

УДК 548.736.4

НЕПЕРЕРВНИЙ РЯД ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ScCu–ScAl

Н. Климентій, С. Пукас, Н. Семусь, Р. Гладішевський

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: klymentiy.nastasia@gmail.com

Рентгенівським дифракційним методом порошку встановлено існування при 800°C неперервного ряду твердих розчинів $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ ($x = 0-1$) на основі бінарних сполук ScCu та ScAl зі структурою типу CsCl ($cP2$, $Pm-3m$). Атоми Cu та Al утворюють статистичну суміш $M = \text{Cu}_{1-x}\text{Al}_x$; за поступового заміщення атомів Cu на атоми Al параметр кубічної елементарної комірки збільшується, що пов'язано з розмірним фактором. Найкоротші міжатомні віддалі у структурі такі: Sc–M – 2,81340(6)–2,9887(3) Å, Sc–Sc і M–M – 3,24864(6)–3,4511(3) Å. Для сполуки ScCu_2Al з близькопорідною структурою типу MnCu_2Al ($cF16$, $Fm-3m$) міжатомні віддалі є коротшими на 4,5–10,1 %.

Ключові слова: скандій, купрум, алюміній, рентгенівська дифракція, кристалічна структура, неперервний ряд твердих розчинів.

Відомості про фазові рівноваги у системах R–Cu–Al та кристалічну структуру сполук, що в них утворюються, узагальнено у працях [1–3]. Згідно з літературними відомостями ізотермічний переріз діаграми стану системи Sc–Cu–Al побудовано при 500°C в області 0–33,3 ат. % Sc [4]. Автори підтвердили існування двох сполук (ScCu_2Al та ScCuAl [5]) та встановили утворення семи нових тернарних інтерметалідів. Лише для трьох із дев'яти повідомлених сполук кристалічну структуру визначено повністю: $\text{ScCu}_{4-6,6}\text{Al}_{8-5,4}$ (структурний тип ThMn_{12} , символ Пірсона $tI26$, просторова група $I4/mmm$), $\text{Sc}_{0,5}\text{CuAl}_{0,5}$ (CsCl, $cP2$, $Pm-3m$) та ScCuAl (MgZn_2 , $hP12$, $P6_3/mmc$). Для сполуки $\sim\text{ScCu}_2\text{Al}_2$ визначено параметри елементарної комірки, тоді як для сполук ScCu_4Al_3 , $\text{Sc}_3\text{Cu}_{13}\text{Al}_4$, ScCu_3Al_2 , $\text{Sc}_3\text{Cu}_8\text{Al}_7$ і $\text{ScCu}_{1,4}\text{Al}_{0,6}$ визначено лише приблизні склади. Згодом склади сполук $\sim\text{Sc}_3\text{Cu}_{13}\text{Al}_4$, $\sim\text{ScCu}_3\text{Al}_2$, $\sim\text{Sc}_3\text{Cu}_8\text{Al}_7$ уточнено до $\text{Sc}_2\text{Cu}_{7,5}\text{Al}_{3,5}$, $\text{Sc}_6\text{Cu}_{16,4}\text{Al}_{13,9}$, $\text{Sc}_3\text{Cu}_9\text{Al}_7$, відповідно, та визначено параметри елементарних комірок цих сполук [6, 7], а також встановлено існування та кристалічну структуру нової сполуки $\text{ScCu}_{0,6}\text{Al}_{1,4}$, яка належить до гексагонального структурного типу MgNi_2 ($hP24$, $P6_3/mmc$) [6–8]. Для сполуки ScCu_2Al ($\text{Sc}_{0,5}\text{CuAl}_{0,5}$) проведено визначення кристалічної структури методом монокристала та встановлено її належність до кубічного структурного типу MnCu_2Al ($cF16$, $Fm-3m$) [6–8]. У працях [9–11] повідомлено про існування ще трьох сполук у

системі Sc–Cu–Al: $\text{Sc}_2\text{Cu}_{6,25}\text{Al}_{4,75}$ (власний структурний тип, $oS108$, $Cmmm$), $\text{Sc}_6\text{Cu}_{24,1}\text{Al}_{11,9}$ (власний структурний тип, $cI176$, $Im-3$) та $\text{Sc}_3\text{Cu}_{7,5}\text{Al}_{7,5}$ ($\text{Sc}_3\text{Ni}_{11}\text{Ge}_4$, $hP38$, $P6_3/mmc$). Алюмінід $\text{Sc}_3\text{Cu}_{7,5}\text{Al}_{7,5}$ відповідає сполуці, що раніше описували складами $\text{Sc}_6\text{Cu}_{16,4}\text{Al}_{13,9}$ та ScCu_2Al_2 , із невідомою кристалічною структурою. Кристалографічні характеристики сполук у системі Sc–Cu–Al наведено у табл. 1.

Мета нашого дослідження – вивчення перетину ScCu–ScAl.

Синтезовано подвійні та потрійні сплави з вмістом 50 ат. % Sc. Для синтезу зразків використали вихідні компоненти такої чистоти: Sc – 99,99; Cu – 99,99; Al – 99,998 мас. %. Сплави виготовили методом електродугової плавки шихти металів в атмосфері аргону, додатково очищеного за допомогою Ti-гетера. Гомогенізувальний відпал сплавів у евакуйованих кварцових ампулах проводили за температури 800°C впродовж 30 діб (муфельна електропіч VULCAN-A550). Після відпалу ампули зі зразками гартували в холодній воді без попереднього розбиття. Для проведення фазового та структурного аналізу одержано масиви рентгенівських порошкових дифракційних даних на дифрактометрі ДРОН–2,0 М (проміння Fe K α , інтервал сканування – 20–100° 2 θ , крок сканування – 0,05° 2 θ). Кристалічну структуру уточнено методом Рітвельда за допомогою програми DBWS-9708 [12].

Таблиця 1

Кристалографічні характеристики сполук системи Sc–Cu–Al

Сполука	Структурний тип	Символ Пірсона	Просторова група	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	Літ.
ScCu _{4-6,6} × Al _{8-5,4}	ThMn ₁₂	<i>tI26</i>	<i>I4/mmm</i>	8,66– 8,63	–	4,43– 5,10	[4]
ScCu ₄ Al ₃	[4]
Sc ₆ Cu _{24,1} Al _{11,9}	Sc ₆ Cu _{24,1} Al _{11,9}	<i>cI176</i>	<i>Im-3</i>	13,5337	–	–	[10]
Sc ₂ Cu _{6,25} Al _{4,75}	Sc ₂ Cu _{6,25} Al _{4,75}	<i>oS108</i>	<i>Cmmm</i>	8,337	22,02	8,305	[9]
Sc ₂ Cu _{7,5} Al _{3,5}	...	<i>hP24</i>	<i>P6/mmm</i>	4,913	–	18,420	[7]
Sc ₃ Cu ₉ Al ₇	...	<i>oS116</i>	<i>Cmmm</i>	8,355	21,977	8,319	[7]
Sc ₃ Cu _{7,5} Al _{7,5}	Sc ₃ Ni ₁₁ Ge ₄	<i>hP38</i>	<i>P6₃/mmc</i>	8,4848	–	8,8593	[11]
ScCu ₂ Al	MnCu ₂ Al	<i>cF16</i>	<i>Fm-3m</i>	6,203	–	–	[8]
Sc _{0,5} CuAl _{0,5} stab.	CsCl	<i>cP2</i>	<i>Pm-3m</i>	3,10	–	–	[5]
ScCu _{0,6} Al _{1,4}	MgNi ₂	<i>hP24</i>	<i>P6₃/mmc</i>	5,252	–	17,113	[8]
ScCuAl	MgZn ₂	<i>hP12</i>	<i>P6₃/mmc</i>	5,04	–	8,24	[5]
ScCu _{1,4} Al _{0,6}	[4]

За результатами рентгенівського фазового та структурного аналізу сплавів на ізоконцентраті 50 ат. % Sc при 800°C підтверджено існування ізоструктурних бінарних сполук ScCu та ScAl ($CsCl$, $cP2$, $Pm-3m$), а також встановлено утворення неперервного ряду твердих розчинів на їхній основі, $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ ($x = 0-1$). У бінарних фазах ScCu та ScAl одна з правильних систем точок просторової групи $Pm-3m$

(1*a* чи 1*b*) зайнята атомами Sc, а інше положення (1*b* чи 1*a*) – атомами Cu або Al. У випадку тернарних фаз одне з положень зайняте статистичною сумішшю атомів Cu та Al. Параметр кубічної елементарної комірки поступово збільшується за переходу від сполуки ScCu до сполуки ScAl (табл. 2, рис. 1), що пов'язано з поступовим заміщенням менших за розміром атомів Cu ($r_{Cu} = 1,28 \text{ \AA}$) на більші за розміром атоми Al ($r_{Al} = 1,43 \text{ \AA}$) [19]. Отже, в системі Sc–Cu–Al при 800°C існує неперервний ряд твердих розчинів $ScCu_{1-x}Al_x$. Щодо його граничних складів, то параметр елементарної комірки, який ми визначили, добре узгоджується з літературними відомостями: $a = 3,240 \text{ \AA}$ [20] та $3,256 \text{ \AA}$ [21] для ScCu, $a = 3,388 \text{ \AA}$ [22] та $3,450 \text{ \AA}$ [23] для ScAl.

Таблиця 2

Параметр елементарної комірки неперервного ряду твердих розчинів $ScCu_{1-x}Al_x$ зі структурою типу CsCl

Сплав	Склад фази	$a, \text{ \AA}$	$V, \text{ \AA}^3$	$\delta (\text{Sc-M}), \text{ \AA}$
Sc ₅₀ Cu ₅₀	ScCu	3,24864(6)	34,29(2)	2,81340(6)
Sc ₅₀ Cu ₄₀ Al ₁₀	ScCu _{0,8} Al _{0,2}	3,28095(2)	35,32(2)	2,84139(2)
Sc ₅₀ Cu ₂₀ Al ₃₀	ScCu _{0,4} Al _{0,6}	3,33744(1)	37,17(1)	2,89031(1)
Sc ₅₀ Cu ₁₀ Al ₄₀	ScCu _{0,2} Al _{0,8}	3,37811(2)	38,55(2)	2,92553(2)
Sc ₅₀ Al ₅₀	ScAl	3,4511(3)	41,10(3)	2,9887(3)

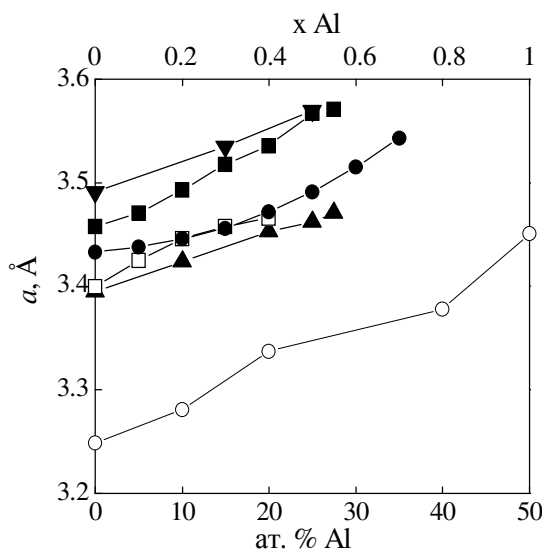


Рис. 1. Зміна параметра елементарної комірки в області твердих розчинів $RCu_{1-x}Al_x$ вздовж ізоконцентрати 50 ат. % R:

- ▼ – TbCu_{1-0,50}Al_{0-0,50} [13, 14];
- – DyCu_{1-0,45}Al_{0-0,55} [15];
- – HoCu_{1-0,30}Al_{0-0,70} [16];
- – ErCu_{1-0,60}Al_{0-0,40} [17];
- ▲ – LuCu_{1-0,45}Al_{0-0,55} [18];
- – ScCu₁₋₀Al₀₋₁

У табл. 3 узагальнено відомості про сполуки еквіатомного складу у системах R–Cu та R–Al. Кристалічна структура сполук RCu належить до кубічного типу CsCl [24] (11 представників) та ромбічного типу FeB [25] (8 представників). Крім вищезгаданих структурних типів, для сполук RCu реалізуються ще два структурні типи: AuCd – високотискова модифікація сполуки GdCu та CuTi – низькотемпературна модифікація сполуки TbCu [2, 3]. Можна простежити розподіл сполук за структурними типами: CsCl – сполуки із Sc, Y, Eu, Sm та лантаноїдами ітрієвої підгрупи (за винятком Yb), тоді як FeB – сполуки з лантаноїдами церієвої підгрупи, Gd та Yb. Варто зазначити, що для сполук із Sm, Eu та Gd, що є на межі поділу лантаноїдів церієвої та ітрієвої підгруп, відомо по дві поліморфні модифікації, кристалічні структури яких належать до обох структурних типів.

Таблиця 3

Структурні типи сполук RCu та RAl (CsCl, *cP2*, *Pm-3m*; FeB, *oP8*, *Pnma*; CeAl, *oS16*, *Cmcm*; DyAl, *oP16*, *Pbcm*; EuAl, *oP20*, *Pmmn*; CuTi, *tP2*, *P4/mmm*; AuCd, *oP4*, *Pnma*; CrB, *oS8*, *Cmcm*)

R	r_{Cu}/r_R	r_{Al}/r_R	RCu		RAl			RCu/RAl інший
			CsCl	FeB	CsCl	CeAl	DyAl	
Eu	0,643	0,719	+ (stab.)	+				+ EuAl ¹
Yb	0,660	0,737		+				
La	0,684	0,765		+		+		
Pr	0,703	0,786		+	+ (?)	+	+ (ht)	
Nd	0,703	0,786		+			+	
Ce	0,707	0,790		+	+ (m1)	+		
Sm	0,707	0,790	+	+	+ (?)		+	
Tb	0,711	0,794	+				+	+ (lt) CuTi ²
Dy	0,711	0,794	+		+ (ht)		+	
Gd	0,715	0,799	+	+	+ (stab.)	+	+ (ht)	+ (hp) AuCd ²
Ho	0,715	0,799	+				+	
Y	0,719	0,803	+		+ (ht)			+ CrB ¹
Er	0,719	0,803	+				+	
Tm	0,723	0,808	+				+	
Lu	0,731	0,817	+				+	
Sc	0,790	0,883	+		+ (stab.)			

¹ Сполука з Al; ² сполука з Cu.

Такий розподіл сполук за структурними типами можна пояснити співвідношенням радіусів атомів R та Cu. У випадку елементів Sc, Y та лантаноїдів ітрієвої підгрупи співвідношення r_{Cu}/r_R є більшим, ніж у випадку лантаноїдів церієвої підгрупи та Yb, і чим більше значення r_{Cu}/r_R , тим більше координаційне число для атомів Cu. У структурі сполук типу CsCl атоми Cu розташовані в центрах кубів із атомів R з шістьма додатковими атомами Cu навпроти граней (формують октаедр), тобто в центрах ромбододекаедрів (координаційне число 8+6). У структурі сполук

типу FeV атоми Cu центрують тригональні призми з атомів R із трьома додатковими атомами (два атоми Cu та один атом R формують трикутник) навпроти прямокутних граней (координаційне число 6+3). Кристалічні структури сполук RAI належать до п'яти структурних типів: кубічного CsCl (7 представників), ромбічних CeAl [26] (4 представники) та DyAl [27] (10 представників), які між собою є похідними зрощення, та ромбічних типів CrB та EuAl, які мають по одному представнику у системах $R-Al$. Структура типу CsCl притаманна стабілізованим, високотемпературним чи метастабільним алюмінідам.

Структура типу CsCl реалізується також в інших потрійних системах $R-Cu-Al$ ($R = Tb, Dy, Ho, Er$ та Lu), де утворюються обмежені тверді розчини Al у відповідних бінарних сполуках RCu : $TbCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-0,50$) [13, 14], $DyCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-0,55$) [15], $HoCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-0,70$) [16], $ErCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-0,40$) [17] та $LuCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-0,55$) [18].

Варто зазначити, що структура низькотемпературної модифікації сполуки $CuAl$ (власний структурний тип, $mS20$, $C2/m$) є варіантом деформації, заміщення та віднімання частини атомів типу CsCl ($Cu_4\Box_2 CuAl_5$) [28].

Цікавим є існування в системі $Sc-Cu-Al$, поряд із неперервним рядом твердих розчинів $ScCu_{1-x}Al_x$, тернарної сполуки $ScCu_2Al$. Її структура належить до кубічного типу $MnCu_2Al$, який є тернарним варіантом заміщення типу CsCl (рис. 2).

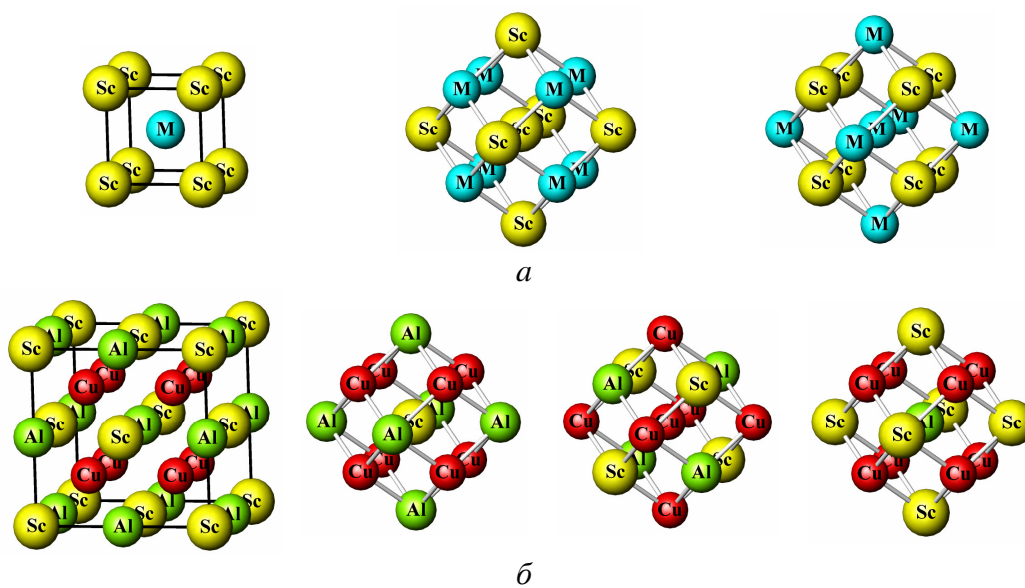


Рис. 2. Елементарна комірка та координаційні многогранники атомів у структурі неперервного ряду твердих розчинів $ScCu_{1-x}Al_x$ (а) та структурі сполуки $ScCu_2Al$ (б)

За переходу від типу CsCl до типу MnCu_2Al параметр елементарної комірки подвоюється, а об'єм, відповідно, збільшується у вісім разів. Співвідношення група-підгрупа між просторовими групами $Pm-3m$ і $Fm-3m$ описують кодом Pb (відмінні елементарні комірки та просторові групи, однакова точкова група) [29]. Тип MnCu_2Al , як і тип CsCl, виводять зі структури типу W ($cI2$, $Im-3m$), однак структуру сполуки ScCu_2Al не можна вивести зі структури $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ ($0 < x \leq 1$) впорядкуванням атомів Cu та Al. Її можна вивести у випадку $x = 0$, тобто зі структури бінарної сполуки ScCu впорядкованою заміною половини атомів Sc на атоми Al. У структурі ScCu_2Al координаційними многогранниками атомів Sc та Al є куби Cu_8 (віддаль від центру до вершини 2,686 Å) з додатковими октаедрами Al_6 або Sc_6 (3,101 Å), відповідно. Атоми Cu розташовані в центрах кубів Sc_4Al_4 (2,686 Å), що є комбінацією тетраєдрів Sc_4 та Al_4 , з шістьма додатковими атомами Cu (3,101 Å). Відповідними поліедрами атомів у структурі неперервного ряду твердих розчинів $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ є: для атомів Sc – куб M_8 (2,81340–2,9887 Å) + октаєдр Sc_6 (3,24864–3,4511 Å), для атомів $M = \text{Cu}_{1-x}\text{Al}_x$ – куб Sc_8 (2,81340–2,9887 Å) + октаєдр M_6 (3,24864–3,4511 Å). Отже, у випадку структури сполуки ScCu_2Al , яка характеризується відсутністю контактів між атомами Sc, простежується зменшення міжатомних віддалей порівняно з близькоспорідненою структурою неперервного ряду твердих розчинів $\text{ScCu}_{1-x}\text{Al}_x$ на 4,5–10,1 %.

1. *Riani P., Arrighi L., Marazza R., Mazzone D., Zanicchi G., Ferro R.* Ternary rare-earth aluminum systems with copper: a review and a contribution to their assessment // *J. Phase Equilib. Diffus.* 2004. Vol. 25. P. 22–52.
2. *Villars P., Cenzual K.* (Eds.) *Pearson's Crystal Data, Crystal Structure Database for Inorganic Compounds*, ASM, Materials Park, Ohio, 2016/17.
3. *Villars P., Cenzual K., Gladyshevskii R.* *Handbook of Inorganic Substances 2016*. Walter de Gruyter, Berlin, 2016, 1877 p.
4. *Преварський А. П., Заречнюк О. С., Черкашин Є. Є., Поліха В. І.* Система Sc–Cu–Al в області 0–33,3 ат. % Sc // *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім.* 1976. Вип. 18. С. 14–16.
5. *Теслюк М. Ю., Протасов В. С.* Кристаллическая структура тройных фаз в системе Sc–Cu–Al // *Кристаллография.* 1965. Т. 10(4). С. 561–562.
6. *Гладішевський Е. І., Шпырка З. М., Коньк М. Б.* Кристаллическая структура соединений в системе Sc–Cu–Al // *Тез. докл. 6 Совещ. Кристал. Неорган. Коорд. Соед.* Львов, 1992. С. 170.
7. *Nakonechna N. Z., Shpyrka Z. M., Konyk M. B., Gladyshevskii E. I.* Phase diagram of the Sc–Cu–Al system // *Coll. Abstr. 6 Int. Conf. Cryst. Chem. Intermet. Compd., Lviv, 1995.* P. 40.
8. *Наконечна Н. З., Шпырка З. М.* Кристалічна структура сполук ScCu_2Al і $\text{ScCu}_{0,6}\text{Al}_{1,4}$ // *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім.* 1996. Вип. 36. С. 29–33.

9. *Ishimasa T., Hirao A., Honma T., Mihalkovic M.* Crystal structure of 1/0-2/1-1/0 Cu–Al–Sc approximant // *Philos. Mag.* 2011. Vol. 91. P. 2594–2602.
10. *Klymentiy N., Semuso N., Pukas S., Tokaychuk Ya., Akselrud L., Gladyshevskii R.* Crystal structure of the ternary compound $Sc_6Cu_{24.1}Al_{11.9}$ // *Solid State Phenom.* 2017. Vol. 257. P. 26–29.
11. *Klymentiy N., Semuso N., Pukas S., Tokaychuk Ya., Akselrud L., Gladyshevskii R.* Crystal structure of the ternary compound $Sc_3Cu_{7.5}Al_{7.5}$ // *Chem. Met. Alloys.* 2016. Vol. 9. P. 78–83.
12. *Young R. A., Sakthivel A., Moss T. S., Paiva-Santos C. O.* DBWS-9411 – an upgrade of the DBWS – programs for Rietveld refinement with PC and mainframe computers // *J. Appl. Crystallogr.* 1995. Vol. 28. P. 366–367.
13. *Kuz'ma Yu. B., Stelmakhovych B. M., Vasyunyk M. I.* Phase equilibria and crystalline structure of the Tb–Cu–Al compounds containing up to 50 at. % Tb // *Russ. Metall.* 1995. Vol. 5. P. 130–136.
14. *Basha A. F., Chechernikov V. I., Sinanyan L. G., Tavansi A.* Magnetic properties of certain terbium alloys with CsCl structure // *Sov. Phys. JETP.* 1977. Vol. 45. P. 808–809.
15. *Kuz'ma Yu. B., Milyan V. V.* Phase equilibria in the system Dy–Cu–Al at 500°C // *Russ. Metall.* 1989. Vol. 1. P. 216–218.
16. *Стельмахович Б. М.* Система Ho–Cu–Al // *Вісн. Львів. ун-ту. Сер. хім.* 1991. Вип. 36. С. 20–24.
17. *Kuz'ma Yu. B., Pan'kiv T. V.* X-ray structural study of the Er–Cu–Al system // *Russ. Metall.* 1989. Vol. 3. P. 208–210.
18. *Kuz'ma Yu. B., Stelmakhovich B. M., Galamushka L. I.* Phase equilibria and crystalline structure of compounds in the Lu–Al and Lu–Cu–Al systems // *Russ. Metall.* 1992. Vol. 1. P. 190–195.
19. *Teatum E., Gschneidner K., Waber J.* Report No. LA-2345, US Department of Commerce, Washington D. C., 1960.
20. *Гладішевський Е. І., Крипякевич П. І., Кузьма Ю. Б., Протасов В. С.* Двойные соединения скандия с переходными металлами и бериллием // *Вопр. теории применения редкоземельных металлов.* 1964. С. 153–155.
21. *Aldred A.T.* Intermediate phases involving scandium // *Trans. Metall. Soc. AIME.* 1962. Vol. 224. P. 1082–1083.
22. *Schuster J. C., Bauer J.* The ternary systems Sc–Al–N and Y–Al–N // *J. Less-Common Met.* 1985. Vol. 109. P. 345–350.
23. *Schob O., Parthé E.* AB compounds with Sc, Y and rare earth metals. I. Scandium and yttrium compounds with CrB and CsCl structure // *Acta Crystallogr.* 1965. Vol. 19. P. 214–224.
24. *Davey W. P., Wick F. G.* The crystal structure of two rare halogen salts // *Phys. Rev.* 1921. Vol. 17. P. 403–404.
25. *Bjurström T., Arnfelt H.* Röntgenanalyse des eisen-bor-systems // *Z. Phys. Chem., Abt. B.* 1929. Vol. 4. P. 469–474.

26. *Van Vucht J. H. N.* Ternary system Th–Ce–Al // *Philips Res. Rep.* 1961. Vol. 16. P. 1–40.
27. *Buschow K. H. J.* Rare earth-aluminium intermetallic compounds of the form RAI and R_3Al_2 // *J. Less-Common Met.* 1965. Vol. 8. P. 209–212.
28. *El Boragy M., Szepan R., Schubert K.* Kristallstruktur von Cu_3Al_{2+} (h) und $CuAl$ (r) // *J. Less-Common Met.* 1972. Vol. 29. P. 133–140.
29. *Hahn T.* (Ed.) *International Tables for Crystallography.* Vol. A. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. The Netherlands. 2002. 911 p.

CONTINUOUS SOLID SOLUTION ScCu–ScAl

N. Klymentiy, S. Pukas, N. Semuso, R. Gladyshevskii

*Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str. 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: klymentiynastasia@gmail.com*

By means of X-ray powder diffraction, the existence at 800°C of a continuous solid solution $ScCu_{1-x}Al_x$ ($x = 0-1$), based on the binary compounds ScCu and ScAl with CsCl-type structure ($cP2$, $Pm-3m$), was established. The Cu and Al atoms form a statistical mixture $M = Cu_{1-x}Al_x$, and upon gradual substitution of Al atoms for Cu atoms the parameter of the cubic unit cell increases, due to the size factor. The shortest interatomic distances in the structure are: Sc– $M = 2.81340(6)$ – $2.9887(3)$ Å, Sc–Sc and M – $M = 3.24864(6)$ – $3.4511(3)$ Å. In the compound $ScCu_2Al$, with the closely related structure type $MnCu_2Al$ ($cF16$, $Fm-3m$), the interatomic distances are shorter by 4.5–10.1 %.

Key words: scandium, copper, aluminum, X-ray diffraction, crystal structure, continuous solid solution.

Стаття надійшла до редколегії 01.11.2016
Прийнята до друку 04.01.2017