

УДК 546.57.621.666

КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА НОВОГО ТЕРНАРНОГО АЛЮМІНІДУ $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

О. Жак*, О. Каричорт, Т. Горецька, О. Дашинич

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

Рентгеноструктурним методом полікристала вивчено кристалічну структуру нового тернарного алюмініду $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$: просторова група $R\bar{3}m$, символ Пірсона $hR36$, структурний тип PuNi_3 , $a = 0,55049(1)$ нм, $c = 2,61415(6)$ нм, $R_1 = 0,0450$; $R_p = 0,0314$; $wR_p = 0,0430$. У структурі сполуки простежується часткове впорядкування у розташуванні атомів меншого розміру, зокрема, правильна система точок $6c$ повністю зайнята атомами Ag, натомість у позиціях $3b$ та $18h$ міститься статистична суміш атомів Ag і Al. Новий алюмінід перебуває у термодинамічній рівновазі із тернарними сполуками $\text{ErAg}_{2,5}\text{Al}_{2,5}$ (структура типу $\text{DyAg}_{2,4}\text{Al}_{2,6}$) та $\text{Er}_8\text{Ag}_{17}\text{Al}_{49}$ (структура типу $\text{Yb}_8\text{Cu}_{17}\text{Al}_{49}$).

Ключові слова: кристалічна структура, метод полікристала, алюмінід, ербій, аргентум.

DOI: <https://doi.org/10.30970/vch.6201.061>

1. Вступ

Взаємодія алюмінію з перехідними і рідкісноземельними металами (РЗМ) не є повністю вивченою. Серед потрійних систем з РЗМ ітрієвої підгрупи систематично вивчено п'ять: Y-Ag-Al [1], Gd-Ag-Al [2], Tb-Ag-Al [3], Dy-Ag-Al [4] і Ho-Ag-Al [5]. Для цих систем побудовано ізотермічні перерізи діаграм стану за температури 500 або 600 °С та виявлено утворення від шести до восьми тернарних алюмінідів у кожній із досліджених систем. Інші системи Ln-Ag-Al , де Ln – важкий рідкісноземельний метал, вивчали лише з метою синтезу окремих тернарних сполук та визначення їхніх кристалічних структур.

У системі Er-Ag-Al сьогодні відомо про існування трьох тернарних алюмінідів: $\text{Er}_{1,75}\text{Ag}_{8,1}\text{Al}_{9,2}$ з гексагональною структурою типу $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ [6], $\text{Er}_8\text{Ag}_{17}\text{Al}_{49}$ з тетрагональною структурою типу $\text{Yb}_8\text{Cu}_{17}\text{Al}_{49}$ [7] та $\text{ErAg}_{2,5}\text{Al}_{2,5}$ з гексагональною структурою типу $\text{DyAg}_{2,4}\text{Al}_{2,6}$ [8], причому для жодної із цих сполук не було повністю вивчено розподіл атомів у кристалографічних позиціях, натомість у літературі наведено лише параметри елементарних комірок та зазначено найбільш імовірний структурний тип для цих сполук.

Під час систематичного дослідження взаємодії компонентів у потрійній системі Er-Ag-Al за температури 600 °С виявлено нову тернарну сполуку складу $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$, результати вивчення кристалічної структури якої є предметом цієї публікації.

2. Матеріали та методика експерименту

Як вихідні матеріали для синтезу зразків використовували компактні метали такої чистоти (мас. част. основного компонента): ербій (0,9999, Alfa-Aesar, Johnson Matthey Company), срібло (0,9995), алюміній (0,9999). Наважки сплавів розраховували на 0,6 г загальної маси шихти. Для синтезу сплавів шматочки трьох компонентів, зважені у відповідному співвідношенні, сплавляли в електродуговій печі з вольфрамовим електродом, що не витрачається, на мідному поді, охолоджуваному проточною водою, в інертній атмосфері очищеного аргону (Тігетер). Для ліпшої гомогенізації сплави перевертали на другий бік і повторно переплавляли. Гомогенізувальний відпал одержаних сплавів виконували у вакуумованих кварцових ампулах за температури 600 °С впродовж не менш ніж 700 год. Сплави гартували у холодній воді, не розбиваючи ампул. Склад зразків контролювали зважуванням. Якщо втрати під час синтезу і відпалювання не перевищували 2 % від маси вихідних компонентів, то склад зразка вважали таким, що збігається зі складом шихти.

Рентгенівський фазовий та структурний аналіз синтезованих зразків виконували за дифрактограмами полікристалічних зразків, отриманими за допомогою автоматичного порошкового дифрактометра Huber Imaging Plate Guinier Camera G670 (відфільтроване $\text{CuK}_{\alpha 1}$ -випромінювання, $\lambda = 0,154056$ нм; межі поміру кута 2θ $3,503 \leq 2\theta \leq 99,99^\circ$; крок $0,01^\circ$ кута 2θ , час сканування в точці 250 с).

Усі обчислення, пов'язані з уточненням параметрів елементарних комірок сполук, а також координат, коефіцієнтів заповнення позицій і параметрів теплового зміщення атомів у кристалічних структурах тернарних сполук, виконували повнопрофільним методом Рітвельда [9] за допомогою комплексу програм для фазового і структурного аналізу WinCSD [10].

3. Результати дослідження та їх обговорення

Дифрактограми відпалених при 600 °С сплавів вихідних складів $\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,20}\text{Al}_{0,55}$ та $\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,17}\text{Al}_{0,58}$ містили однакові відбиття головної фази, які успішно проіндексували в ромбоєдричній сингонії (просторова група (ПГ) $R\text{-}3m$) з параметрами елементарних комірок, які наведено в табл. 1. Аналіз літературних даних засвідчив, що подібні величини елементарної комірки притаманні тернарним алюмінідам $\text{Gd}_3\text{Ag}_2\text{Al}_7$ [2], $\text{Y}_3\text{Ag}_2\text{Al}_7$ [1, 11], $\text{TbAg}_{0,9}\text{Al}_{2,1}$ [3], $\text{HoAg}_{0,73}\text{Al}_{2,27}$ [5] та $\text{YbAg}_{0,7}\text{Al}_{2,3}$ [12], які мають кристалічні структури типу PuNi_3 (у разі сполук з тербієм, гольмієм та ітербієм) або його упорядкованої надструктури типу $\text{Ca}_3\text{Cu}_2\text{Al}_7$ (у разі сполук з ітрієм та гадолінієм). Спосіб розташування ліній головної фази на дифрактограмах зазначених зразків та їхні інтенсивності підтверджували висловлене припущення про належність нового алюмініду до цього структурного типу.

Дифрактограми обох сплавів містили також лише поодинокі відбиття, що відповідали незначним домішкам відомих раніше тернарних алюмінідів $\text{ErAg}_{2,5}\text{Al}_{2,5}$ та $\text{Er}_8\text{Ag}_{17}\text{Al}_{49}$, тому вдалося повністю уточнити кристалічну структуру нового алюмініду рентгеноструктурним методом полікристала.

Умови експериментального дослідження структури та уточнені параметри елементарної комірки нової сполуки наведено в табл. 1. Як стартову модель використали координати атомів у кристалічній структурі тернарного алюмініду ітрію $\text{Y}_3\text{Ag}_2\text{Al}_7$, яку раніше повністю вивчено рентгеноструктурним методом порошку [10]. Після уточнення структури нової сполуки на різницевому синтезі Фур'є не було виявлено додаткових максимумів електронної густини.

Таблиця 1

Кристаліграфічні характеристики та умови уточнення структури сполуки $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Table 1

Crystal data and structure refinement details for the compound $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Вихідний склад зразка	$\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,20}\text{Al}_{0,55}$	$\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,17}\text{Al}_{0,58}$
Емпірична формула	$\text{ErAg}_{0,77(1)}\text{Al}_{2,23(1)}$	або $\text{Er}(\text{Ag}_{0,26}\text{Al}_{0,74})_3$
Структурний тип		PuNi_3
Просторова група		$R - 3m$
Кількість формульних одиниць, Z		$Z = 9$
Параметри елементарної комірки:		
a , нм	0,55044(1)	0,55049(1)
c , нм	2,61829(4)	2,61415(6)
V , нм ³	0,68701(3)	0,68606(4)
Обчислена густина, г/см ³	6,7528(3)	6,7619(4)
Абсорбційний коефіцієнт, см ⁻¹	944,78	946,00
Дифрактометр		Guinier G670
Випромінювання і довжина хвилі, нм		$\text{CuK}\alpha_1, \lambda = 0,154056$
Кількість атомів у комірі/позицій		36 / 5
Кількість параметрів для уточнення		10
$2\theta_{\text{max}}$ і $(\sin\theta/\lambda)_{\text{max}}$		100,30; 0,498
R -фактори: R_1 ; R_p ; wR_p	0,0480; 0,0314; 0,0430	0,0569; 0,0383; 0,0645

Кінцеві уточнені координати атомів, коефіцієнти заповнення кристаліграфічних позицій атомами Er, Ag та Al, а також параметри їхнього теплового зміщення в ізотропному наближенні наведено в табл. 2. У дослідженій структурі простежується часткове впорядкування у розташуванні атомів меншого розміру, зокрема, кристаліграфічна позиція $6c$ повністю зайнята лише атомами Ag, натомість у позиціях $3b$ та $18h$ міститься статистична суміш атомів Ag і Al з переважанням останніх. Відповідно, не утворюється впорядкована надструктура типу $\text{Ca}_3\text{Cu}_2\text{Al}_7$, як у разі сполук $\text{Gd}_3\text{Ag}_2\text{Al}_7$ та $\text{Y}_3\text{Ag}_2\text{Al}_7$, а реалізується тип PuNi_3 як для алюмінідів $\text{TbAg}_{0,9}\text{Al}_{2,1}$, $\text{HoAg}_{0,73}\text{Al}_{2,27}$ та $\text{YbAg}_{0,7}\text{Al}_{2,3}$. Розрахований склад нової сполуки можна записати формулами $\text{ErAg}_{0,77(1)}\text{Al}_{2,23(1)}$ або $\text{Er}(\text{Ag}_{0,26}\text{Al}_{0,74})_3$. Експериментальна і теоретично обчислена дифрактограми нової сполуки $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$ (рис. 1) добре узгоджуються між собою.

Обчислений склад нового алюмініду збігається за результатами уточнення коефіцієнтів заповнення кристаліграфічних позицій $3b$ та $18h$ атомами статистичної суміші, отриманими за дифрактограмами вихідних зразків з більшим та з меншим вмістом алюмінію, що засвідчує відсутність помітної області гомогенності у цієї фази. Варто зазначити, що структура типу PuNi_3 у всіх досліджених сьогодні системах $Ln\text{-Ag-Al}$ реалізується у вузькому концентраційному інтервалі і практично завжди характеризується сталим складом.

Міжатомні віддалі у структурі алюмініду $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$ (див. табл. 3; наведені у таблиці віддалі обчислено за уточненими координатами атомів, отриманими для зразка вихідного складу $\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,20}\text{Al}_{0,55}$) практично збігаються з відповідними сумами атомних радіусів чистих компонентів ($r_{\text{Er}} = 0,1743$ нм, $r_{\text{Ag}} = 0,1445$ нм, $r_{\text{Al}} = 0,1432$ нм [13]).

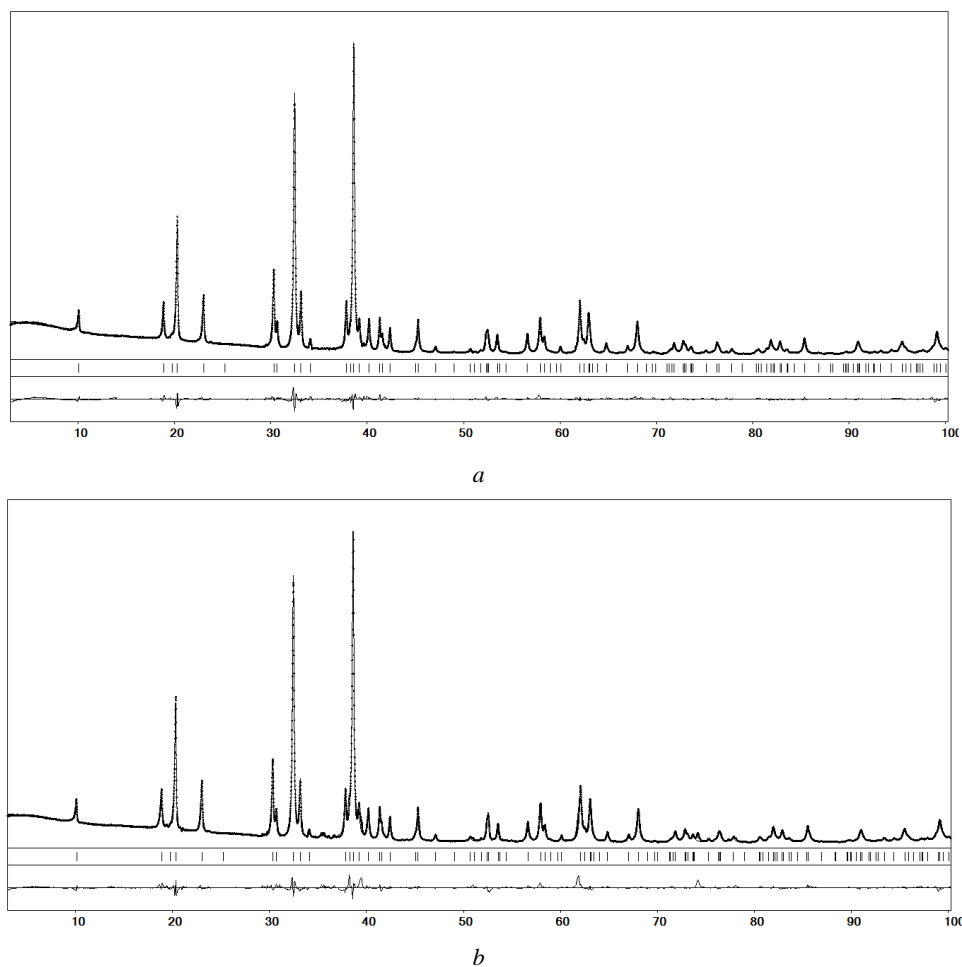


Рис. 1. Експериментальна (точки) і розрахована (лінія) дифрактограми сполуки $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ та різницева діаграма ($\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання): *a* – для зразка вихідного складу $\text{Er}_{0.25}\text{Ag}_{0.20}\text{Al}_{0.55}$; *b* – для зразка вихідного складу $\text{Er}_{0.25}\text{Ag}_{0.17}\text{Al}_{0.58}$

Fig. 1. Experimental (dots) and calculated (lines) powder patterns of the compound $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ and difference diagram ($\text{CuK}\alpha_1$ -radiation): *a* – for the sample with the starting composition $\text{Er}_{0.25}\text{Ag}_{0.20}\text{Al}_{0.55}$; *b* – for the sample with the starting composition $\text{Er}_{0.25}\text{Ag}_{0.17}\text{Al}_{0.58}$

Максимальне скорочення віддалей, яке простежується між атомами статистичної суміші *M1* та *M2* ($\delta=0,2682(2)$ нм), не перевищує 7% від суми металевих радіусів аргентуму та алюмінію, що є свідченням металевого типу зв'язку у сполуці.

Проекцію кристалічної структури алюмініду $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ на площину *XU* та координаційні поліедри атомів наведено на рис. 2.

Таблиця 2

Координати і параметри теплового зміщення атомів у структурі сполуки $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Table 2

Coordinates and isotropic displacement parameters ($\times 10^2 \text{ nm}^2$) of atoms
 in the structure of the compound $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Атоми	ПСТ	x/a	y/b	z/c	$B_{\text{ізо}}, \text{ nm}^2 \times 10^2$
Зразок вихідного складу $\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,20}\text{Al}_{0,55}$					
Er1	3a	0	0	0	0,86(3)
Er2	6c	0	0	0,14241(3)	0,93(2)
Ag	6c	0	0	0,33539(4)	1,14(2)
M1	3b	0	0	1/2	1,66(11)
(0,901(4)Al + 0,099(4)Ag)					
M2	18h	0,1695(3)	-x	0,41826(8)	1,19(4)
(0,965(1)Al + 0,035(1)Ag)					
Зразок вихідного складу $\text{Er}_{0,25}\text{Ag}_{0,17}\text{Al}_{0,58}$					
Er1	3a	0	0	0	1,01(4)
Er2	6c	0	0	0,14247(4)	1,07(3)
Ag	6c	0	0	0,33592(6)	1,15(3)
M1	3b	0	0	1/2	1,09(15)
(0,940(4)Al + 0,060(4)Ag)					
M2	18h	0,1682(4)	-x	0,4182(1)	1,33(6)
(0,959(2)Al + 0,041(2)Ag)					

Таблиця 3

Міжатомні віддалі (δ , нм) та координаційні числа атомів
 у структурі сполуки $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Table 3

Interatomic distances (δ , nm) and coordination numbers of atoms
 in the structure of the compound $\text{ErAg}_{0,77}\text{Al}_{2,23}$

Атоми	Віддалі (δ , нм)	КЧ
Er1	- 6Ag	0,3178(1)
	- 12M2	0,3538(2)
	- 2Er2	0,37286(8)
Er2	- 6M2	0,3137(2)
	- 3M2	0,3185(2)
	- 3M1	0,32408(2)
	- 3Er2	0,34225(4)
	- 1Er1	0,37286(8)
Ag	- 3M2	0,2706(2)
	- 3M2	0,2761(2)
	- 3Er1	0,3178(1)
	- 3Ag	0,31798(1)
M1	- 6M2	0,2682(2)
	- 6Er2	0,32408(2)
M2	- 1M1	0,2682(2)
	- 2M2	0,2705(2)
	- 1Ag	0,2706(2)
	- 1Ag	0,2761(2)
	- 2M2	0,2800(2)
	- 2Er2	0,3137(2)
	- 1Er2	0,3185(2)
- 2Er1	0,3538(2)	

Структурний тип PuNi_3 (інша назва NbBe_3) є похідним від типів CaCu_5 і MgZn_2 . Атоми ербію містяться у 20-вершинниках типу CaCu_5 та лавесівських 16-вершинниках, атоми аргентуму та частина атомів статистичної суміші $M2$ – в ікосаедрах, атоми $M1$ – у 12-вершинниках типу CaCu_5 , які відрізняються від ікосаедра симетрією і кількістю ребер, що сходяться в одній вершині.

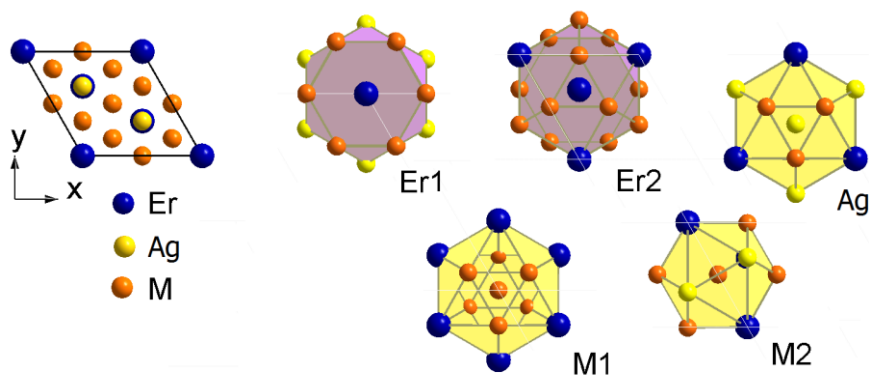


Рис. 2. Проекція структури $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ на площину XY та координаційні поліедри атомів

Fig. 2. Projection of the $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ structure onto XY plane and coordination polyhedra of the atoms

Синтезований новий тернарний алюмінід $\text{ErAg}_{0.77}\text{Al}_{2.23}$ доповнює ряд ізоструктурних сполук зі спорідненими структурами типу PuNi_3 або його надструктури $\text{Ca}_3\text{Cu}_2\text{Al}_7$, які утворюються з важкими РЗМ та сріблом, і дає змогу прогнозувати існування нових сполук такого самого структурного типу за участю Dy , Tm та Lu .

4. Висновок

Отже, за результатами уточнення координат, коефіцієнтів заповнення кристалографічних позицій і параметрів теплового зміщення атомів рентгеноструктурним методом полікристала підтверджено висловлене припущення про те, що новий тернарний алюмінід ербію та аргентуму кристалізується у ромбодринчній кристалічній структурі типу PuNi_3 з частково упорядкованим розташуванням атомів Ag та Al у правильних системах точок просторової групи $R\text{-}3m$, а уточнений склад сполуки описує формула $\text{ErAg}_{0.77(1)}\text{Al}_{2.23(1)}$ або $\text{Er}(\text{Ag}_{0.26}\text{Al}_{0.74})_3$. За температури $600\text{ }^\circ\text{C}$ новий алюмінід перебуває у термодинамічній рівновазі з раніше відомими тернарними сполуками $\text{ErAg}_{2.5}\text{Al}_{2.5}$ (СТ $\text{DyAg}_{2.4}\text{Al}_{2.6}$) та $\text{Er}_8\text{Ag}_{17}\text{Al}_{49}$ (СТ $\text{Yb}_8\text{Cu}_{17}\text{Al}_{49}$).

5. Подяка

Автори вдячні канд. хім. наук Антонишин І.С. (Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids, Dresden) за допомогу в отриманні дифрактограм для полікристалічних зразків.

1. *Gumenyuk T. M., Kuz'ma Yu. B., Stel'makhovych B. M.* The Y–Ag–Al system // *J. Alloys Compd.* 2000. Vol. 299. P. 213–216.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(99\)00790-2](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(99)00790-2)
2. *Stel'makhovych B. M., Zhak O. V., Bilas N. R., Kuz'ma Yu. B.* The Gd–Ag–Al system // *J. Alloys Compd.* 2004. Vol. 363. P. 243–248.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(03\)00480-8](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(03)00480-8)
3. *Gumenyuk R. V., Kuz'ma Yu. B., Stel'makhovych B. M.* The Tb–Ag–Al system // *J. Alloys Compd.* 2001. Vol. 237. P. 3–7.
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(01\)01011-8](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(01)01011-8)
4. *Stel'makhovych B. M., Kuz'ma Yu. B.* Phase diagram of the Dy–Ag–Al system at 870 K // *Dopovidi NAN Ukraine.* 1994. No. 3. P. 86–89. (In Ukrainian)
5. *Stel'makhovych B., Zhak O.* The Ho–Ag–Al system // *Abstr. of XIII scientific conference “Lviv Chemistry Reading–2011”.* May, 29 – June, 1 2011. Lviv: Publ. center of Ivan Franko National University of Lviv, 2011. P. H73. (In Ukrainian)
6. *Stel'makhovych B. M., Kuz'ma Yu. B.* New compounds with the crystal structure of the Th₂Ni₁₇-type in the RE–Ag–Al systems // *Dokl. Akad. Nauk Ukr SSR.* 1991. No. 7. P. 135–140. (In Russian)
7. *Stel'makhovych B. M., Kuz'ma Yu. B.* New compounds in the systems RE–Ag–Al and their crystal structures // *Metally.* 1992. No. 3. P. 220–225. (In Russian)
8. *Denysyuk O. V., Stel'makhovych B. M., Kuz'ma Yu. B.* Crystal structures of the new compounds Ln(Ag_{0.5}Al_{0.5})₅ (Ln = Y, La–Lu) // *Metally.* 1993. No. 5. P. 213–215. (In Russian)
9. *Masciocchi N.* The contribution of powder diffraction methods to structural crystallography: Rietveld and ab-initio techniques // *The Rigaku J.* 1997. Vol. 14. Is. 2. P. 9–16.
10. *Akselrud L., Grin Yu.* WinCSD: Software package for crystallographic calculations (Version 4) // *J. Appl. Cryst.* 2014. Vol. 47. P. 803–805.
DOI: <https://doi.org/10.1107/S1600576714001058>
11. *Stel'makhovych B. M., Gumenyuk T. M., Kuz'ma Yu. B.* Ternary compounds in the Y–Ag–Al system and their crystal structures // *J. Alloys Compd.* 2000. Vol. 298. P.164–168. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(99\)00634-9](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(99)00634-9)
12. *Cordier G., Crech E., Dörsam G. et al.* Neue ternäre Calcium- und Ytterbium-Silber-Aluminide mit unterschiedlich gestapelten Silber–Aluminium Kagomé-Netzen // *J. Less-Common Met.* 1991. Vol. 169, Is. 1. P. 55–72.
DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5088\(91\)90235-V](https://doi.org/10.1016/0022-5088(91)90235-V)
13. *Wiberg N.* *Holleman-Wiberg Lehrbuch der anorganischen Chemie.* Berlin-New York: Walter de Gruyter, 1995. P.1838-1841.

CRYSTAL STRUCTURE OF THE NEW TERNARY ALUMINIDE ErAg_{0.77}Al_{2.23}**O. Zhak, O. Karychort, T. Horetska, O. Dashynych***Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
e-mail: olha.zhak@lnu.edu.ua*

Crystal structure of the ternary erbium and silver aluminide ErAg_{0.77}Al_{2.23} has been studied using powder X-ray diffraction data: space group *R-3m*, Pearson symbol *hR36*, lattice parameters $a = 0.55049(1)$ nm, $c = 2.61415(6)$ nm, final residual values are $R_1 = 0,0450$; $R_p = 0,0314$; $wR_p = 0,0430$.

Samples were prepared by an arc melting under purified argon atmosphere with nonconsumable tungsten electrode and water-cooled copper hearth of the elemental components with certified purities of 99.999 wt.% Er, 99.95 wt.% Ag and 99.99 wt.% Al. All samples were re-melted twice to ensure homogeneity, and then heat treated in evacuated silica tubes at 600 °C during 700 hours. Annealed alloys were quenched in cold water without breaking the tubes. Phase analysis of the prepared samples and crystal structure determination of new compound were carried out using X-ray powder diffraction patterns recorded on a automatic powder diffractometer Huber Imaging Plate Guinier Camera G670 (CuK_{α1}-radiation, $\lambda = 0.154056$ nm; $3.503 \leq 2\theta \leq 99.99^\circ$; step $0,01^\circ$ of 2θ , scan time is 250 sec per step). Refinement of the atomic positional and displacement parameters in the crystal structure of the compounds was carried out by the full profile Rietveld method in the range $2\theta = 3.50\text{--}99.99^\circ$ (CuK_{α1}-radiation) using the WinCSD program package.

Existence of the new ternary aluminide ErAg_{0.77}Al_{2.23} with the rhombohedral structure of the PuNi₃-type was found in the two three-component samples of the starting compositions Er_{0.25}Ag_{0.20}Al_{0.55} and Er_{0.25}Ag_{0.17}Al_{0.58}. In both samples new aluminide was in thermodynamic equilibrium with the small admixtures of the earlier known ternary phases ErAg_{2.5}Al_{2.5} (DyAg_{2.4}Al_{2.6}-type structure) and Er₈Ag₁₇Al₄₉ (Yb₈Cu₁₇Al₄₉-type structure).

Partially ordered distribution of the smaller atoms Ag and Al was observed in the crystal structure of new intermetallide, in particular Wyckoff site *6c* is fully occupied by Ag atoms, whereas Wyckoff sites *3b* and *18h* are occupied by the statistical mixtures of Ag and Al atoms with a predominant content of aluminum atoms leading to the next formulas ErAg_{0.77(1)}Al_{2.23(1)} or Er(Ag_{0.26}Al_{0.74})₃.

Interatomic distances in the ErAg_{0.77}Al_{2.23} crystal structure are in good correlation with the respective sums of the atomic radii of the components indicating predominance of the metallic bonding.

Structure type PuNi₃ (or NbBe₃) can be considered as formed from the structural units of the CaCu₅ and MgZn₂ structure types.

Keywords: crystal structure, X-ray powder diffraction, aluminide, erbium, silver.

Стаття надійшла до редколегії 29.10.2020

Прийнята до друку 18.05.2021