КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 548.736.4

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА СОЕДИНЕНИЯ $LiCa_6Ge$

© 1993 г. В. В. Павлюк, Г. С. Дмытрив, О. И. Бодак

Львовский государственный университет им. И. Франко

Поступила в редакцию 15.07.92 г.

В процессе исследования фазовых равновесий при 470 K в системе Li–Ca–Ge обнаружено соединение приблизительного состава $Li_{0.15}Ca_{0.70}Ge_{0.15}$.

Сплавы синтезировали в электродуговой печи в атмосфере очищенного аргона путем сплавления шихты, состоящей из навесок компонентов чистотой: Ca – 0.994, Ge – 0.9999 и Li – 0.982. Гомогенизирующий отжиг проводили в танталовых контейнерах при 470 K в течение 300 ч. Сплавы хранили под слоем очищенного и обезвоженного масла.

Дебаеграмму этого соединения индицировали в кубической сингонии с периодом решетки a = = 0.94 нм. Кристаллическую структуру $LiCa_6Ge$ определяли методом порошка. Дифрактограмма (табл. 1) получена на дифрактометре ДРОН-3 с использованием CuK_α-излучения.

Период решетки для $LiCa_6Ge$, уточненный МНК по угловым значениям максимумов дифрактограммы, составил a = 0.9419 (3) нм.

Значения периода решетки, возможная пр. гр. – $Fm\bar{3}m$, а также состав дают основания отнести это соединение к структурному типу Ca_7Ge [11]. В предположении этой модели и выполнена расшифровка структуры.

Все расчеты, связанные с расшифровкой и уточнением структуры указанного соединения, выполнены на ПК "Электроника МС-0585" с помощью комплекса программ CSD [2].

Структура расшифрована в пр. гр. $Fm\bar{3}m$. Окончательно параметры всех атомов уточнены в изотропном приближении до R = 0.080 (для 37 рефлексов) и приведены в табл. 2. В результате уточнения структуры установлено, что атомы лития полностью занимают позицию 4(b), которая в исходной структуре Ca_7Ge занята атомами кальция.

Межатомные расстояния имеют допустимые для интерметаллических соединений значения и

Таблица 1. Дифрактограмма соединения $LiCa_6Ge$

hkl	$d_{эксп}$, Å	$d_{расч}$, Å	$I_{эксп}$, отн. ед.	$I_{расч}$, отн. ед.	hkl	$d_{эксп}$, Å	$d_{расч}$, Å	$I_{эксп}$, отн. ед.	$I_{расч}$, отн. ед.
111	5.435	5.438	200	253	155	1.3187	1.3189	14	9
002	4.706	4.709	1	4	117		1.3189		9
022	3.331	3.330	2	2	046	–	1.3061	–	0
113	2.8397	2.8399	147	134	246	–	1.2587	–	0
222	2.7194	2.7190	999	973	355	1.2266	1.2262	25	8
004	2.3549	2.3547	442	452	137		1.2262		16
133	2.1604	2.1608	68	55	008	1.1775	1.1774	36	43
024	2.1061	2.1062	1	1	337	1.1507	1.1507	5	7
224	–	1.9227	–	0	446	–	1.1422	–	0
115	1.8129	1.8127	41	29	028	–	1.1422	–	0
333		1.8127		9	228	–	1.1100	–	0
044	1.6651	1.6650	208	244	066	–	1.1100	–	0
135	1.5925	1.5921	42	35	157	1.0879	1.0876	31	15
244	–	1.5698	–	0	555		1.0876		2
006	–	1.5698	–	0	266	1.0805	1.0804	188	183
026	–	1.4893	–	0	048	1.0533	1.0531	210	197
335	1.4364	1.4364	10	12	119	1.0340	1.0339	21	9
226	1.4197	1.4199	252	268	357		1.0339		18
444	1.3593	1.3595	70	77					