

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ ГОЛЬМІЮ У NiIn

Малецька Ю. В.

Кафедра аналітичної хімії, Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія 6, 79005 Львів, Україна
Yuliia.Maletska@lnu.edu.ua

Систематичне дослідження взаємодії компонентів у системі Ho-Ni-In призвело до виявлення низки тернарних сполук та твердих розчинів [1]. За результатами рентгенівського фазового аналізу потрійних сплавів в області близькій до сполуки NiIn (стр. тип CoSn, пр. гр. $P6/mmm$, $Z=3$, $a=5,2446$ \AA , $c=4,3518$ \AA , $V=103,66$ \AA^3) [2] встановлено зміщення дифракційних піків останньої в бік зменшення кутів, що вказує на утворення твердого розчину. Дане дослідження присвячене встановленню його меж, кристалічної структури, а відтак і його природи.

Полікристалічні зразки масою ~ 1 г складу $\text{Ho}_4\text{Ni}_{48}\text{In}_{48}$ та $\text{Ho}_8\text{Ni}_{46}\text{In}_{46}$ виготовлено шляхом електродугового сплавлення шихти вихідних компонентів у атмосфері аргону. Сплави відпалено у вакуумованій кварцовій ампулі при температурі 870 K випроводж 60 діб і загартовано у холодну воду разом з ампулою.

Газовий аналіз та уточнення кристалічної структури сполук виконано за допомогою програми FullProf [3] на основі порошкових рентгенограм (дифрактометр STOE STADI P, $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання, геометрія на пропускання, інтервал $6 \leq 2\theta \leq 110^\circ$, крок 0.015° , 250 с/крок).

За результатами рентгенофазового аналізу зразків виявлено, що вони містять основну фазу ізоструктурну до NiIn та домішкову фазу HoNi_4In . Результати уточнення кристалічної структури: для сплаву $\text{Ho}_4\text{Ni}_{48}\text{In}_{48}$ уточнений склад $\text{Ho}_{0,04}\text{NiIn}_{0,93}$, $a=5,24478(3)$, $c=4,35776(5)$ \AA , $V=103,810(2)$ \AA^3 , $\rho=8,499$ г/см³, Ho (2e) 00z ($z=0,388(4)$), $B=0,33(8)$, $G=0,06(2)$, Ni (3f) 1/200, $B=1,44(7)$, $G=1$, In1 (2d) 1/32/31/2, $B=0,93(5)$, $G=1$, In2 (1a) 000, $B=0,33(8)$, $G=0,72(2)$, In3 (2e) 00z ($z=0,852(4)$), $B=0,33(8)$, $G=0,10(2)$, $R_p=8,56$ %, $R_{wp}=11,4$ %; для сплаву $\text{Ho}_8\text{Ni}_{46}\text{In}_{46}$ уточнений склад $\text{Ho}_{0,12}\text{NiIn}_{0,94}$, $a=5,2746(1)$, $c=4,3723(2)$ \AA , $V=105,345(4)$ \AA^3 , $\rho=8,795$ г/см³, Ho (2e) 00z ($z=0,362(1)$), $B=0,6(2)$, $G=0,18(1)$, Ni (3f) 1/200, $B=0,4(2)$, $G=1$, In1 (2d) 1/32/31/2, $B=0,2(1)$, $G=1$, In2 (1a) 000, $B=0,6(2)$, $G=0,46(2)$, In3 (2e) 00z ($z=0,87(4)$), $B=0,6(2)$, $G=0,18(1)$, $R_p=12,0$ %, $R_{wp}=15,7$ %.

Включення атомів Гольмію призводить до збільшення об'єму комірки на 1,66 %. При утворенні цього твердого розчину має місце вилучення атомів індію із положення 1a 000, яке стає дефектним з одночасним переміщенням їх частини в положення 2e 00z (атоми In3). У це ж положення включаються також атоми гольмію, тобто за своєю природою це твердий розчин віднімання-включення. Якщо у бінарній сполуці NiIn у гексагональних каналах вздовж напрямку 00Z знаходяться тільки атоми In2, то у твердому розчині додатково атоми In3 та Ho. Гранична розчинність становить біля 6 ат. %.

[1] Ya.M. Kalychak, V.I. Zaremba, R. Pöttgen et al. Rare Earth – Transition Metal – Indides – Synthesis, Phase Relations, Crystal Chemistry, Chemical Bonding and Physical Properties. In Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. – 2005. – Vol. 34, Ch. 218. – P. 1–133.

[2] Okamoto H. In-Ni (Indium–Nickel). J. Phase Equilibria. –1999. –V.20, №5. – P. 540.

[3] J. Rodriguez–Carvajal, Commission on Powder Diffraction (IUCr) Newsletter 26 (2001) P. 12–19.