

## OKREŚLANIE LOKALNEGO OTOCZENIA WOKÓŁ WYBRANYCH ATOMÓW W NOWYCH WODORKACH FAZ LAVESA

**K. Lawniczak-Jablonska**<sup>1\*</sup>, **M.T. Klepka**<sup>1</sup>, **A. Wolska**<sup>1</sup>, **S. Filipek**<sup>2</sup>, and **R. Sato**<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instytut Fizyki PAN, al. Lotników 32/46, 02-668 Warszawa, Polska

<sup>2</sup>Instytut Chemii Fizycznej PAN, ul. Kasprzaka 44/52, 01 224 Warszawa, Polska

Słowa kluczowe: fazy Laves'a, absorpcja rentgenowska, wiązanie chemiczne

\*) e-mail: jablo@ifpan.edu.pl

Absorpcja rentgenowska jest unikatową techniką, która pozwala wyznaczyć położenie atomów danego pierwiastka w sieci krystalicznej, określić jego wiązanie chemiczne oraz zmiany wprowadzone poprzez różnego rodzaju procedury (np. wygrzewanie, wprowadzenie wodoru, czy domieszkowanie). Technika ta jest więc doskonałym narzędziem do badania nowych materiałów. W niniejszej pracy zastosowano tą metodę do badania nowych wodorków faz Lavesa.

Fazy Lavesa są grupą międzymetalicznych związków, które poza bardzo interesującymi własnościami fizycznymi i chemicznymi są uważane za ważne materiały w kontekście poszukiwania nośników wodoru dla energetyki wodorowej, w której wodór miałby zastąpić konwencjonalne źródła energii. Zainteresowanie nimi związane jest więc również z rozwojem energetyki wodorowej. Udało się ostatnio zsyntezować stosując technikę wysokich ciśnień szereg nowych wodorków faz Lavesa. Wodorki te są stabilne i mogą być przechowywane przez długi czas w warunkach normalnego ciśnienia i temperatury [1]. Pośród nowo zsyntezowanych materiałów najbardziej interesująca wydaje się grupa deuterków opisana wzorem chemicznym  $RMn_2D_6$  (gdzie  $R = Y$  lub  $Dy$  oraz pseudobinarne związki, w których Mn jest częściowo zastąpiony przez Fe lub Cr). Materiały takie udało się po raz pierwszy wytworzyć ze związków Lavesa. Ich własności fizyczne i chemiczne są intensywnie badane, ale położenie atomów Fe i Cr w sieci krystalicznej nie zostało do tej pory jednoznacznie wyznaczone [2].

Pomiary krawędzi absorpcji K Mn, Fe i Cr przeprowadzono w HASYLAB na stacji E4 w zakresie bliskim krawędzi (XANES z ang. X-ray Absorption Near Edge Structure) i dla rozciągłej struktury (EXAFS z ang. Extended X-ray Absorption Fine Structure). W celu dokonania analizy tych widm przeprowadzono obliczenia widma XANES dla różnych położeń atomów Mn, Fe i Cr w sieci krystalicznej tych związków korzystając z programu FEFF8.4. Widma teoretyczne zostały następnie porównane z widmami eksperymentalnymi. Pozwoliło to stwierdzić, który z modeli jest najbliższy rzeczywistości

rozmeszczeniu atomów w sieci. Rozważono również możliwość występowania danego pierwiastka w więcej niż jednym położeniu w sieci.

Do analizy widm EXAFS zastosowano programy Artemis i Athena z pakietu IFEFIT. Związki podwójne były wykorzystane jako materiały referencyjne o znanej strukturze. Określono zmiany w wiązaniu chemicznym wprowadzone przez obecność wodoru lub deuteru w strukturze faz Lavesa oraz wpływ drugiego metalu przejściowego o dobrze zlokalizowanych stanach d (tutaj Fe lub Cr). Wyznaczono również położenie atomów Mn, Fe i Cr w sieci krystalicznej tych materiałów. Pozwoliło to zweryfikować istniejące modele teoretyczne oraz wnioski z neutronowych i rentgenowskich badań dyfrakcyjnych [3]. Po wyznaczeniu właściwego położenia metali przejściowych w sieci krystalicznej tych materiałów obliczono strukturę elektronową wokół każdego z metali i przedyskutowano ją w kontekście własności fizyko-chemicznych.

**Podziękowania:** Badania zostały dofinansowane jako wspólne badania sieci naukowej "Nowe Materiały - wytwarzanie i badania strukturalne" przez MNiSW oraz z programu Unii Europejskiej w ramach projektu RII3-CT-2004-506008 (IASFS).

### Literatura

- [1] V. Paul-Boncour, S.M. Filipek, M. Dorogova, F. Bourée, G. André, I. Marchuk, A. Percheron-Guégan, R.S. Liu, "Neutron diffraction study, magnetic properties and thermal stability of  $YMn_2D_6$  synthesized under high deuterium pressure", *J. Sol. State Chem.* **178** (2005) 356–362.
- [2] S.M. Filipek, H. Sugiura, V. Paul-Boncour, R. Wierzbicki, R.S. Liu, N. Bagkar, "Studies of Novel Deuterides  $RMn_2D_6$  (R – Rare Earth) compressed in DAC up to 30 GPa", *J. Phys.: Conf. Ser.* **121** (2008) 022001.
- [3] V. Paul-Boncour, S.M. Filipek, I. Marchuk, G. André, F. Bourée, G. Wiesinger, A. Percheron-Guégan, "Structural and magnetic properties of  $ErFe_2D_5$  studied by neutron diffraction and Mössbauer spectroscopy", *J. Phys.: Cond. Matt.* **15** (2003) 4349–4359.