

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА СПОЛУКИ $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ *Марискевич Д. Т.*, Токайчук Я. О., Гладішевський Р. Є.

Кафедра неорганічної хімії

Львівського національного університету імені Івана Франка,

вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна

danylo.maryskewytsch@gmail.com

Під час дослідження взаємодії компонентів у потрійній системі Hf-Al-Ge при $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ на ізоконцентраті 25 ат.% Hf встановлено існування сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$. Для визначення її кристалічної структури було синтезовано методом електродугового сплавляння металів високої чистоти зразок складу $\text{Hf}_{25}\text{Al}_{70}\text{Ge}_5$ і гомогенізовано його при $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ впродовж 1 місяця. Масив рентгенівських дифракційних даних отримано на порошковому дифрактометрі STOE Stadi P (проміння $\text{Cu K}\alpha_1$). Параметри профілю рентгенограми та параметри кристалічної структури тернарної сполуки уточнено методом Рітвельда з використанням пакету програм FullProf Suite.

Кристалічна структура тернарної сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ належить до структурного типу (СТ) TiAl_3 (символ Пірсона (СП) $tI8$, просторова група (ПГ) $I4/mmm$, $a = 3,91780(14)$, $c = 8,9324(3)\text{ \AA}$, $R_B = 0,0283$, $R_F = 0,0220$, $R_p = 0,0665$, $R_{wp} = 0,0910$, $\chi^2 = 3,27$). Координати і параметри зміщення атомів, а також коефіцієнти заповнення позицій приведено у таблиці. Обидві правильні системи точок (ПСТ) атомів p -елементів зайняті статистичними сумішами атомів Al і Ge , однак з дещо відмінним їхнім співвідношенням. Уточнений склад сполуки – $\text{HfAl}_{2,68(1)}\text{Ge}_{0,32(1)}$.

Таблиця. Координати та ізотропні параметри зміщення атомів у структурі сполуки $\text{HfAl}_{2,7}\text{Ge}_{0,3}$ (СТ TiAl_3 , СП $tI8$, ПГ $I4/mmm$, $a = 3,91780(14)$, $c = 8,9324(3)\text{ \AA}$)

Атом	ПСТ	x	y	z	$B_{\text{ізо}}, \text{\AA}^2$
Hf	$2a$	0	0	0	0,584(13)
$M1^1$	$4d$	0	1/2	1/4	1,23(8)
$M2^2$	$2b$	0	0	1/2	1,27(7)

¹ $M1 = 0,958(4)\text{Al} + 0,042(4)\text{Ge}$; ² $M2 = 0,762(5)\text{Al} + 0,238(5)\text{Ge}$.

Структурний тип TiAl_3 належить до найщільніших упаковок атомів, а координаційними многогранниками усіх атомів є кубооктаедри. Вміст елементарної комірки і координаційні многогранники атомів зображено на рисунку.

Тернарну сполуку $\text{HfAl}_{2,6}\text{Ge}_{0,4}$, що існує при $600\text{ }^{\circ}\text{C}$, можна вважати стабілізованим атомами Ge твердим розчином на основі високотемпературної модифікації бінарного триалюмініду HfAl_3 (СТ TiAl_3). При температурі дослідження кристалічна структура сполуки HfAl_3 належить до структурного типу ZrAl_3 (СП $tI16$, ПГ $I4/mmm$, $a = 3,9865(2)$, $c = 17,1440(8)\text{ \AA}$).

