

УДК 548.736.3

## МОНОКРИСТАЛЬНЕ УТОЧНЕННЯ СТРУКТУРИ СПОЛУКИ $\text{SmNi}_5$

М. Пустовойченко, М. Дзевенко, О. Жак

Львівський національний університет імені Івана Франка,  
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна,  
e-mail: pustovoychenko.mykola@gmail.com

Рентгеноструктурним методом монокристала (дифрактометр Xcalibur PX,  $\text{MoK}_\alpha$ -випромінювання) уточнено кристалічну структуру сполуки  $\text{SmNi}_5$ : структурний тип  $\text{CaCu}_5$ , символ Пірсона  $hP5$ , просторова група  $P6/mmm$ ,  $a = 0,49223(3)$  нм,  $c = 0,39639(2)$  нм,  $R = 0,0512$ ,  $R_w = 0,0519$ .

*Ключові слова:* Самарій, Нікель, кристалічна структура, метод монокристалу.

У системі Sm-Ni відома сполука  $\text{SmNi}_5$  зі структурою типу  $\text{CaCu}_5$  [1, 2]. Проте, згідно з літературними даними, детального дослідження кристалічної структури цієї сполуки раніше не виконували. Ми уточнили кристалічну структуру сполуки  $\text{SmNi}_5$  рентгеноструктурним методом монокристала.

Кристал у формі призми відібрали з подрібненого зразка складу  $\text{Sm}_{0,13}\text{Ni}_{0,81}\text{In}_{0,06}$ , синтезованого методом електродугового сплавляння компактних металів і гомогенізованого за температури 870 К протягом 720 год. Масив експериментальних інтенсивностей відбить отримано на автоматичному монокристалічному дифрактометрі Xcalibur PX ( $\text{MoK}_\alpha$ -випромінювання). Структуру визначено прямими методами за допомогою комплексу програм CSD [3] в просторовій групі  $P6/mmm$ :  $a = 0,49223(3)$  нм,  $c = 0,39639(2)$  нм, кількість незалежних відбить 122, кількість незалежних параметрів 9,  $R(F) = 0,0512$ ,  $R_w = 0,0519$ , фактор добротності по  $F^2$  становить 1,040. Параметри теплового зміщення усіх атомів уточнено в анізотропному наближенні. Уточнені параметри атомів у структурі сполуки  $\text{SmNi}_5$  наведено в таблиці.

Координати та параметри теплового зміщення ( $\times 10^2$ , нм<sup>2</sup>) атомів у структурі сполуки  $\text{SmNi}_5$

Атом	ПСТ	$x$	$y$	$z$	$B_{\text{екв}}$
Sm	1a	0	0	0	0,32(4)
Ni1	2c	2/3	1/3	0	0,30(6)
Ni2	3g	1/2	0	1/2	0,27(5)
Атом	$B_{11}$	$B_{22}$	$B_{33}$	$B_{12}$	
Sm	0,26(4)	0,26(4)	0,46(6)	0,13(2)	
Ni1	0,28(7)	0,28(7)	0,34(10)	0,14(4)	
Ni2	0,27(6)	0,14(8)	0,32(8)	0,09(9)	

$$B_{13} = B_{23} = 0.$$

Міжатомні віддалі у структурі сполуки  $\text{SmNi}_5$  добре узгоджуються із сумами атомних радіусів компонентів ( $r_{\text{Sm}} = 0,1802$  нм,  $r_{\text{Ni}} = 0,1246$  нм [4]). Найкоротші міжатомні віддалі такі:  $d_{\text{Ni}_1-\text{Ni}_2} = 0,24387(1)$  нм,  $d_{\text{Ni}_2-\text{Ni}_2} = 0,24611(1)$  нм.

Автори висловлюють вдячність проф. Т. Лісу та мол. наук. співроб. М. Січеку за допомогу в отриманні масиву експериментальних інтенсивностей відбиття зразка (Відділ кристалографії Вроцлавського університету, м. Вроцлав, Польща).

1. Nassau K., Cherry L.V., Wallace W.E. Intermetallic compounds between lanthanides and transition metals of the first long period I – preparation, existence and structural studies // J. Phys. Chem. Solids. 1960. Vol. 16. N 5. P. 123–130.
2. Pasturel A., Colinet C., Allibert C., Hicter P., Percheron-Guegan A., Achard J.C. Nickel samarium // Physica Status Solidi, B. 1984. Vol. 125. P. 101–106.
3. Aksel'rud L.G., Grin Yu.N., Pecharsky V.K., Zavalij P.Yu. CSD 97-Universal program package for single crystal and powder data treatment. Version N 7. 1997.
4. Wiberg N. Lehrbuch der anorganischen Chemie. Berlin; New York: W. Gruyter, 1995. S. 1838–1840.

#### SINGLE CRYSTAL INVESTIGATION OF THE $\text{SmNi}_5$ COMPOUND

**M. Pustovoychenko, M. Dzevenko, O. Zhak**

*Ivan Franko National University of Lviv,  
Kyryla & Mefodia Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine  
e-mail: pustovoychenko.mykola@gmail.com*

Crystal structure of the  $\text{SmNi}_5$  compound has been reinvestigated by means of X-ray single crystal method (Xcalibur PX diffractometer,  $\text{MoK}_\alpha$ -radiation):  $\text{CaCu}_5$ -type structure, Pearson symbol  $hP5$ , space group  $P6/mmm$ ,  $a = 0.49223(3)$  nm,  $c = 0.39639(2)$  nm.

*Key words:* samarium, nickel, crystal structure, single crystal method.

#### МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЯ $\text{SmNi}_5$

**Н. Пустовойченко, М. Дзевенко, О. Жак**

*Львовский национальный университет имени Ивана Франко,  
ул. Кирилла и Мефодия 6, 79005 Львов, Украина  
e-mail: pustovoychenko.mykola@gmail.com*

Кристаллическую структуру соединения  $\text{SmNi}_5$  повторно уточнили рентгеноструктурным методом монокристалла: дифрактометр Xcalibur PX,  $\text{MoK}_\alpha$ -излучение, структурный тип  $\text{CaCu}_5$ , символ Пирсона  $hP5$ , пространственная группа  $P6/mmm$ ,  $a = 0,49223(3)$  нм,  $c = 0,39639(2)$  нм.

*Ключевые слова:* самарий, никель, кристаллическая структура, метод монокристалла.

Стаття надійшла до редколегії 24.10.2011

Прийнята до друку 21.12.2011