

М.Б. Коник, Л.П. Ромака, В.В. Ромака, Р.Я. Серкіз

## Взаємодія компонентів у потрійній системі Er–Mn–Ge при 870 К

Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна  
Національний університет “Львівська політехніка”, вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна  
*E-mail: m\_konyk@franko.lviv.ua*

Методами рентгенофазового аналізу та скануючої електронної мікроскопії побудовано ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Er–Mn–Ge при 870 К. При температурі дослідження у системі утворюються чотири тернарні сполуки: ErMn<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub> (CT HfFe<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub>, ПГ Р6/mmm), ErMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> (CT CeGa<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>, ПГ I4/mmm), ErMn<sub>1-x</sub>Ge<sub>2</sub> (CT CeNiSi<sub>2</sub>, ПГ Cmcm), ErMnGe (CT TiNiSi, ПГ Pnma). Для германіду ErMn<sub>1-x</sub>Ge<sub>2</sub> визначено область гомогенності ( $x = 0,68 - 0,61$ ,  $a = 0,4081(7)-0,4084(2)$ ,  $b = 1,5628(2)-1,5641(9)$ ,  $c = 0,3966(7)-0,3974$  нм), досліджено електротранспортні властивості в інтервалі температур 80 – 380 К, магнітну сприйнятливість (290 – 870 К) та визначено планарний напрямок осі легкого намагнічування (ВЛН). Розрахунки електронної структури сполуки ErMnGe із застосуванням методу CPMD показали, що даний германід є типовим металом.

**Ключові слова:** потрійна система, кристалічна структура, термо-ерс., питомий електроопір, вісь легкого намагнічування, електронна структура

*Стаття поступила до редакції 24.10.2011; прийнята до друку 15.06.2012.*

### Вступ

Інтерметаліди рідкісноземельних металів (РЗМ) викликають особливу увагу науковців як основа для пошуку і створення нових перспективних магнітних матеріалів. Зокрема, широко вивчаються магнітні властивості сполук, що містять як рідкісноземельні 4f-метали, так і 3d-елементи (Mn, Fe, Co, Ni, Cu). Дослідження взаємодії компонентів у потрійних системах і побудова відповідних діаграм фазових рівноваг є важливим кроком для встановлення стабільності проміжних фаз, концентраційних та температурних меж їх існування, а також впливу структурного фактору та методів синтезу.

Потрійні системи РЗМ–Mn–Ge, на відміну від споріднених систем з Ферумом, Кобальтом, Ніколом, вивчені значно менше. Повністю досліджені діаграми фазових рівноваг для систем з Ce, Nd, Gd, Tb, Yb [1 - 3]. В літературі також повідомляється про вивчення серій ізоструктурних інтерметалідів складів RMnxGe<sub>2</sub> [4], RMnGe [5], RMn<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub> [6], RMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> [7], серед яких є чотири сполуки Ербію: ErMn<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub>, ErMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>, ErMn<sub>0,27</sub>Ge<sub>2</sub>, ErMnGe. Сплави і сполуки на основі рідкісноземельних металів за участю переходних металів та германію представляють значний інтерес з точки зору дослідження їх магнітних властивостей [8, 9]. Низка праць присвячена вивченю фізичних властивостей

германідів РЗМ і мангану [10 - 14]. Для сполук ізоструктурного ряду RMn<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub> (R = Sc, Y, Tb - Lu) характерне антиферомагнітне впорядкування за винятком германідів неодиму, самарію та гадолінію, які виявляють феримагнітні властивості [12].

Результати дослідження магнітних властивостей сполуки Ce<sub>2</sub>MnGe<sub>6</sub> вказують, що вона є феримагнетиком з точкою Кюрі TC = 150 K [13]. Аналіз температурних залежностей питомої магнітної сприйнятливості та намагніченості сполуки La<sub>2</sub>MnGe<sub>5,58</sub> свідчить про наявність переходу типу “магнітний порядок - безпорядок” з температурою феромагнітного впорядкування 176 K [14]. В обох сполуках простежується впорядкування магнітних моментів Мангану, який робить значний внесок у магнетизм цих германідів. Підтвердженням цього є результати дослідження магнітних властивостей германіду Ce<sub>2</sub>CuGe<sub>6</sub> [15], а також сполук R<sub>2</sub>CuGe<sub>6</sub> (R = Gd, Tb, Dy, Er) [9], які впорядковуються антиферомагнітно за низьких температур і магнітні моменти яких визначаються лише атомами рідкісноземельного металу. Дослідження магнітної поведінки тернарних сполук RMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> (R = Tb, Ho, Er, Tm, Lu) методом нейтронографії вказує на широкий спектр їхніх магнітних структур. Так, зокрема, для ErMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> встановлено феромагнітне впорядкування магнітних моментів як Ербію, так і Мангану за температур, нижчих 5,5 K. При вищих температурах атоми Мангану упорядковуються

антиферомагнітно [16].

Пропонована робота є продовженням систематичних досліджень потрійних систем на основі РЗМ, перехідних металів та германію і мала на меті дослідити взаємодію компонентів у системі Er–Mn–Ge у повному концентраційному інтервалі і побудувати ізотермічний переріз діаграми стану при 870 К.

## I. Методика експерименту

З метою перевірки і уточнення літературних даних та побудови діаграм фазових рівноваг потрійної системи Er – Mn – Ge було виготовлено 85 тернарних та бінарних сплавів. Для виготовлення сплавів використовувались метали з таким вмістом основного компоненту: Ербій (ЕрМ-1) – 99,82 мас. част. Ер, Марганець (Mp0) – 99,99 мас. част. Mn, Германій (моноокристалічний) – 99,99 мас. част. Ge. Зразки масою 1 г виготовляли в електродуговій печі з вольфрамовим електродом на мідному водоохолоджуваному поді в атмосфері очищеного аргону з використанням губчастого титану в якості гетера. Контроль втрат шихти при плавці проводили повторним зважуванням і, якщо маса зразка не відхилялась від маси шихти більше ніж на 1 – 2 %, склад сплаву приймали рівним складу шихти. Для приведення сплавів у рівноважний стан проводився гомогенізуючий відпал при 870 К протягом 720 год. з гартуванням у холодній воді без попереднього розбирання ампул. Рентгенофазовий аналіз проводили за дифрактограмами зразків (дифрактометр ДРОН-2,0М, Fe Ка випромінювання, Mn-фільтр). Для деяких сплавів проведено визначення елементного складу з використанням мікрозондового аналізу на основі рентгенівської спектроскопії за допомогою скануючого електронного мікроскопа PEMMA-102-02. Для розрахунку періодів гратки використовували комплекс програм CSD [17]. Для уточнення кристалічної структури використовували комплекс програм WinPLOTR [18].

Дослідження залежності питомої магнітної сприйнятливості від температури проводилось відносним методом Фарадея, диференціальна терморушійна сила (по відношенню до міді) і питомий електроопір вимірювались в інтервалі температур 80 – 380 К.

Для визначення напрямку осі легкого намагнічування (ВЛН) [19] полікристалічний зразок, розтертий в порошок, поміщався в індиферентне середовище (епоксидна смола) і фіксувався в магнітному полі до 0,4 Тл, після чого знімалася дифракційна картина на порошковому дифрактометрі ДРОН-2.0М. За зміною інтенсивностей відбиття та аналізом  $hkl$  рефлексів робився висновок про орієнтацію осі легкого намагнічування відносно кристалографічних осей досліджуваної сполуки.

Розрахунок розподілу густини електронних станів проведено із застосуванням методу CPMD, що використовувався в умовах наближення

псевдопотенціалу у представленні плоских хвиль. В якості обмінно-кореляційних потенціалів використовувались наближення локальної густини (LDA) з використанням обмінно-кореляційного потенціалу [20, 21].

## II. Результати експерименту та їх обговорення

Подвійні системи Er – Mn, Er – Ge і Mn – Ge, які обмежують досліджувану потрійну, вивчено достатньо повно, відомості про них зібрано в довідниках [22, 23]. Для проведення рентгенофазового аналізу використувались теоретичні дифрактограми бінарних сполук систем Er – Ge та Mn – Ge за відомими в літературі даними, а для подвійної системи Er – Mn – використовували еталонні порошковими ізоструктурних бінарних сполук, що реалізуються при температурі відпалу. Рентгенофазовий аналіз підтверджив утворення всіх бінарних сполук, що існують при температурі відпалювання:  $\text{ErMn}_{12}$  (СТ  $\text{ThMn}_{12}$ ),  $\text{Er}_6\text{Mn}_{23}$  (СТ  $\text{Th}_6\text{Mn}_2$ ),  $\text{ErMn}_2$  (СТ  $\text{MgZn}_2$ ),  $\text{Mn}_{11}\text{Ge}_8$  (СТ  $\text{Cr}_{11}\text{Ge}_8$ ),  $\text{Mn}_5\text{Ge}_3$  (СТ  $\text{Mg}_5\text{Si}_3$ ),  $\text{Mn}_2\text{Ge}$  (СТ  $\text{Ni}_2\text{In}$ ),  $\text{Mn}_5\text{Ge}_2$  (СТ  $\text{Mg}_5\text{Ga}_2$ ),  $\text{Mn}_{3,25}\text{Ge}$  (СТ  $\text{Ni}_3\text{Sn}$ ),  $\text{ErGe}_{2,83}$  (СТ  $\text{DyGe}_3$ ),  $\text{Er}_2\text{Ge}_5$  (СТ  $\text{Er}_2\text{Ge}_5$ ),  $\text{ErGe}_{1,83}$  (СТ  $\text{DyGe}_{1,85}$ ),  $\text{ErGe}_{1,5}$  (СТ  $\text{AlB}_2$ ),  $\text{Er}_3\text{Ge}_4$  (СТ  $\text{Er}_3\text{Ge}_4$ ),  $\text{ErGe}$  (СТ  $\text{CrB}$ ),  $\text{Er}_{11}\text{Ge}_{10}$  (СТ  $\text{Ho}_{11}\text{Ge}_{10}$ ),  $\text{Er}_5\text{Ge}_4$  (СТ  $\text{Sm}_5\text{Ge}_4$ ),  $\text{Er}_5\text{Ge}_3$  (СТ  $\text{Mn}_5\text{Si}_3$ ).

Ізотермічний переріз діаграми стану системи Er–Mn–Ge при температурі 870 К зображене на рис. 1. Згідно з результатами рентгенофазового аналізу в системі Er – Mn – Ge при досліджуваній температурі утворюється чотири тернарні сполуки, кристалографічні характеристики яких наведено в таблиці 1. Мікроструктури окремих сплавів наведено на рис. 2 - 3.

У роботі [4] наведено дані про існування германіду  $\text{ErMn}_{0,27}\text{Ge}_2$  зі структурою  $\text{CeNiSi}_2$ . При проведенні рентгенофазового аналізу в цій області системи Er – Mn – Ge встановлено, що дана сполука характеризується невеликою областю гомогенності в межах  $x = 0,77 - 0,61$ , періоди гратки змінюються в межах  $a = 0,4081(7) - 0,4084(2)$ ,  $b = 1,5628(2) - 1,5641(9)$ ,  $c = 0,3966(7) - 0,3974(2)$  нм, а склад сполуки відповідає формулі  $\text{ErMn}_{0,27-0,39}\text{Ge}_2$  ( $\text{ErMn}_{1-x}\text{Ge}_2$ ). Детальне дослідження кристалічної структури проведено методом порошку для зразка складу  $\text{Er}_{30}\text{Mn}_9\text{Ge}_{61}$  (дифрактометр STOE STADI P, Mo Ка-випромінювання,  $8^\circ \leq 2\theta \leq 120^\circ$ , крок сканування  $0,02^\circ$ , час сканування в одній точці 8 с). Обчислені координати атомів та ізотропні параметри атомного зміщення, уточнені до  $R_p = 0,0509$ ,  $R_{wp} = 0,0737$ ,  $R_{Bragg} = 0,0402$ , для сполуки  $\text{ErMn}_{0,27}\text{Ge}_2$  наведено в табл. 2. Експериментальну, теоретичну та різницеву дифрактограми зображені на рис. 4. Отже, згідно з результатів рентгенофазового аналізу та розрахунків кристалічної структури германід  $\text{ErMn}_{1-x}\text{Ge}_2$  характеризується дефектною структурою типу  $\text{CeNiSi}_2$  з невеликою областю

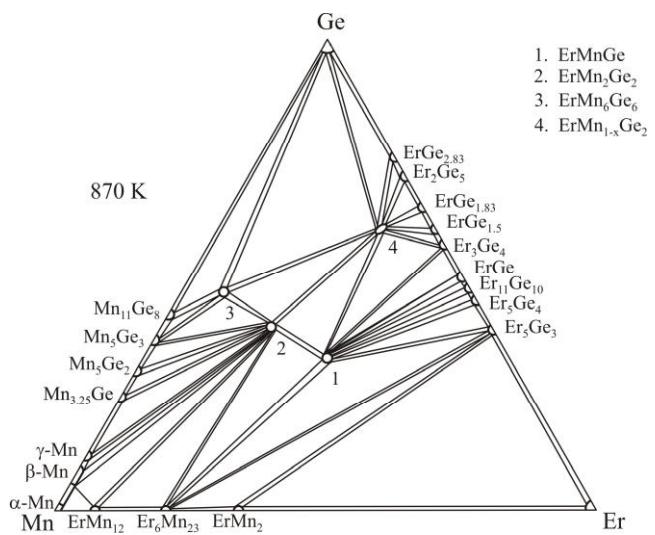


Рис. 1. Ізотермічний переріз діаграми стану системи Er – Mn - Ge при 870 К.

Таблиця 1

Кристалографічні характеристики сполук системи Er – Mn - Ge

Сполука	СТ	СП	ПГ	Періоди гратки, нм		
				<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
ErMn <sub>6</sub> Ge <sub>6</sub>	HfFe <sub>6</sub> Ge <sub>6</sub>	ohP13	<i>P</i> 6/ <i>mmm</i>	0,5218(2)	-	0,8142(1)
ErMn <sub>2</sub> Ge <sub>2</sub>	CeGa <sub>2</sub> Al <sub>2</sub>	tI10	<i>I</i> 4/ <i>mmm</i>	0,3945(6)	-	1,076(8)
ErMn <sub>0,27</sub> Ge <sub>2</sub> ErMn <sub>0,32-0,39</sub> Ge <sub>2</sub>	CeNiSi <sub>2</sub>	oS16	<i>C</i> mcm	0,408736(8) 0,4081(7)- 0,4084(2)	1,565608(32) 1,5628(7)- 1,5641(9)	0,397466(7) 0,3966(7)- 0,3974(1)
ErMnGe	TiNiSi	hP12	<i>P</i> nma	0,6981(3)	0,4079(6)	0,8071(4)

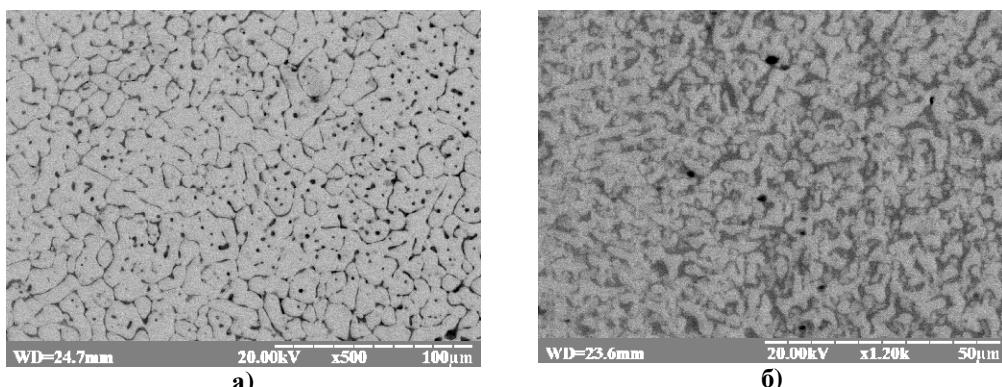


Рис. 2. Фотографії мікрошліфів сплавів: а - Er<sub>48</sub>Mn<sub>21</sub>Ge<sub>31</sub> (сіра (основна) фаза - Er<sub>5</sub>Ge<sub>3</sub>, темна фаза – ErMnGe); б - Er<sub>50</sub>Mn<sub>15</sub>Ge<sub>3</sub> (сіра фаза - Er<sub>5</sub>Ge<sub>3</sub>, темна фаза – ErMnGe).

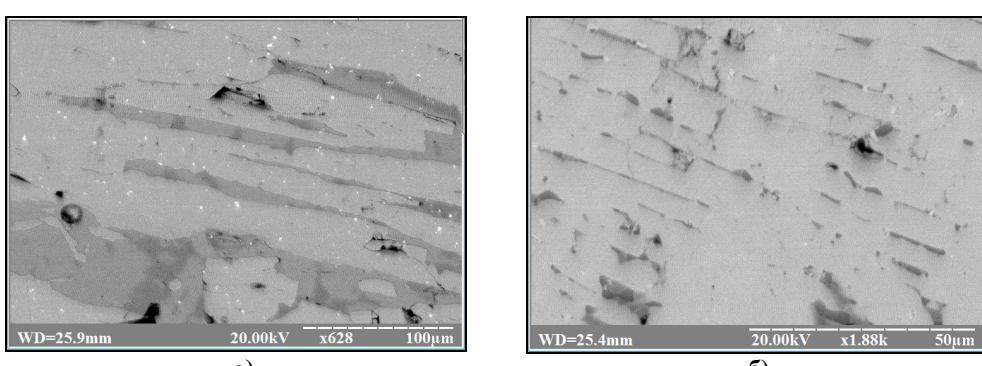
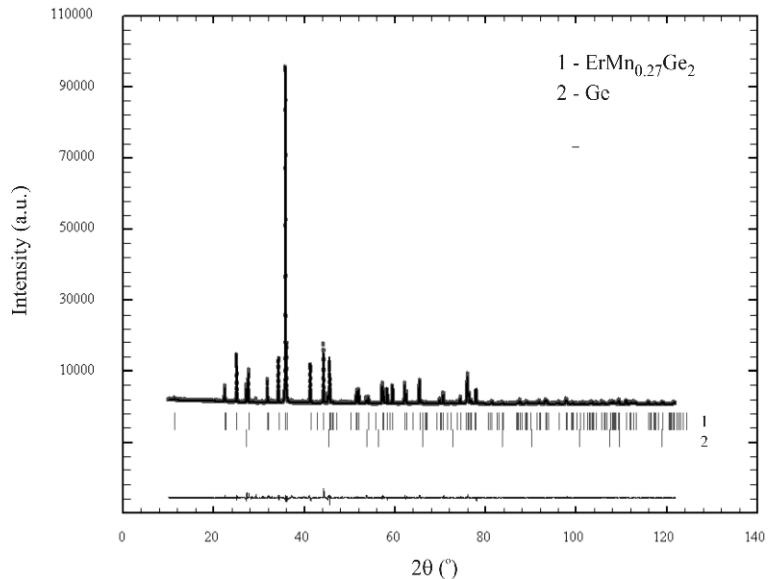


Рис. 3. Фотографії мікрошліфів сплавів: а - Er<sub>7</sub>Mn<sub>45</sub>Ge<sub>48</sub> (світла (основна) фаза ErMn<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub>, темно-сіра фаза - Mn<sub>11</sub>Ge<sub>8</sub>, сіра фаза Ge); б - Er<sub>30</sub>Mn<sub>11</sub>Ge<sub>59</sub>. (світла (основна) фаза - ErMn<sub>1-x</sub>Ge<sub>2</sub>, сіра фаза – Ge).



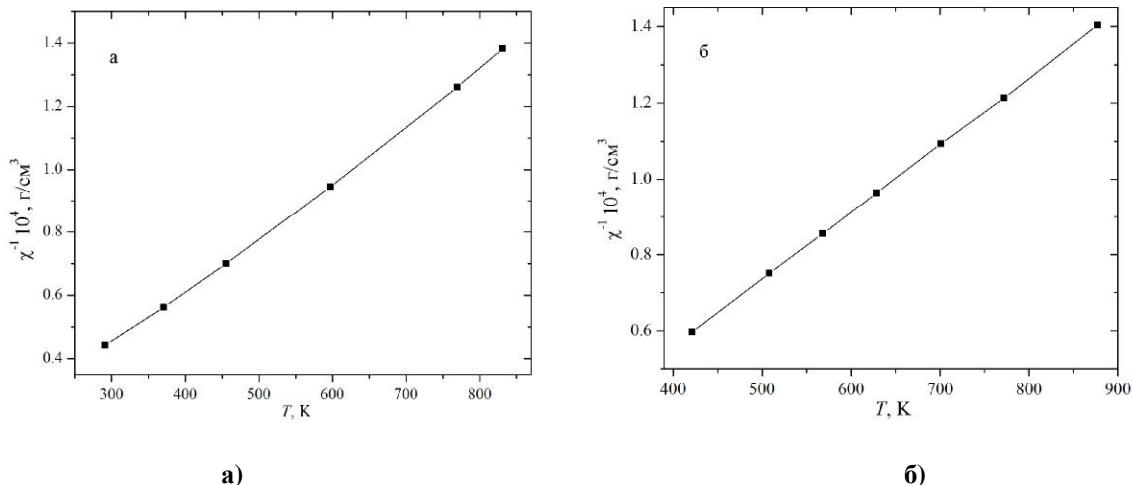
**Рис. 4.** Експериментальна (точки), теоретична (суцільна лінія) та різницева (внизу) дифрактограми зразка складу  $\text{Er}_{30}\text{Mn}_9\text{Sn}_{61}$ .

**Таблиця 2**

Координати та ізотропні теплові параметри атомів у структурі сполуки  $\text{ErMn}_{0.27}\text{Ge}_2$

Атом	ПСТ	$x/a$	$y/b$	$z/c$	$B_{130} \cdot 10^2 (\text{нм}^2)$
Er	4( <i>c</i> )	0	0,39710(8)	1/4	0,53(3)
Mn*	4( <i>c</i> )	0	0,2060(6)	1/4	1,315(0)
Ge1	4( <i>c</i> )	0	0,0536(1)	1/4	1,21(5)
Ge2	4( <i>c</i> )	0	0,7517(1)	1/4	1,84(7)

\*Mn = 0,27(1) Mn



**Рис. 5.** Залежність оберненої магнітної сприйнятливості від температури для зразків  $\text{ErMn}_{0.32}\text{Ge}_2$  (а) і  $\text{ErMn}_{0.39}\text{Ge}_2$  (б).

гомогенності вздовж перетину “ $\text{ErMnGe}_2$ ” –  $\text{ErGe}_{1.83}$ .

Для зразків складів  $\text{ErMn}_{0.32}\text{Ge}_2$  та  $\text{ErMn}_{0.39}\text{Ge}_2$  з області гомогенності сполуки  $\text{ErMn}_{1-x}\text{Ge}_2$  проведено поміри температурної залежності магнітної сприйнятливості в інтервалі температур 290 – 870 К та 400 – 870 К, відповідно (рис. 5, а, б). Аналіз температурних залежностей оберненої магнітної сприйнятливості вказує, що для обох зразків властивий парамагнетизм Кюрі – Вейса в дослідженному інтервалі температур. Парамагнітні

температури Кюрі зразків  $\text{ErMn}_{0.32}\text{Ge}_2$  та  $\text{ErMn}_{0.39}\text{Ge}_2$  становлять 90,5 та 79 К, розрахований магнітний момент на формульну одиницю дорівнює 12,61 та 13,03  $\mu_B$ , відповідно. Величини магнітних моментів на атомах Ербію та Мангану свідчать, що у сплавах вони перебувають у станах  $\text{Er}^{3+}$  та  $\text{Mn}^{2+}$ .

Для визначення природи магнітної взаємодії при кімнатній температурі рентгенографічним методом визначено напрямок осі легкого намагнічування (осі магнетокристалічної анізотропії) зразка складу

$\text{ErMn}_{0.32}\text{Ge}_2$  шляхом порівняння дифрактограм нетекстурованого (рис. 6, а) та орієнтованого у сталому магнітному полі (0,4 Тл) (рис. 6, б) порошку відповідного сплаву. На основі зміни інтенсивностей відбиття та аналізу  $hkl$  рефлексів можна зробити висновок про орієнтацію осі легкого намагнічування в базисній площині.

Температурні залежності питомого електроопору ( $r(T)$ ) та термоелектрорушійної сили ( $a(T)$ ) досліджені для зразку  $\text{ErMn}_{0.39}\text{Ge}_2$  (рис. 7, а, б). Лінійний хід температурних залежностей  $r(T)$ , невеликі значення питомого електроопору та малі від'ємні значення диференціальної термо - Е.Р.С. вказують на металічний тип провідності. Analogічно

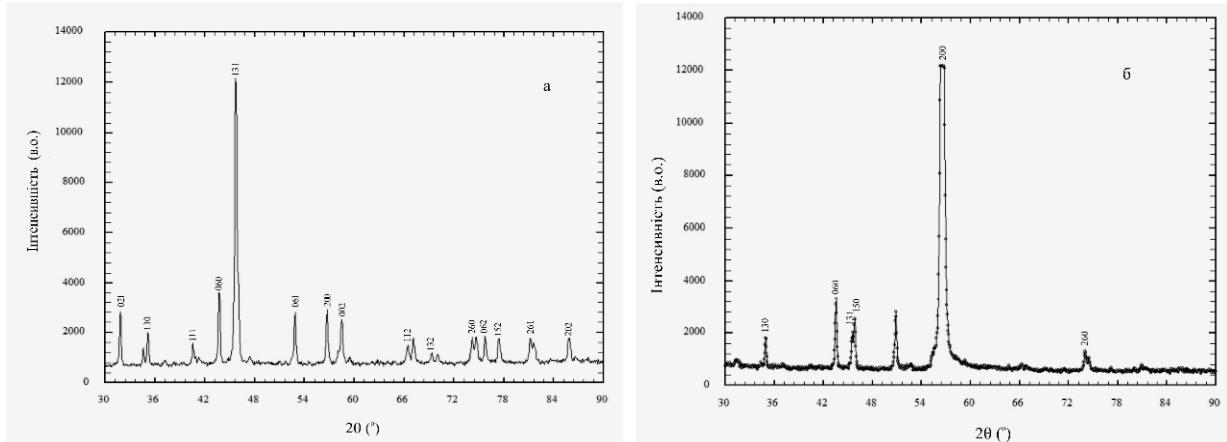


Рис. 6. Дифрактограма нетекстурованого (а) і орієнтованого у магнітному полі (б) порошків зразка  $\text{ErMn}_{0.32}\text{Ge}_2$ .

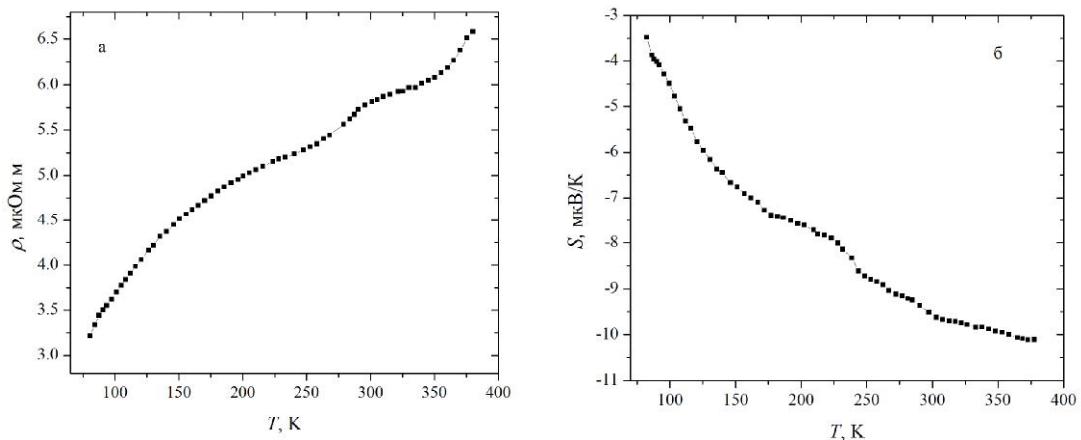


Рис. 7. Температурні залежності питомого електроопору (а) та диференціальної термоелектрорушійної сили (б) для зразка  $\text{ErMn}_{0.39}\text{Ge}_2$ .

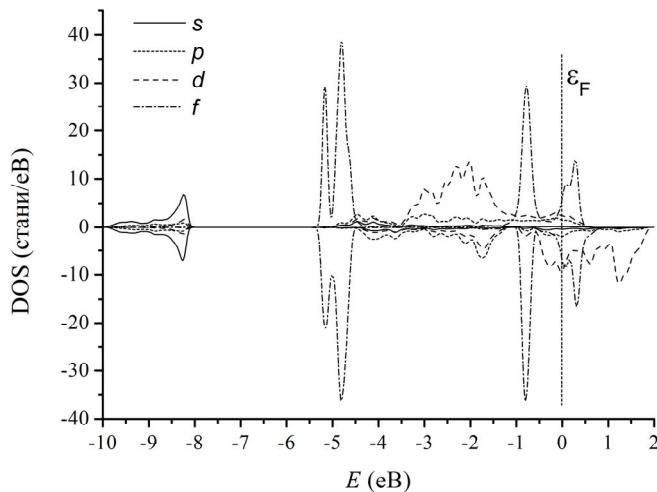
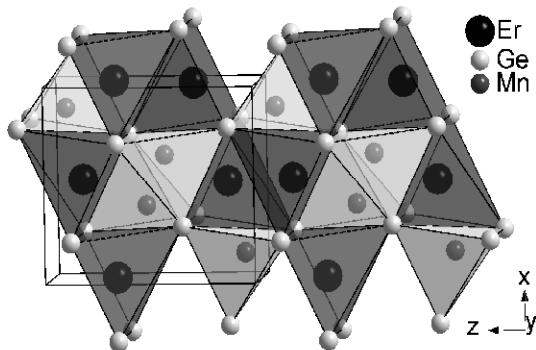


Рис. 8. DOS тернарного германіду  $\text{ErMnGe}$ .

для германіду  $\text{ErMnGe}$  значення питомого електроопору при кімнатній температурі ( $\rho = 38,08 \text{ мкОм}\cdot\text{м}$ ) та малі від'ємні значення диференціальної термо - Е.Р.С. вказують на те, що сполучі властивий металічний тип провідності, що підтверджено також розрахунком розподілу густини електронних станів (DOS) (рис. 8).

Розрахунки електронної структури сполуки  $\text{ErMnGe}$  (CT  $\text{TiNiSi}$ ) показали, що даний германід є типовим металом (рис. 8). Розподіл електронної густини виявив значну локалізацію електронної густини ( $\sim 0,25 \text{ е/} \text{\AA}^3$ ) між атомами Ge та Mn, це в свою чергу відповідає тетраедричному оточенню атомів Mn атомами Ge (рис. 9). Така  $p$ - $d$  гібридизація є доволі характерною для інтерметалідів, утворених атомами  $3d$  елементів та елементами 4-ї групи. Значно меншу локалізацію електронної густини ( $\sim 0,18 \text{ е/} \text{\AA}^3$ ) виявлено між атомами Er та Ge. При цьому електронна густина зміщена від атомів Er у бік атомів Ge, що свідчить про поляризацію зв'язку. Це добре узгоджується з тим фактом, що Ge є більш електронегативним, ніж



**Рис. 9.** Укладка координаційних многогранників сполуки  $\text{ErMnGe}$  згідно розрахунку розподілу електронної густини.

Er. Координаційним многогранником для атомів Er є піраміда з атомів Ge (рис. 9).

Порівняння дослідженої системи Er-Mn-Ge та раніше вивчених з Ce, Nd, Gd, Tb та Yb показало, що найбільш складним характером взаємодії відрізняється система з гадолінієм, у якій виявлено дев'ять тернарних сполук. Решта досліджених систем характеризуються утворенням трьох-четирьох сполук. За стехіометрією інтерметалідів і типами їх кристалічних структур найбільш подібною до дослідженої є система з тербієм. Ізотермічні перерізи для обох з них побудовані при однаковій температурі, в той час як система з гадолінієм досліджена при вищій температурі (970 К). При заміні переходного металу із зростанням протонного числа  $3d$ -елементу ускладнюється взаємодія в потрійних системах Er-M-Ge. Ізотермічні перерізи діаграм стану систем Er-{Fe, Co, Ni}-Ge побудовано в повному концентраційному інтервалі при 1070 К [1]. При заміні M-компоненту кількість тернарних сполук зростає у ряду  $\text{Mn} \rightarrow \text{Fe} \rightarrow \text{Co} \rightarrow \text{Ni}$  наступним чином 4→8→16→14. Такий вплив переходних металів на характер взаємодії зумовлений найімовірніше відмінностями в електронній будові, а саме заповненістю  $3d$ -підрівня переходного металу. Зменшення відмінностей в електронній будові M-компоненту і Ge при переході від Mn до Ni сприяє утворенню твердих розчинів більшої протяжності, відображається на кількості утворених тернарних сполук і їх кристалохімії.

*Робота виконана у рамках гранту Міністерства освіти і науки України № ДР 0111U001088.*

**Конік М.Б.** – к.х.н., доц.;  
**Ромака Л.П.** – к.х.н., пров.н.сп.;  
**Ромака В.В.** – к.х.н., м.н.сп.;  
**Серкіз Р.Я.** – інженер I категорії .

- [1] P.S. Salamakha, O.L. Sologub, O.I. Bodak. Ternary rare-earth-germanium systems. In: Cschneidner K. A. et al, editors.– Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths (Amsterdam, the Netherlands, Elsevier 27, 1999).
- [2] M.B. Konyk, O.I. Bodak. J. Alloys Compd. 387, 243 (2005).
- [3] P.K. Starodub, L.M. Zapotoc'ka, O.I. Bodak. Sistema Tb-Mn-Ge. Visn. L'viv. un-tu Ser. him. 36, 57 (1996).
- [4] M. Francois, G. Venturini, B. Malaman, B. Rogues. J. Less-Com Met. 160, 197 (1990).
- [5] A.V. Morozkin, Y.D. Seropegin, I.A. Sviridov. J. Alloys Compd. 269, 1 (1998).
- [6] P.S. Salamakha. Crystal structures and crystal chemistry of ternary rare-earth germanides. In: Cschneidner K. A. et al, edit.– Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths (Amsterdam, the Netherlands, Elsevier. 27, 1999).
- [7] D. Rossi, R. Marazza, D. Mazzone, R. Ferro. J. Less-Common Met. 59, 79 (1978).
- [8] M. Konyk, L. Romaka, D. Gignoux et. al. J. Alloys Compd. 398, 8 (2005).
- [9] D. Kaczorowski, M. Konyk, A. Szytula, L. Romaka et al. Solid State Sciences 10, 1891 (2008).
- [10] A. Gil, J. Leciejewicz, K. Mafetka, A. Szytyla et al. J. Magnetism Magnet. Mater. 29, 155 (1994).
- [11] K.S.V.L. Narasimhan, V.U.S. Rao, R.L. Bergner Wallace. J. Appl. Phys. 46(11), 4957 (1975).
- [12] G. Venturini, R. Welter, B. Malaman. J. Alloys Compd. 185, 99 (1992).
- [13] A. Szytula, B. Penc, Yu. Gorelenko, M. Konyk et. al. Chemistry of Metals and Alloys 1, 88 (2008).
- [14] M. Konik, L. Aksel'rud, Ju. Gorelenko, L. Romaka. Visnik L'viv. Un-tu. Ser. him. 49(1), 110 (2008).
- [15] O. Sologub, K. Hiebl, P. Rogl, O. Bodak. J. Alloys Comp. 227, 37 (1995).
- [16] G. Venturini, B. Malaman, E. Ressouche. J. Alloys Comp. 240, 139 (1996).

- [17] L.G. Akselrud, P.Yu. Zavalii, Yu.N. Grin. et al. Mater. Sci. Forum. 133-136, 335 (1993).
- [18] T. Roisnel, J. Rodriguez-Carvajal. WinPLOTR: a Windows tool for powder diffraction patterns analysis. Materials Science Forum, Proceedings of the European Powder Diffraction Conference (EPDIC7) 378-381, 118 (2001).
- [19] Ju.K. Gorelenko, R.C. Gladishevs'kij, Ju.V. Stadnik, L.P. Romaka, A.M. Gorin'. Metodichni vikazivki do vikonnannja laboratornih robit iz speckursiv "Elektrichni ta magnitni vlastivosti neorganichnih materialiv" i "Suchasni neorganichni materiali" (L'viv: VC LNU im. I.Franka, (<http://sites.google.com/site/ipprlab/>), 2008).
- [20] D.M. Ceperley, B.J. Alder. Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980).
- [21] J.P. Perdew, A. Zunger. Phys. Rev. B. 23, 5048 (1981).
- [22] T.B. Massalski. Binary Alloy Diagrams. American Society for Metals. Metals Park OH 44073. 1, 2 (1986).
- [23] P. Villars, J.D. Calvert. Pearson's Handbook of Crystallographic Data for Intermetallic Phases. Metals Park OH 44073 (1997).

M.B. Konyk, L.P. Romaka, V.V. Romaka, R.Ya. Serkiz

## Interaction of the Components in Er-Mn-Ge Ternary System at 870 K

*Ivan Franko National University of Lviv, Kyryl & Mephodiy Str., 6, 79005, Lviv, Ukraine*

*<sup>c</sup>National University "Lvivska Politehnika", Bandera str. 12, 79013, Lviv, Ukraine*

Isothermal section of the Er - Mn - Ge ternary system was constructed using X-ray analysis and scanning electron microscopy at 870 K. Four ternary compounds exist at investigated temperature:  $\text{ErMn}_6\text{Ge}_6$  (HfFe<sub>6</sub>Ge<sub>6</sub>-type, space group  $P6/mmm$ ),  $\text{ErMn}_2\text{Ge}_2$  (CeGa<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>-type, space group  $I4/mmm$ ),  $\text{ErMn}_{1-x}\text{Ge}_2$  (CeNiSi<sub>2</sub>-type, space group  $Cmcm$ ),  $\text{ErMnGe}$  (TiNiSi-type, space group  $Pnma$ ). For  $\text{ErMn}_{1-x}\text{Ge}_2$  germanide the homogeneity range was established ( $x = 0.68 - 0.61$ ,  $a = 0.4081(7) - 0.4084(2)$ ,  $b = 1.5628(2) - 1.5641(9)$ ,  $c = 0.3966(7) - 0.3974$  nm), the electrotransport properties, magnetic susceptibility were investigated in the temperature range 80 – 380 K and 290 – 870 K, the easy axis magnetizing direction was determined. Electronic structure calculations for  $\text{ErMnGe}$  compound were performed using CPMD method and indicated metallic state for this compound.

**Keywords:** ternary system, crystal structure, thermopower, electrical resistivity, easy magnetization axis, electronic structure.