

**АНИЗОТРОПНЫЕ ДЕФОРМАЦИИ РЕШЕТКИ
ПРИ АНИОННОМ ЗАМЕЩЕНИИ В СИСТЕМЕ $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$**

Акрамов Д.Ф.⁽¹⁾, Селезнева Н.В.⁽¹⁾, Баранов Н.В.^(1,2)

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620026, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт физики металлов УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, д. 18

Халькогениды переходных металлов уже долгое время привлекают внимание исследователей из-за их уникальных свойств и огромного потенциала для практического применения. Например, активно исследуются халькогениды кобальта в качестве заменителя дорогостоящих электрокатализаторов на основе благородных металлов, используемые для осуществления реакции выделения водорода или кислорода. Было показано, что на каталитическую активность значительное влияние оказывают искажения в геометрии окружения атома кобальта. Однако, причины высокой каталитической активности атомов кобальта в халькогенидах пока что недостаточно изучены. Перспективными в этом направлении являются халькогениды кобальта со стехиометрией 7 : 8, кристаллизующиеся в структурном типе NiAs. Обнаружены значительные анизотропные деформации элементарной ячейки при замещение селена серой в системе $\text{Co}_7(\text{S}_{1-y}\text{Se}_y)_8$. В литературе отсутствуют результаты исследований влияния замещения селена теллуrom $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ на кристаллическую структуру.

Поликристаллические образцы $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ были получены методом твердофазного ампульного синтеза закалкой от $T = 1000$ °C. Рентгенографическая аттестация осуществлялась на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE.

Рентгенографическая аттестация показала, что все соединения системы $\text{Co}_7(\text{Se}_{1-y}\text{Te}_y)_8$ однофазны и кристаллизуются в гексагональной сингонии. В соединении Co_7Se_8 наблюдается 3С сверхструктурное упорядочение катионных вакансий, что согласуется с литературными данными. Однако, замещение селена теллуrom приводит к разупорядочению катионных вакансий. Анализ рентгенограмм показал, что замещение в анионной подрешетке сопровождается сменой пространственных групп от $P3_121$ в Co_7Se_8 к $P6_3/mmc$ для соединений с концентрацией теллура $x \geq 0,9$ и Co_7Te_8 кристаллизуется с пространственной группой $P-3m1$. Установлено, что с ростом концентрации теллура происходит анизотропное увеличение параметров элементарной ячейки. Так при $x = 8$ параметр a увеличивается на ~ 8 %, а параметр c только на ~ 2 %. Стоит отметить, что осевое отношение c/a уменьшается на ~ 6 % и составляет 1,38 для Co_7Te_8 , что далеко от идеального значения для гексагональных структур 1,63. Такое поведение c/a говорит о увеличении деформации анионных октаэдров с ростом концентрации теллура.

Работа подготовлена при финансовой поддержке ППК 3.1.1.1.2-20.