

Неорганічна хімія

УДК 544:(344.3+015.35):546:(663'27'26):548.734

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ ПРИ 800 °С СИСТЕМИ Sc–Ni–Si ЗА УЧАСТЮ ТЕРНАРНИХ СПОЛУК Sc₆Ni₁₈Si₁₁ ТА Sc₆Ni₁₆Si₇

Б. Котур*, В. Бабіжецький

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: bohdan.kotur@lnu.edu.ua*

За допомогою методів X-променевого фазового та структурного аналізів (метод порошку) та енергодисперсійної X-променевої спектроскопії у поєднанні з електронним мікроскопом вивчено сплави потрібної системи Sc–Ni–Si складів Sc₁₅Ni₅₅Si₃₀, Sc_{22.5}Ni_{47.5}Si₃₀. Не підтверджено існування при 800 °С тернарної сполуки ~Sc₂Ni₅Si₃. Уточнено частину фазових рівноваг системи Sc–Ni–Si за участю тернарних сполук Sc₆Ni₁₈Si₁₁ та Sc₆Ni₁₆Si₇. Підтверджено належність тернарних сполук Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Sc₆Ni₁₆Si₇, ScNiSi та бінарної Ni₂Si до структурних типів Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Mg₆Cu₁₆Si₇, TiNiSi та Co₂Si, відповідно, та уточнено періоди їхніх елементарних комірок, координати та ізотропні температурні параметри атомів. Для сполуки Sc₆Ni₁₆Si₇ уперше проведено повне структурне дослідження методом X-променевого структурного аналізу порошку та уточнено координати та ізотропні температурні параметри зміщення атомів.

Ключові слова: потрійна система, фазові рівноваги, інтерметалічні сполуки, кристалічна структура.

DOI: <https://doi.org/10.30970/vch.6101.015>

1. Вступ

У працях [1, 2] досліджували окремі сплави системи Sc–Ni–Si з метою виявлення тернарних сполук зі структурами типів (СТ) Mg₆Cu₁₆Si₇ та CeGa₂Al₂ (ThCr₂Si₂), знайдених у споріднених потрібних системах. Такі сполуки були синтезовані та визначені періоди їхніх ґраток. Ці дані наведено у табл. 1. Ізотермічний переріз діаграми стану системи Sc–Ni–Si при 800 °С опубліковано у [3]. Дослідження фазових рівноваг проведено за допомогою X-променевого і мікроскопічного аналізів 376 потрібних та 20 подвійних сплавів, виготовлених в електродуговій печі в атмосфері аргону та гомогенізованих при 800 °С протягом 350 год. Синтезовано 15 тернарних сполук. Серед них підтверджено сполуки Sc₆Ni₁₆Si₇ та ScNi₂Si₂ та виявлено уперше 13 інших сполук. Методами монокристала і порошку визначено кристалічну структуру сполуки ScNiSi (СТ TiNiSi, результати структурного дослідження детально наведено у [4]), а методом порошку – структуру силіциду Sc₃Ni₄Si₄ (СТ Gd₆Cu₈Ge₈). Для двох сполук Sc₁₅Ni₅₀Si₃₅ та Sc₂₀Ni₂₀Si₆₀ рентгеноструктурним методом монокристала (перший етап) визначено ромбічну сингонію та періоди комірки. Для ще двох сполук Sc₁₀Ni₄₅Si₄₅ та Sc₃₂Ni₈Si₆₀ автори [3] орієнтовно визначили сингонію. Структуру семи інших виявлених тернарних силіцидів скандію не вивчали.

Пізнiшi дослідження до 2000 року дали змогу уточнити склади та визначити кристалiчну структуру дев'яти сполук, синтезованих у працi [3]: “Sc₁₅Ni_{62,5}Si_{22,5}” – Sc₃Ni₁₁Si₄ [5]; “Sc_{17,5}Ni₃₀Si_{52,5}” – ScNi₂Si₃ [6]; “Sc₁₅Ni₅₀Si₃₅” – Sc₆Ni₁₈Si₁₁ [7]; “Sc₂₀Ni₂₀Si₆₀” – ScNiSi₃ [8]; “Sc_{33,3}Ni_{51,7}Si₁₅” – ScNi_{1,52-1,49}Si_{0,48-0,51} [9]; “Sc₃₅Ni₂₀Si₄₅” – Sc₃Ni₂Si₄ [10]; “Sc₃₂Ni₈Si₆₀” – ScNi_{0,25}Si_{1,75} [4]; “Sc_{37,5}Ni₂₅Si_{37,5}” – Sc₃Ni₂Si₃ [11]; “Sc₄₄Ni₁₂Si₄₄” – Sc₃NiSi₃ [12]. Кристалографiчні характеристики тернарних сполук наведено у табл. 1.

Таблиця 1

Кристалографiчні характеристики тернарних сполук системи Sc–Ni–Si та бiнарної сполуки Ni₂Si

Table 1

Crystallographic data of the ternary compounds of the Sc–Ni–Si system and the binary compound Ni₂Si

Сполука	*СТ	**СП	***ПГ	Параметри комiрки, нм			Лiт.
				<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>	
ScNi ₆ Si ₆	YCo ₆ Ge ₆	<i>hP7</i>	<i>P6/mmm</i>	0,49208	–	0,38056	14
Sc ₃ Ni ₁₁ Si ₄	Sc ₃ Ni ₁₁ Si ₄	<i>hP36</i>	<i>P6₃/mmc</i>	0,8024	–	0,8429	5, 3
ScNi ₂ Si ₃	ScNi ₂ Si ₃	<i>tI24</i>	<i>I4/mmm</i>	0,3830	–	2,350	6, 3
Sc ₆ Ni ₁₈ Si ₁₁	Sc ₆ Ni ₁₈ Si ₁₁	<i>oI140</i>	<i>Immm</i>	1,7945	1,2223	0,8029	7, 3
				1,7925(2)	1,2231(1)	0,80368(7)	#
Sc ₆ Ni ₁₆ Si ₇	Mg ₆ Cu ₁₆ Si ₇	<i>cF116</i>	<i>Fm3m</i>	1,146	–	–	1, 3
				1,14405(2)			#
ScNi ₂ Si ₂	CeGa ₂ Al ₂	<i>tI10</i>	<i>I4/mmm</i>	0,372	–	0,950	2, 3
				0,3818		0,9567	13
ScNiSi ₃	ScNiSi ₃	<i>oS20</i>	<i>Amm2</i>	0,3815	0,3825	2,062	8, 3
Sc ₃ Ni ₄ Si ₄	Gd ₆ Cu ₈ Ge ₈	<i>oI22</i>	<i>Immm</i>	1,268	0,638	0,389	3, 3
ScNi _{1,52-1,49} Si _{0,48-0,51}	MgZn ₂	<i>hP12</i>	<i>P6₃/mmc</i>	0,4989–	–	0,7730–	9, 3
				0,5000		0,7719	
ScNiSi	TiNiSi	<i>oP12</i>	<i>Pnma</i>	0,6383	0,4011	0,6868	4, 3
				0,64116(7)	0,40256(4)	0,69484(7)	#
Sc ₃ Ni ₂ Si ₄	Sc ₃ Ni ₂ Si ₄	<i>oP36</i>	<i>Pnma</i>	1,1678	0,3976	1,1940	10, 3
ScNi _{0,25} Si _{1,75}	ZrSi ₂	<i>oS12</i>	<i>Cmcm</i>	0,3843	1,468	0,3727	4, 3
Sc ₃ Ni ₂ Si ₃	Hf ₃ Ni ₂ Si ₃	<i>oS32</i>	<i>Cmcm</i>	0,39812	0,9688	1,3111	11, 3
Sc ₃ NiSi ₃	Sc ₃ NiSi ₃	<i>mS28</i>	<i>C2/m</i>	0,9801	0,3974	1,3193	12, 3
					$\beta=114,16^\circ$		
Ni ₂ Si	Co ₂ Si	<i>oP12</i>	<i>Pnma</i>	0,5001	0,3727	0,7054	15
				0,50039(1)	0,37331(1)	0,70665(2)	#

*СТ – структурний тип; **СП – символ Пірсона; ***ПГ – просторова група.

– дані цього дослідження.

Узагальнивши ці дані, Котур і Грац опублікували уточнений ізотермічний переріз діаграми стану системи Sc–Ni–Si при 800 °C [13]. З 15 тернарних сполук кристалiчна структура двох силiцидiв ~Sc₂Ni₉Si₉ та ~Sc₂Ni₅Si₃ залишалась невідомою. Нещодавно, досліджуючи емпіричне правило для ізоструктурних рядiв тернарних сполук систем R–Ni–Si (R = рiдкiсноземельний елемент, РЗМ), автори [14] виготовили сплав складу ScNi₆Si₆ (електродугова плавка з наступною гомогенiзацiєю зразка при 1 070 К упродовж 200–240 год) і за допомогою X-променевого фазового та спектрального аналізу порошку з’ясували, що за такого складу iснує сполука зi структурою типу YCo₆Ge₆. Структурні характеристики сполуки наведено у табл. 1. Ймовiрно, автори [14] уточнили склад сполуки ~Sc₂Ni₉Si₉, уперше синтезованої у [3].

З наведених лiтературних даних бачимо, що у системi Sc–Ni–Si залишається одна тернарна сполука з невідомою структурою. Мета нашої працi – повторно вивчити зразки та фазовi рiвноваги в областi утворення можливої сполуки ~Sc₂Ni₅Si₃.

2. Матеріали та методика експерименту

Методом електродугової плавки наважок вихідних компонентів високої чистоти (99,9 мас. % Sc; 99,92 мас. % Ni; 99,99 мас. % Si) в атмосфері аргону синтезовано два сплави складів *1a.* Sc₁₅Ni₅₅Si₃₀; *2a.* Sc_{22,5}Ni_{47,5}Si₃₀. Зразки гомогенізували у запалянні під вакуумом кварцовій ампулі при 800 °C упродовж 350 год. Після відпалу ампули зі зразками гартували у холодній воді. Склади зразків обрано таким способом, щоб перевірити літературні дані [3] щодо існування сполуки приблизного складу ~Sc₂Ni₅Si₃.

Фазовий склад зразків вивчали за допомогою X-променевого аналізу дифрактограм, одержаних на порошковому дифрактометрі STOE STADI P (CuK α -випромінювання). Параметри кристалічних структур уточнювали за повнопрофільним аналізом отриманих дифрактограм, використовуючи пакет програм WinCSD [16]. Для визначення елементного складу фаз у відполірованих сплавах використовували метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (ЕДХ аналіз) у поєднанні з растровим електронним мікроскопом TESCAN 5130 MM, обладнаним детектором Oxford Instruments AZTEC.

3. Результати досліджень та їх обговорення

Результати вивчення дифрактограм обох зразків показали, що кожен з них містить по три відомі фази. Результати повнопрофільного уточнення дифрактограм наведено у табл. 2. Дифрактограму зразка *2a* подано на рис. 1, а деталі її уточнення – у табл. 3. Уточнені періоди елементарних комірок тернарних фаз Sc₆Ni₁₆Si₇, Sc₆Ni₁₈Si₁₁, ScNiSi та бінарної фази Ni₂Si наведено у табл. 1. Їхні значення добре узгоджуються з літературними даними. Отже, наведені експериментальні результати не підтверджують дані [3] про існування тернарної сполуки ~Sc₂Ni₅Si₃. Уточнені фазові рівноваги дослідженої частини ізотермічного перетину при 800 °C потрійної системи Sc–Ni–Si подано на рис. 2.

Таблиця 2

Результати X-променевого фазового аналізу сплавів системи Sc–Ni–Si при 800 °C

Table 2

Results of the X-ray phase analysis of the Sc–Ni–Si alloys at 800 °C

Склад сплаву	Фазовий склад зразка та вміст фаз у сплаві	R _p
<i>1a.</i> Sc ₁₅ Ni ₅₅ Si ₃₀	1 – Sc ₆ Ni ₁₆ Si ₇ , 24 % 2 – Sc ₆ Ni ₁₈ Si ₁₁ , 59 % 3 – Ni ₂ Si, 17%	0,17
<i>2a.</i> Sc _{22,5} Ni _{47,5} Si ₃₀	1 – Sc ₆ Ni ₁₆ Si ₇ , 70 % 2 – ScNiSi, 12 % 3 – Sc ₆ Ni ₁₈ Si ₁₁ , 18%	0,12

Таблиця 3

Деталі уточнення дифрактограми зразка складу *2a.* Sc_{22,5}Ni_{47,5}Si₃₀

Table 3

Refinement details of the X-ray diffraction pattern for *2a.* Sc_{22,5}Ni_{47,5}Si₃₀ sample

Фаза	Sc ₆ Ni ₁₆ Si ₇	ScNiSi	Sc ₆ Ni ₁₈ Si ₁₁
Вміст фази у зразку (за дифрактограмою), мас. %	69,95(9)	12,30(5)	17,7(1)
Фактори розбіжності, %: R _{b(I)}	2,3	3,4	8,9
		12,2; 15,0; 1,1	
Дифрактометр		STOE STADI P	
Випромінювання і довжина хвилі, Å		CuK α , 1,5406	
2 θ _{max} ; sin θ / λ _{max}		110,0; 0,522	
Крок сканування (град.), час експозиції за крок (с)		0,015; 120	

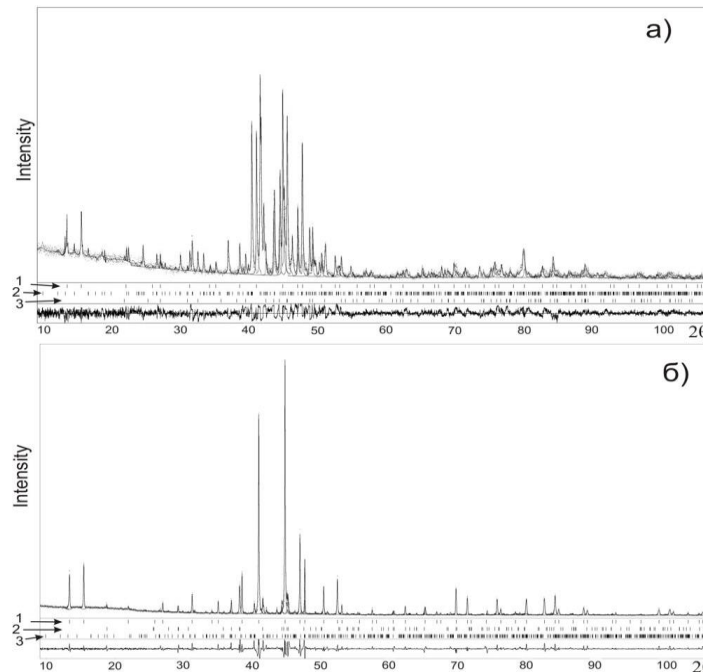


Рис. 1. Експериментальна, теоретична та різницева (внизу) дифрактограми зразків складу $\text{Sc}_{15}\text{Ni}_{55}\text{Si}_{30}$ (а) та $\text{Sc}_{22.5}\text{Ni}_{47.5}\text{Si}_{30}$ (б). Уточнені положення піків позначені вертикальними лініями для фаз: 1 – $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (а), $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (б); 2 – $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$ (а), ScNiSi (б); 3 – Ni_2Si (а), $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$ (б)

Fig. 1. Observed (dots), calculated (line) and differential (bottom line) XRD profiles for $\text{Sc}_{15}\text{Ni}_{55}\text{Si}_{30}$ (a) and $\text{Sc}_{22.5}\text{Ni}_{47.5}\text{Si}_{30}$ (b). Refined peak positions are marked as vertical bars for the phases: 1 – $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (a), $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (b); 2 – $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$ (a), ScNiSi (b); 3 – Ni_2Si (a), $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$ (b)

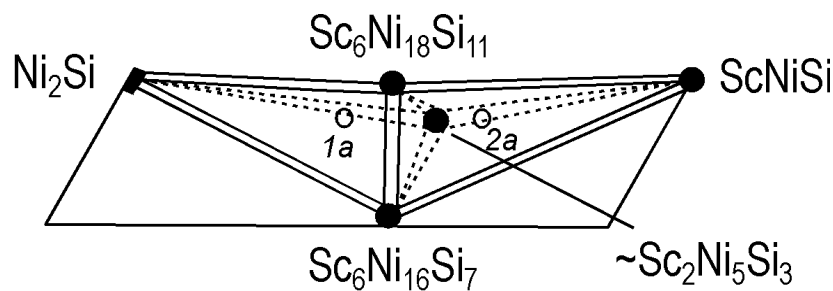


Рис. 2. Частина уточнених фазових рівноваг при 800 °C системи Sc–Ni–Si. Пунктирними лініями позначено фазові рівноваги за даними праці [3]. 1a та 2a – склади досліджених сплавів

Fig. 2. Part of the refined phase equilibria at 800 °C of the system Sc–Ni–Si. Phase equilibria according to the data of ref. [3] are presented by dashed lines. 1a and 2a are the compositions of the investigated alloys

Результати ЕДХ аналізу добре узгоджуються із даними X-променевого аналізу та подано на рис. 3.

Повнопрофільним аналізом Рітвельда дифрактограми порошку сплаву 2a вперше уточнено координати атомів у структурі сполуки $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$, що кристалізується у кубічній структурі типу $\text{Mg}_6\text{Cu}_{16}\text{Si}_7$, надструктурній до бінарного типу $\text{Th}_6\text{Mn}_{23}$. Ці дані наведено у табл. 4.

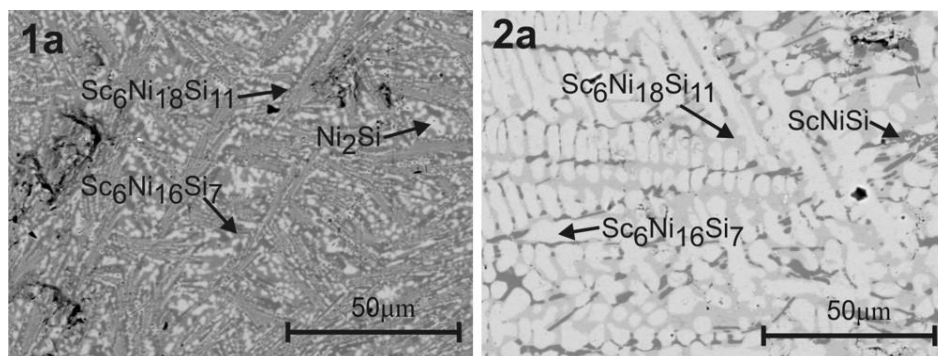


Рис. 3. Фотографії мікросліфів зразків $\text{Sc}_{15}\text{Ni}_{55}\text{Si}_{30}$ (1a) та $\text{Sc}_{22,5}\text{Ni}_{47,5}\text{Si}_{30}$ (2a). Фазовий склад узгоджено за результатами X-променевого аналізу та ЕДХ

Fig 3. Backscattered electron image of the annealed bulk samples: $\text{Sc}_{15}\text{Ni}_{55}\text{Si}_{30}$ (1a) and $\text{Sc}_{22,5}\text{Ni}_{47,5}\text{Si}_{30}$ (2a). Phase composition is in accordance with the XRD and EDX data

Таблиця 4

Координати та ізотропні температурні параметри зміщення атомів (B_{iso}) у структурі сполуки $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (просторова група $Fm\bar{3}m$)

Table 4

Fractional atomic coordinates and their displacement parameters (B_{iso}) for $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ (space group $Fm\bar{3}m$)

Атом	ПСТ*	x	y	z	$B_{\text{iso}}, 10^2 \text{ nm}^2$
Sc	24e	0,2916(4)	0	0	0,47(9)
Ni1	32f	0,1193(2)	x	x	0,40(9)
Ni2	32f	0,3309(2)	x	x	0,31(8)
Si1	24d	0	1/4	1/4	0,5(2)
Si2	4a	0	0	0	0,9(5)

*ПСТ – правильна система точок.

4. Висновки

За результатами проведених досліджень не підтверджено існування при 800 °C тернарної сполуки $\sim\text{Sc}_2\text{Ni}_5\text{Si}_3$. Уточнено частину фазових рівноваг системи Sc–Ni–Si за участю тернарних сполук $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$ та $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$. Підтверджено належність тернарних сполук $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$, $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$, ScNiSi та бінарної Ni_2Si до структурних типів $\text{Sc}_6\text{Ni}_{18}\text{Si}_{11}$, $\text{Mg}_6\text{Cu}_{16}\text{Si}_7$, TiNiSi та Co_2Si та уточнено періоди їхніх елементарних комірок. Для сполуки $\text{Sc}_6\text{Ni}_{16}\text{Si}_7$ вперше проведено повне структурне дослідження методом X-променевого структурного аналізу порошку та уточнено координати та ізотропні температурні параметри зміщення атомів.

1. Gladyshevsky E. I., Markiv V. Ya., Kuzma Yu. B. New ternary compounds with a structure of the $Mg_6Cu_{16}Si_7$ type // *Dopov. Acad. Nauk Ukrain. RSR*. 1962. P. 481–483 (in Ukrainian).
2. Voroshilov Yu. V., Markiv V. Ya., Gladyshevsky E. I. System zirconium-nickel-silicon // *Izvestiya Akad. Nauk SSSR. Neorgan. Materials*. 1967. Vol. 3. P. 1404–1408 (in Russian).
3. Bodak O. I., Kotur B. Ya., Gladyshevsky E. I. The system scandium-nickel-silicon // *Dopov. Acad. Nauk Ukrain. RSR. Ser. A*. 1976. No. 7. P. 655–657 (in Ukrainian).
4. Kotur B. Ya., Bodak O. I. New representatives of structure types $TiNiSi$ and $ZrSi_2$ in the systems $Sc-Mn(Fe, Co, Ni)-Si$ // *Kristallografiya*. 1977. Vol. 22. P. 1209–1213 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1977. Vol. 22. P. 687].
5. Kotur B. Ya., Sikirica M., Bodak O. I., Gladyshevsky E. I. Crystal structure of compound $Sc_3Ni_{11}Si_4$ // *Kristallografiya*. 1983. Vol. 28. P. 658–661 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1983. Vol. 28. P. 378].
6. Kotur B. Ya., Bodak O. I., Gladyshevsky E. I. Crystal structure of compound $ScNi_2Si_3$ // *Kristallografiya*. 1978. Vol. 23. P. 189–190 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1978. Vol. 23. P. 101].
7. Kotur B. Ya., Gladyshevsky E. I., Sikirica M. Structure of silicide $Sc_6Ni_{18}Si_{11}$ – new structure type of intermetallic compounds // *Kristallografiya*. 1986. Vol. 31. P. 796–799 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1986. Vol. 31. P. 470].
8. Kotur B. Ya., Bodak O. I., Mys'kiv M. G., Gladyshevsky E. I. Crystal structure of compound $ScNiSi_3$ // *Kristallografiya*. 1977. Vol. 22. P. 267–270 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1977. Vol. 22. P. 151].
9. Kotur B. Ya. Crystal structure of compounds Sc_2M_3Si ($M=Fe, Co, Ni$) // *Dopov. Acad. Nauk Ukrain. RSR. Ser. A*. 1977. No. 2. P. 164–165 (in Ukrainian).
10. Zhao G. T., Parthe E. Structure of $Sc_3Ni_2Si_4$, an intergrowth of CrB , $TiNiSi$ and $CaBe_2Ge_2$ columns // *J. Less-Common Met.* 1989. Vol. 154. P. 31–37. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(89\)90167-7](https://doi.org/10.1016/0022-5088(89)90167-7)
11. Zhao G. T., Parthe E. Structures of $Sc_3Ni_2Si_4$ and $Sc_3Ni_2Si_3$ interpreted as an intergrowth of simple parent types // Twelfth Europ. Crystallogr. Meeting, Moscow, 20–29 August, 1989. Vol. 2. P. 182.
12. Kotur B. Ya., Gladyshevsky E. I. Crystal structure of Sc_3NiSi_3 // *Kristallografiya*. 1983. Vol. 28. P. 461–464 (in Russian). [*Sov. Phys.-Crystallogr.* 1983. Vol. 28. P. 271].
13. Kotur B. Ya., Gratz E. Scandium alloy systems and intermetallics. In: *Handbook on the Physics and Chemistry of the Rare Earths*. Eds. K. A. Gschneidner, Jr. and L.-R. Eyring. Vol. 27, Ch. 175. 1999. Amsterdam: Elsevier Science B. V. P. 339–533.
14. Morozkin A. V., Knotko A. V., Garshev A. V., Yapaskurt V. O., Nirmala R., Quezada S., Malik S. K. The $Ce-Ni-Si$ system as a representative of the rare earth-Ni-Si family: isothermal section and new rare-earth nickel silicides // *J. Solid State Chem.* 2016. Vol. 243. P. 290–303. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2016.09.001>
15. Landrum G. A., Hoffmann R., Evers J., Boysen H. The $TiNiSi$ family of compounds: structure and bonding // *Inorg. Chem.* 1998. Vol. 37. P. 5754–5763. DOI: <http://doi.org/10.1021/ic9802223e>
16. Akselrud L., Grin Y. WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) // *J. Appl. Crystallogr.* 2014. Vol. 47. P. 803–805. DOI: <https://doi.org/10.1107/S1600576714001058>

**PHASE EQUILIBRIA AT 800 °C OF THE SYSTEM Sc–Ni–Si
WITH PARTICIPATION OF THE TERNARY
COMPOUNDS Sc₆Ni₁₈Si₁₁ AND Sc₆Ni₁₆Si₇**

B. Kotur*, V. Babizhetskyy

*Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: bohdan.kotur@lnu.edu.ua*

The Sc–Ni–Si alloys of compositions Sc₁₅Ni₅₅Si₃₀ and Sc_{22.5}Ni_{47.5}Si₃₀ have been investigated by means of X-ray diffraction (XRD) phase and structure analysis (powder diffractometer STOE STADI P, CuK α -radiation, Rietveld XRD profile refinement, WinCSD programs package) and energy dispersion X-ray spectroscopy (EDX) combined with the electronic microscopy (TESCAN 5130 MM, detector Oxford Instruments AZTEC). The alloys were prepared by arc melting of the initial components of high purity (not less than 99.9 wt. %) under argon and subsequent homogenizing the ingots in the evacuated quartz ampoule at 800 °C for 340 h. Part of the phase equilibria at 800 °C of the Sc–Ni–Si ternary system with participation of the ternary compounds Sc₆Ni₁₈Si₁₁ and Sc₆Ni₁₆Si₇ have been refined. The alloy Sc₁₅Ni₅₅Si₃₀ consisted of three phases: Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Sc₆Ni₁₆Si₇ and Ni₂Si, while the alloy Sc_{22.5}Ni_{47.5}Si₃₀ contained Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Sc₆Ni₁₆Si₇ and ScNiSi. The reported earlier ternary compound ~Sc₂Ni₅Si₃ was not confirmed to occur at 800 °C. The membership of the ternary compounds Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Sc₆Ni₁₆Si₇, ScNiSi and binary Ni₂Si to the structure types Sc₆Ni₁₈Si₁₁, Mg₆Cu₁₆Si₇, TiNiSi and Co₂Si, respectively, was confirmed, and their crystal structure parameters were refined. For the Sc₆Ni₁₆Si₇ compound a complete crystal structure study has been performed for the first time, atomic coordinates and their isotropic temperature parameters were refined: space group *Fm3m*, Pearson's symbol *cF116*, *a*=1.14405(2) nm, 24Sc in 24e: *x*, 0, 0, *x*=0.2916(4), *B*_{iso}=0.47(9)·10⁻² nm²; 32Ni1 in 32f: *x*, *x*, 0, *x*=0.1193(2), *B*_{iso}=0.40(9)·10⁻² nm²; 32Ni2 in 32f: *x*, *x*, 0, *x*=0.3309(2), *B*_{iso}=0.31(8)·10⁻² nm²; 24Si1 in 24d: 0, 1/4, 1/4, *B*_{iso}=0.5(2)·10⁻² nm²; 4Si2 in 4a: 0, 0, 0, *B*_{iso}=0.9(5)·10⁻² nm².

Keywords: ternary system, phase equilibria, intermetallic compounds, crystal structure.

Стаття надійшла до редколегії 01.11.2019

Прийнята до друку 14.01.2020