure de U_2PbSe_5 / M. Potel, R. Brochu, J. Padiou // *Mat. Res. Bull.* – 1975. – Vol.10. – P.205-208.
- [138]. Фазові рівноваги та кристалічна структура сполук в квазіпотрійних системах $\text{Y}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn; X} - \text{S, Se}$) / [Руда І. П., Марчук О. В., Гулай Л. Д., Олексеюк І. Д.] // Матеріали IV Міжнародної наукової конференції “Релаксаційно-, нелінійно- та акустичнооптичні процеси, метеріали та методи їх отримання”. – Луцьк – Шацькі озера, 1-5 червня 2008 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2008. – С. 72-76.
- [139]. Фазові рівноваги в системах $\text{Y}_2\text{S}(\text{Se})_3 - \text{PbS}(\text{Se}) - \text{SiS}(\text{Se})_2$ при 770 К / [Марчук О. В., Руда І. П., Гулай Л. Д., Олексеюк І. Д.] // *Наук. вісн. ВНУ.* – № 13. – 2008. – С.24-27.
- [140]. Система $\text{La}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$ при 770 К / [Середя Л. В., Руда І. П.,

Марчук О. В., Гулай Л. Д.] // Матеріали III Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 13-14 травня 2009 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ імені Лесі Українки, 2009. Том. 2. – С.295-296.

[141]. Марчук О. В. Фазові рівноваги та кристалічна структура сполук в квазіпотрійних системах $\text{La}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{D}^{\text{IV}}\text{X}_2$ ($\text{D}^{\text{IV}} - \text{Si, Ge, Sn; X} - \text{S, Se}$) / О. В. Марчук, І. П. Руда, Л. Д. Гулай // Матеріали V Міжнародної наукової конференції “Релаксаційно-, нелінійно- та акустичнооптичні процеси, метеріали та методи їх отримання”. – Луцьк – Шацькі озера, 1-5 червня 2010 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2010. – С.146-149.

[142]. Марчук О. В. Фазові рівноваги у системах $\text{La}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{SiX}_2$ ($\text{X} - \text{S, Se}$) за температури 770 К / О. В. Марчук, Л. Д. Гулай // Наук. вісн. ВНУ, серія “Хімічні науки”. – № 17(242). – 2012. – С.93-97.

[143]. Фазові рівноваги у системі $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SiS}_2$ за температури 770 К / [Козлинець В. С., Марчук О. В., Олексюк І. Д., Гулай Л. Д.] // Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали: матеріали VII Міжнар. наук. конф. – Луцьк : Вежа – Друк, 2014. – С.153-157.

[144]. Система $\text{La}_2\text{Se}_3 - \text{PbSe} - \text{SiSe}_2$ при 770 К та кристалічна структура сполуки $\text{La}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$ / [Ходаковська Л. В., Руда І. П., Марчук О. В., Гулай Л. Д.] // Матеріали III Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 13-14 травня 2009 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки,

2009. Том. 2. – С.296-298.

- [145]. Марчук О. В. Фазові рівноваги в системі $PbS - GeS_2 - Pr_2S_3$ за температури 770 К / О. В. Марчук, Л. Д. Гулай, Н. М. Блашко // Матеріали VI Міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали”. – Луцьк – Шацькі озера, 25-29 травня 2012 р. – Луцьк: ПФ “Смарагд”, 2012. – С.158-160.
- [146]. Блашко Н. М. Система $Pr_2S_3 - PbS - GeS_2$ за температури 770 К / Н.М. Блашко, О. В. Марчук // Матеріали VI Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Молода наука Волині: пріоритети та перспективи досліджень” (14-15 травня 2012 року) : у 3 т. Т.3. – Волинський національний університет імені Лесі Українки, 2012. – С.115-116.
- [147]. Олексеюк І. Д. Системи $Sm(Er)_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ при температурі 770 К / І. Д. Олексеюк, Л. Д. Гулай, О. В. Марчук // Наук. вісн. ВНУ. – 2009. – № 24.– С.14-19.
- [148]. Марчук О. В. Системи $R_2X_3 - PbX - GeX_2$ (R – РЗМ, X – S, Se) за температури 770 К / О. В. Марчук, Л. Д. Гулай // XI Міжнародна конференція з кристалохімії інтерметалічних сполук. Тези конференції. Львів, 30 травня – 2 червня 2010 р. – Львів: ВЦ Львів. нац. ун-ту імені Івана Франка, 2010. – Р.51.
- [149]. Система $La_2Se_3 - PbSe - GeSe_2$ при 770 К / [Блашко Н. М., Руда І. П., Марчук О. В., Гулай Л. Д. // Матеріали IV Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 12-13 травня 2010 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки,

2010. Том. 2. – С.331-332.

- [150]. Фазові рівноваги в системах $\text{PbSe} - \text{Gd}(\text{Ho})_2\text{Se}_3 - \text{GeSe}_2$ за температури 770 К / [Марчук О., Олексеюк І., Гулай Л., Шемет В.] // Наук. вісн. СНУ, серія “Хімічні науки”. – № 20(297). – 2014. – С.30-35.
- [151]. Investigation of the $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ system at 770 К / [Marchuk O.V., Ruda I. P., Gulay L. D., Olekseyuk I. D.] // Polish J. Chem. – 2007. – Vol.81. – P. 425-432.
- [152]. Дослідження системи $\text{Y}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ при 770 К / [Руда І. П., Гулай Л. Д., Марчук О. В., Олексеюк І. Д.] // Матеріали І Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 18-19 квітня 2007 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2007. Том. 2. – С.26-27.
- [153]. Ізотермічний переріз системи $\text{Er}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ при 770 К / [Моружко А. С., Гулай Л. Д., Марчук О. В., Олексеюк І. Д.] // Матеріали І Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 18-19 квітня 2007 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2007. Том. 2. – С.145-146.
- [154]. Crystal structures of the $\text{R}_2\text{Pb}_3\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Y, Er and Tm) compounds / [Gulay L. D., Ruda I.P., Marchuk O.V., Olekseyuk I. D.] // J. Alloys Compd. – 2008. – Vol. 457. – P. 204-208.
- [155]. Системи $\text{Y}_2\text{X}_3 - \text{PbX} - \text{SnX}_2$ при 770 К / [Руда І. П., Марчук О. В., Гулай Л. Д., Олексеюк І. Д.] // Матеріали II

Міжнародної науково-практичної конференції студентів і аспірантів “Волинь очима молодих науковців: минуле, сучасне, майбутнє”. Луцьк, 16-17 квітня 2008 р. – Луцьк: РВВ “Вежа” ВНУ ім. Лесі Українки, 2008. Том. 2. – С.149-151.

[156]. Гулай Л. Д. Фазові рівноваги в системах $\text{Sm}(\text{Ho})_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ при температурі 770 К / Л. Д. Гулай, О. В. Марчук // Наук. вісн. ВНУ, серія “Хімічні науки”. – № 16. – 2010. – С.50-54.

[157]. Марчук О. В. Фазові рівноваги у системі $\text{PbS} - \text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{SnS}_2$ за температури 770 К / О. В. Марчук, Л. Д. Гулай, В. Я. Шемет / Міжвузівський збірник “Наукові нотатки”. – Випуск № 47. – 2014. – Луцьк: РВВ ЛНТУ, 2014. – С.99-102.

[158]. Марчук О. В. Система $\text{Pr}_2\text{S}_3 - \text{PbS} - \text{SnS}_2$ за температури 770 К / О. В. Марчук, В. Я. Шемет, Л. Д. Гулай // Хімічні проблеми сьогодення. Тези VIII Всеукраїнської наукової конференції студентів, аспірантів і молодих учених з міжнародною участю. – Донецьк, 17-20 березня 2014 р. – С.32.

[159]. Crystal structures and magnetic properties of $\text{R}_2\text{PbSi}_2\text{S}_8$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$), $\text{R}_2\text{PbSi}_2\text{Se}_8$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}$) and $\text{R}_2\text{PbGe}_2\text{S}_8$ ($\text{R} = \text{Ce}, \text{Pr}$) compounds / [Daszkiewicz M., Marchuk O. V., Gulay L. D. Kaczorowski D.] // J. Alloys Compd. – 2012. – Vol. 519 – P.85-91.

[160]. $\text{La}_2\text{Pb}(\text{SiS}_4)_2$ / [Gulay L. D., Daszkiewicz M., Ruda I. P., Marchuk O. V.] // Acta Cryst. – 2010. – Vol. 66, № 12. – i19-i21.

[161]. Кристалічна структура сполук $\text{R}_{1,32}\text{Pb}_{1,68}\text{Ge}_{1,67}\text{Se}_7$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ і Ho) / [Руда І. П., Марчук О. В., Гулай Л. Д., Олексеюк І. Д.] // Вісник ВДУ, серія “Хімічні науки”.

– № 13. – 2007. – C.7-12.

- [162]. $\text{Eu}_3(\text{AsS}_4)_2$ and $\text{A}_x\text{Eu}_{3-y}\text{As}_{5-z}\text{S}_{10}$ (A = Li, Na): Compounds with simple and complex thioarsenate building blocks / [Bera T. K., Iyer R. G., Malliakas C. D., Kanatzidis M. G.] // *Inorganic Chem.* – 2007. – № 46(21). – P.8466-8468.
- [163]. Crystal structure of $\text{R}_3\text{Ge}_{1+x}\text{Se}_7$ (R = La, Ce, Pr, Sm, Gd and Tb, $x = 0,43 - 0,49$) and magnetic properties of $\text{Ce}_3\text{Ge}_{1,47}\text{Se}_7$ / [Daszkiewicz M., Strok O. M., Gulay L. D., Kaczorowski D.] // *J. Alloys Compd.* – Vol.508. – 2010. – C.258-261.
- [164]. Jaulmes S. Structure cristalline du sulfure mixte d'euporium et d'etain $\text{Eu}_5\text{Sn}_3\text{S}_{12}$ / S. Jaulmes, M. Julien-Pouzol // *Acta Cryst.* – 1977. – Vol.33. – P.1191-1193.
- [165]. Jaulmes S. Sulfure d'euporium et d'etain $\text{Eu}_3\text{Sn}_2\text{S}_7$ / S. Jaulmes, M. Julien-Pouzol // *Acta Cryst.* – 1977. – Vol.33. – P.3898-3901.

Для нотаток

Для нотаток

Наукове видання

Марчук Олег Васильович
Гулай Любомир Дмитрович

Квазіпотрійні халькогенідні системи



(R – PЗМ; D^{IV} – Si, Ge, Sn; X – S, Se)

Монографія

Друкується в авторській редакції

Формат 60x84 ¹/₁₆. Обсяг 7,67 ум. друк. арк., 6,59 обл.-вид. арк.
Наклад 300 пр. Зам. 2. Видавець і виготовлювач – Вежа-Друк
(м. Луцьк, вул. Винниченка, 14, тел. (0332) 29-90-65).
Свідоцтво Держ. комітету телебачення та радіомовлення України
ДК № 4607 від 30.08.2013 р.