

ХІМІЧНІ НАУКИ**Стецьків А.О.***кандидат хімічних наук, доцент,
завідувач кафедри,**Івано-Франківський національний медичний університет***ВИВЧЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ СТРУКТУР
СПОЛУК $Tm_{2,22}Co_6Sn_{20}$ ТА $TmLi_2Co_6Sn_{20}$**

Багатокомпонентні сполуки на основі рідкісноземельних металів (RE), перехідних (Т) металів (особливо Mn, Fe, Co і Ni) та олова і літію широко застосовуються в накопичувачах водню та металогідридних джерелах струму, а також для виготовлення магнітних матеріалів [1, 2]. Потрійні і тетрарні станіди в системах RE-Li-Sn і RE-Li-T-Sn [3-5] можуть бути використані в якості електродних матеріалів для літєвих батарей.

Під час систематичного дослідження фазових рівноваг в системі Tm-Li-Co-Sn в області, багатій оловом, було встановлено утворення сполук складу $Tm_{2,22}Co_6Sn_{20}$ та $TmLi_2Co_6Sn_{20}$, які кристалізуються у вигляді неупорядкованого варіанту бінарної кубічної структури типу $Cr_{23}C_6$.

Сплави виготовляли методом тигельного синтезу, використовуючи метали наступної чистоти: тулій – 0,9999, літій – 0,999, кобальт – 0,999, олово – 0,9999 масових часток основного компоненту. Наважки чистих металів були спресовані в таблетки, укладені в танталовий тигель і поміщені в піч з термопарою. Швидкість нагріву від кімнатної температури до 670 К складала 5 К в хвилину. При цій температурі сплави були витримані протягом 48 годин, а потім температура була збільшена з 670 до 1170 К протягом 4 годин. Тоді сплави піддавали відпалу при цій температурі протягом 12 годин і повільно охолоджували до кімнатної температури зі швидкістю 2 К в хвилину. Після плавлення і процедури відпалу склад зразків контролювався шляхом порівняння маси вихідних сумішей і утворених сплавів, загальна втрата ваги при цьому складала менше 2%.

Гомогенність і рівноважність підготованих зразків контролювали рентгенографічно. Фазовий аналіз проводили, використовуючи дифрактограми зразків, отримані на порошковому дифрактометрі STOE STADI P (CuK_{α} -випромінювання).

Розрахунки електронної структури для обох знайдених сполук були виконані на упорядкованому варіанті підкомірок B, які не містять будь-яких атомів, що взаємно виключають один одного за допомогою програмного пакету ТВ-LMTO-ASA [6].

Атоми Tm, Co і Li віддають свої електрони до атомів Sn, навколо яких і спостерігається значна локалізація електронів (рис. 1). Хоча можна помітити

присутність ковалентних гантелей Sn-Sn, проте, домінуючим типом зв'язку в цих сполуках є металічний.

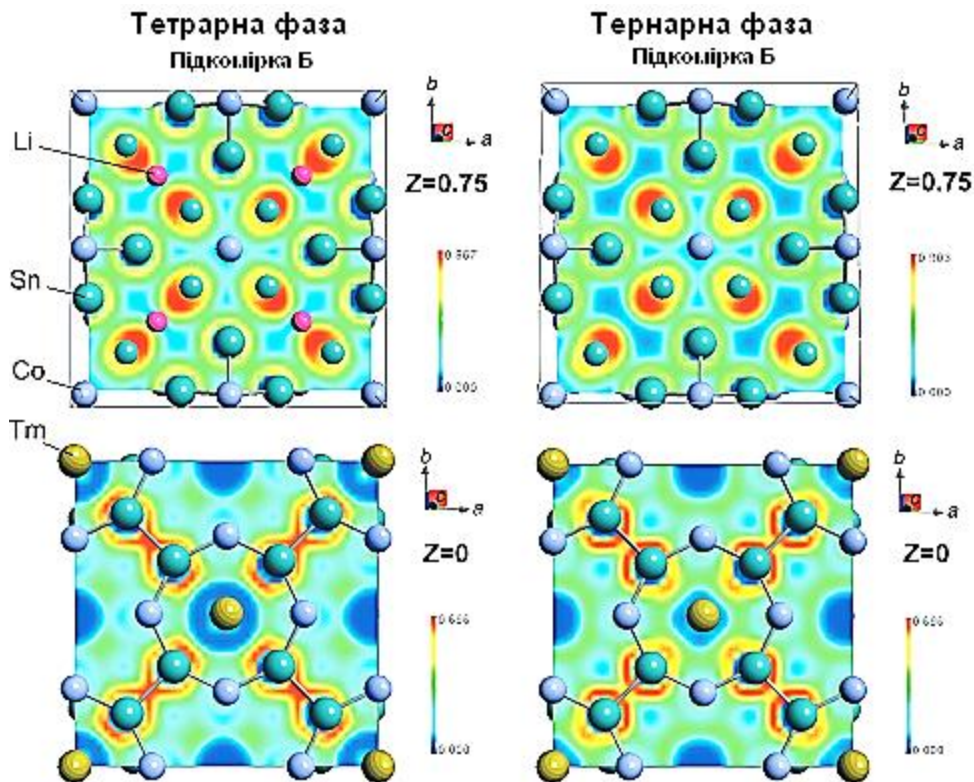


Рис. 1. Локалізація електронної густини (ELF) для тетравної та тернарної фаз $Tm_{2,2}Co_6Sn_{20}$ і $TmLi_2Co_6Sn_{20}$

Міжатомні відстані приймають допустимі для інтерметалічних сполук значення. Густина станів в області рівня Фермі також вказує на металічний тип зв'язку у досліджених фазах. Дещо вища густина електронних станів на рівні Фермі для потрійної фази у порівнянні з почетвірною вказує на більш металічну поведінку для тернарної сполуки.

Список використаних джерел:

1. Павлюк В.В., Бодак О.И., Печарский В.К., Сколоздра Р.В., Гладышевский Е.И. Новые тернарные станиды редкоземельных металлов и лития // Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1989. – Т. 25, № 7. – С. 1145–1148.
2. Gil A., Penc B., Wawrzynska E., Hernandez-Velasco J., Szytula A., Zygmunt A. Magnetic properties and magnetic structures of RCo_xSn_2 ($R=Gd-Er$) compounds // J. of Alloys and Compounds. (2004) V. 365, p. 31-34.
3. Павлюк В.В., Бодак О.И., Заводник В.Е. Кристаллическая структура соединений R_4LiGe_4 ($R=Y, Gd, Er, Tm, Lu$) // Докл. АН УССР. Серия Б. Геол., хим. и биол. науки. – 1990. – № 12. – С. 29-31.
4. Stetskiv A., Tarasiuk I., Misztal R., Pavlyuk V. Pentaterybium lithium tristannide Tb_3LiSn_3 // Acta Crystallographica. (2011). E67, i61.
5. Stetskiv A., Tarasiuk I., Rozdzyńska-Kielbik B., Oshchapovsky I., Pavlyuk V. Terbium (lithium zinc) distannide, $TbLi_{1-x}Zn_xSn_2$ ($x = 0.2$) // Acta Crystallographica. (2012). E68, i16.
6. Krier G., Jepsen O., Burkhardt A., Andersen O.K. The TBLMTO-ASA program, version 4.7 // Max-Planck-Institut für Festkörperforschung: Stuttgart, Germany, 2000.