

КРИСТАЛОХІМІЧНІ ОСОБЛИВОСТІ СТРУКТУРНОГО ТИПУ $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$

Гулай Л.

Волинський національний університет імені Лесі Українки, Луцьк, Україна

E-mail: gulay.lyubomyr@vnu.edu.ua

Представниками структурного типу $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ є сполуки $\text{R}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ ($\text{R} = \text{La}, \text{Ce}, \text{Pr}$) [1]. У структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$, приймаючи групу атомів Ni_3 за окремий вузол, можна виділити сітки 3^6 , сформовані атомами La_2 , Pb_2 та Ni_3 , і сітки 6^3 , сформовані атомами La_1 та Pb_1 (рис. 1). Сітки 6^3 практично плоскі, а сітки 3^6 трохи деформовані. Сітки двох типів чергуються між собою вздовж напрямку Z .

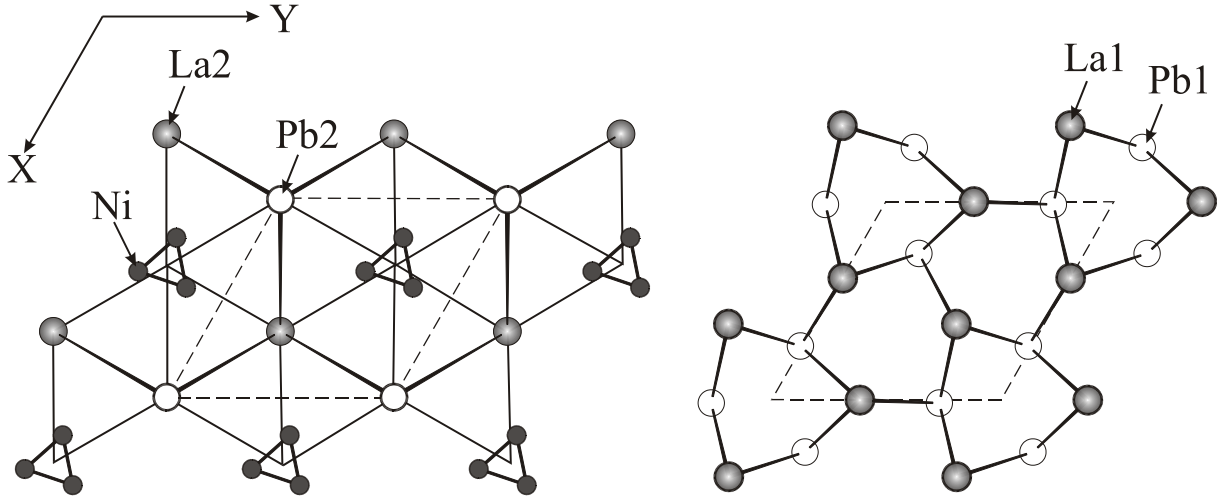


Рис. 1. Сітки 3^6 , сформовані атомами La_2 , Pb_2 та Ni_3 , і сітки 6^3 , сформовані атомами La_1 та Pb_1 у структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$.

У структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ можна виділити колони центрованих атомами La_2 і Pb_2 деформованих гексагональних аналогів кубооктаедрів (рис. 2).

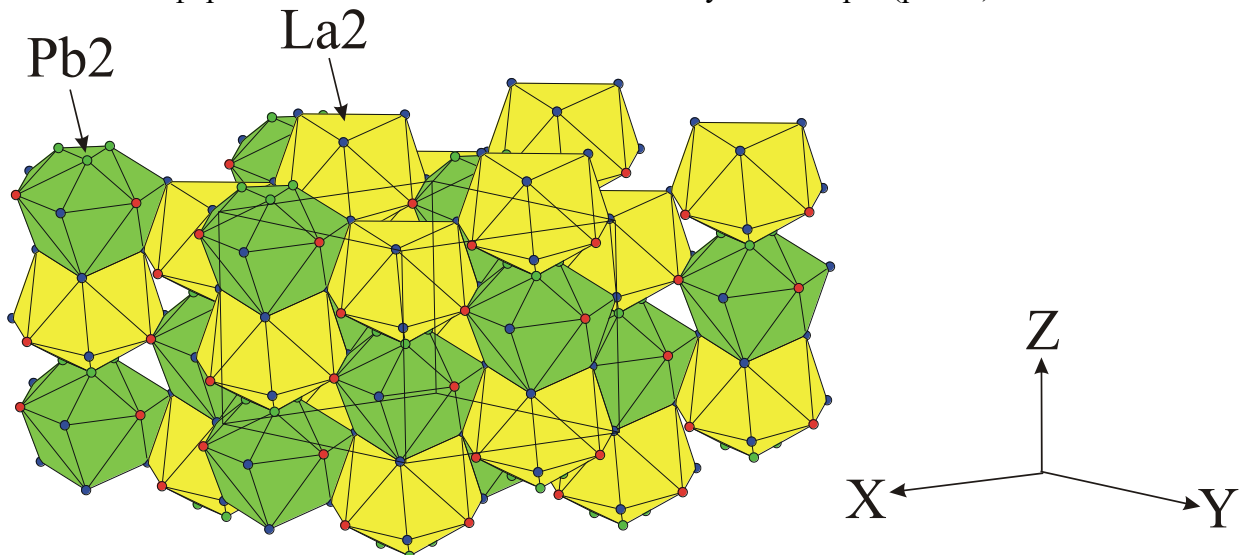


Рис. 2. Укладка колон центрованих атомами La_2 і Pb_2 гексагональних аналогів кубооктаедрів в структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$.

Кожен центрований атомами La_2 (Pb_2) многогранник оточений з трьох сторін трьома такими ж многогранниками, з'єднаними з центральним многогранником

ребрами, подібно як у структурі Mg (ПГ $R\bar{6}3/mmc$). Завдяки значній деформації цих многогранників, у порівнянні з ідеальними многогранниками структури Mg, оточення з трьох інших положень для центрального многогранника відрізняється від трьох попередніх.

У структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ можна виділити фрагмент комірки, сформований додаванням сіток 3^6 і 6^3 (рис. 3). Таких фрагментів є три в межах одного періоду c . Елементарну комірку сполуки $\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}$ (СТ $\text{Sm}_{12}\text{Ni}_6\text{In}$, ПГ $Im\bar{3}$) [2] можна розглянути як ромбоєдричну ($a = b = c = 0,97149$ нм, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) і подати її в гексагональних осях ($a_2 = b_2 = a_c \cdot \sqrt{2} = 1,37389$ нм, $c_2 = a_c \cdot \sqrt{3} = 1,68267$ нм, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$). В її структурі також можна виділити фрагмент комірки, подібно як і в структурі сполуки $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ (рис. 3). Таких фрагментів є шість в межах одного періоду c . На рис. 3 показано спільні фрагменти в структурах сполук $\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}$ та $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$. Між цими фрагментами існує різниця в сортах атомів та кількості атомів Ni.

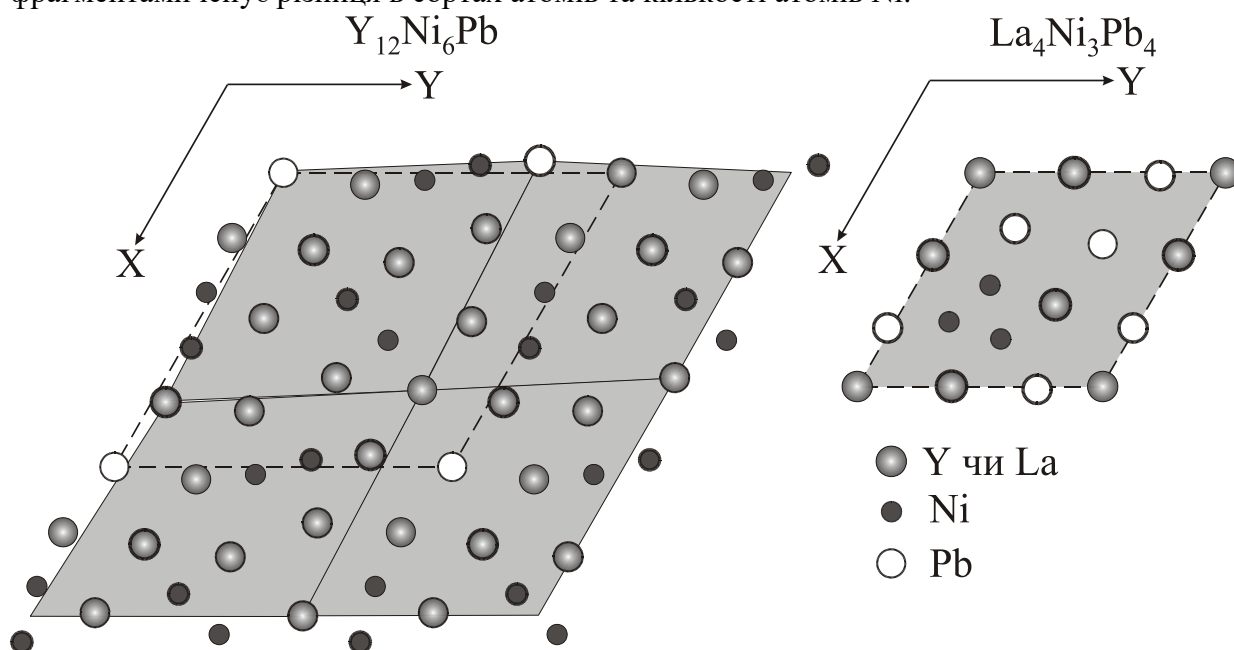


Рис. 3. Спільні фрагменти в структурах сполук $\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}$ та $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$.

Параметри комірки структури сполук $\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ і $\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}$ зв'язані між собою співвідношенням:

$$a(\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4) = a(\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}) \cdot \sqrt{2} \cdot 3/4,$$

$$c(\text{La}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4) = a(\text{Y}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}) \cdot \sqrt{3} / 2.$$

Література:

1. Gulay L.D. Investigation of the phase diagrams of the systems R-Ni-Pb (R = Y, La, Ce, Dy) and crystal structures of the compounds $\text{R}_4\text{Ni}_3\text{Pb}_4$ (R = La, Ce, Pr) and R_5NiPb_3 (R = Y, La, Ce, Pr, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu). *J. Alloys Compd.* 2005. Vol. 392. P. 165–172.
2. Gulay L.D., Kalychak Ya.M., Wolcyrz M., Łukaszewicz K. Crystal structure of $\text{R}_{12}\text{Ni}_6\text{Pb}$ (R = Y, La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho) and $\text{R}_{12}\text{Co}_6\text{Pb}$ (R = Y, La, Pr, Nd, Sm, Gd) compounds. *J. Alloys Compd.* 2000. Vol. 311. P. 238–240.