

# КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА, ШИРИНА ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ СОЕДИНЕНИЯ $\text{SrNdCuSe}_3$

*Остапчук Е.А., Григорьев М.В., Коровина Е.Е., Русейкина А.В.*

Тюменский государственный университет  
625003, г. Тюмень, ул. Володарского, д. 6

Соединение  $\text{SrNdCuSe}_3$  кристаллизуется в орторомбической сингонии, пространственная группа  $Pnma$ , структурный тип  $\text{Eu}_2\text{CuS}_3$  с параметрами элементарной ячейки  $a = 10,8987(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 4,1493(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 13,4717(3) \text{ \AA}$ . Кристаллическую структуру по данным порошковой рентгеновской дифракции уточняли методом Ритвелда с помощью TOPAS 4.2 с факторами достоверности  $R_{\text{wp}} = 5,60$ ;  $R_p = 4,27$ ;  $R_B = 1,38$ ;  $\chi^2 = 0,48$ . Кроме основной фазы  $\text{SrNdCuSe}_3$  образец содержал 3.8 %  $\text{SrSe}$ . Координаты атомов и тепловые параметры приведены в табл. 1, длины связей в табл. 2.

**Таблица 1. Координаты атомов и изотропные тепловые параметры  $\text{SrNdCuSe}_3$**

| Атом | $x/a$       | $y/b$ | $z/c$       | $B_{\text{iso}} (\text{\AA}^2)$ |
|------|-------------|-------|-------------|---------------------------------|
| Sr   | 0,77974(23) | 0,25  | 0,50004(21) | 1,207(86)                       |
| Nd   | 0,48420(16) | 0,75  | 0,74339     | 1,368(80)                       |
| Cu   | 0,73416(40) | 0,25  | 0,77919(27) | 1,20(12)                        |
| Se1  | 0,90498(27) | 0,25  | 0,90113(24) | 0,702(93)                       |
| Se2  | 0,55143(25) | 0,25  | 0,88274(23) | 0,621(94)                       |
| Se3  | 0,73904(28) | 0,75  | 0,67151(21) | 0,655(88)                       |

**Таблица 2. Длины связей в кристаллической структуре  $\text{SrNdCuSe}_3$**

| Sr–Se                 | $d (\text{\AA})$ | Nd–Se                 | $d (\text{\AA})$ | Cu–Se               | $d (\text{\AA})$ |
|-----------------------|------------------|-----------------------|------------------|---------------------|------------------|
| Sr–Se3 <sup>i</sup>   | 3,136(3)         | Nd–Se3 <sup>v</sup>   | 2,908(3)         | Cu–Se2              | 2,432(5)         |
| Sr–Se3                | 3,136(3)         | Nd–Se2                | 2,892(2)         | Cu–Se1              | 2,483(5)         |
| Sr–Se2 <sup>ii</sup>  | 3,183(3)         | Nd–Se2 <sup>vi</sup>  | 2,916(2)         | Cu–Se3              | 2,532(3)         |
| Sr–Se2 <sup>iii</sup> | 3,183(3)         | Nd–Se3                | 2,941(3)         | Cu–Se3 <sup>i</sup> | 2,532(3)         |
| Sr–Se1 <sup>ii</sup>  | 3,192(3)         | Nd–Se1 <sup>v</sup>   | 2,973(2)         |                     |                  |
| Sr–Se1 <sup>iii</sup> | 3,192(3)         | Nd–Se1 <sup>vii</sup> | 2,973(2)         |                     |                  |
| Sr–Se2 <sup>iv</sup>  | 3,356(4)         |                       |                  |                     |                  |

Симметрические операции: (i)  $x, y-1, z$ ; (ii)  $-x+3/2, -y+1, z-1/2$ ; (iii)  $-x+3/2, -y, z-1/2$ ; (iv)  $x+1/2, -y+1/2, -z+3/2$ ; (v)  $x-1/2, -y+3/2, -z+3/2$ ; (vi)  $x, y+1, z$ ; (vii)  $x-1/2, -y+1/2, -z+3/2$

Спектры диффузного отражения регистрировали на спектрофотометре UV-2600, оснащённом приставкой ISR-2600Plus с фотоумножителем типа R-928 и InGaAs-детектором. Экспериментальное значение прямой запрещённой зоны для соединения  $\text{SrNdCuSe}_3$  было получено из модифицированной функции Кубелки – Мунка и составило 1,90 эВ.