

## ДОСЛІДЖЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ СИЛІЦИДУ LaLiSi МЕТОДОМ ПОРОШКУ

Стецьків А.<sup>1</sup>, Павлюк В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Івано-Франківський національний медичний університет,  
м. Івано-Франківськ, Україна; andrijstetskiv69@gmail.com

<sup>2</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна.

Основними способами для одержання нових матеріалів з заданим комплексом фізико-хімічних властивостей залишаються: вивчення діаграм фазових рівноваг багатокомпонентних систем; встановлення кристалічної структури сполук, які утворюються в них; комплексне дослідження властивостей сплавів. Трьохкомпонентні системи складу РЗМ-Li-Si залишаються маловивченими. Тому назріла необхідність їх більш докладного вивчення з метою пошуку областей їх практичного використання.

Під час систематичного вивчення потрібної системи La-Li-Si при 400 °С в концентраційному інтервалі 30-100 ат. % Si було встановлено існування сполуки складу LaLiSi, результати дослідження якої наведено в даній роботі.

Для рентгенофазового аналізу було підготовано 34 подвійних і потрібних сплавів. Зразки масою 1 г синтезували методом електродугового плавлення шихти з компактних металів високої чистоти (Лантан з вмістом основного компоненту не менше 0,998 мас. частки, Літій – 0,9996 мас. частки, Силіцій – 0,9999 мас. частки). Приготовлену шихту із наважок чистих компонентів плавили в електродуговій печі з вольфрамовим електродом на мідному водоохолоджуваному поді в атмосфері очищеного аргону (99,998 об'ємних % Ar) під тиском 1,0 атм. Як гетер використовували губчастий титан. Одержані зразки відпалювали у вакуумованих кварцових ампулах при температурі 400 °С впродовж 480 годин. Відпалені сплави гартували в холодній воді, не розбиваючи ампул.

Фазовий аналіз синтезованих зразків проводили за масивами експериментальних даних дифракції рентгенівського випромінювання, одержаних за допомогою дифрактометру URD-6 (Cu K $\alpha$ -випромінювання). Для детальнішого вивчення кристалічної структури використовували масив даних, отриманих на дифрактометрі STOE STADI P (Cu K $\alpha$ -випромінювання). Щоб запобігти текстуруванню, зразки наносилися на поверхню кварцевої кювети у вигляді пасти з порошку сплаву, розтертого в індиферентній олії. Для усунення інструментальних помилок, що впливають на точність вимірів кутів відбиття на дифрактограмі, в досліджуваній сплав вводився внутрішній стандарт – порошок Силіцію ( $a_{Si} = 0,543107$  нм). Розрахунки та індексування порошкових дифрактограм проводилися з використанням програм LATCON [1] (уточнення періодів ґратки) і POWDER CELL-2.3 [2] (розрахунок теоретичних дифрактограм). Розрахунки для уточнення структури зразків проводилися за допомогою програм CSD [3] та FullProf 98 [4].

У результаті експериментальних досліджень цієї системи було підтверджено існування десяти бінарних фаз подвійних систем La-Si та Li-Si, а також тернарної фази

$\text{La}_2\text{Li}_2\text{Si}_3$ , яка була досліджена раніше [5, 6]. Встановлено існування нової тернарної сполуки  $\text{LaLiSi}$ , яка кристалізується в структурному типі  $\text{LaPtSi}$  та характеризується тетрагональною симетрією (просторова група  $I4_1md$ , символ Пірсона  $tI12$ , параметри комірки:  $a = 0,4186(2)$  нм,  $c = 1,4232(5)$  нм). При температурі відпалу в системі не виявлено розчинності третього компонента у бінарних фазах.

Таким чином, за допомогою методу порошку встановлено існування тернарної сполуки  $\text{LaLiSi}$ , яка кристалізується в структурному типі  $\text{LaPtSi}$ . Густина станів в області рівня Фермі свідчить про металічний тип зв'язку у дослідженій фазі.

#### Література:

1. Schwarzenbach D. Program LATCON: refine lattice parameters.- Lausanne: University of Lausanne, 1966.
2. Kraus W., Nolze G. PowderCell for Windows.- Berlin: Federal Institute for Materials Research and Testing, 1999.
3. Akselrud L.G., Grin Yu.N. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) // J. Fppl Crystallogr. – 2014. – Vol. 47. – P. 803-805.
4. Rodriguez-Carvajal J. FULLPROF: A Program for Rietveld Refinement and Pattern Matching Analysis, version 3.5d; Laboratoire Léon Brillouin (CEA–CNRS): Saclay, France, 1998.
5. Langer T.  $^7\text{Li}$  and  $^{29}\text{Si}$  solid state NMR and chemical bonding of  $\text{La}_2\text{Li}_2\text{Si}_3$ . / T. Langer, S. Dupke, H. Eckert, S.F. Matar. // Solid State Sciences. – 2012. – Vol. 14, Is. 3. – P. 367-374.
6. Merlo F. Structural and magnetic properties of the new  $\text{R}_2\text{Li}_2\text{Si}_3$  compounds (R = La, Ce, Pr, Nd, Sm). / F. Merlo, A. Palenzona, M. Pani, S.K. Dhar, R. Kulkarni. // Journal of Alloys and Compounds. – 2005. – Vol. 394, Issues 1–2. – P. 101-106.