

УДК [664+73+26]:546:548.734:544.015.35

СИСТЕМА Dy–Co–C ПРИ 800 °C

В. Левицький, А. Костецька, В. Бабіжецький, Б. Котур, Р. Серкіз

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

Методами рентгенофазового і рентгеноструктурного аналізів та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії побудовано ізотермічний переріз діаграми стану системи Dy–Co–C при 800 °C і частково при 700 °C (в області 38–75 ат. % Dy і 0–10 ат. % C). Підтверджено існування двох тернарних сполук DyCoC₂ і DyCoC та чотирнадцяти бінарних сполук. Методом порошку уточнено кристалічну структуру сполуки DyCoC₂: ПГ *Amm*2; *a* = 0,35396(5) нм; *b* = 0,45122(5) нм; *c* = 0,60329(7) нм; *Z* = 2; *R*₁ = 0,08. Структуру сполуки Dy_{2-x}Co₁₇ (*x* = 0,27(3)) уперше уточнено методом монокристала: ПГ *P6₃/mmc*; *a* = 0,8307(1) нм; *c* = 0,8045(1) нм; *Z* = 2; *R*₁ = 0,052 (*wR*₂ = 0,110) для 140 рефлексів з *I*₀ > 2σ(*I*₀).

Ключові слова: потрійна система, фазові рівноваги, металокарбіди, кристалічна структура.

Дослідження трикомпонентної системи Dy–Co–C є частиною систематичного вивчення потрійних карбідних систем *R–M–C* (*R* = рідкісноземельний метал (РЗМ), *M* = 3*d*-елемент) для пошуку нових сполук, уточнення їхніх кристалічних структур та дослідження фізичних властивостей.

Систему Dy–Co–C у повному концентраційному інтервалі раніше не досліджували. У праці [1] наведено лише деякі фазові рівноваги в інтервалі до 33,3 ат. % РЗМ для споріднених трикомпонентних систем (РЗМ = Y, La, Ce, Sm, Gd) за різних температур і тисків. В області з великим вмістом карбону і кобальту виявлено одну тернарну сполуку DyCoC₂ [1, 26]. У літературі [2, 3] є дані про синтез ще однієї тернарної сполуки DyCoC, кристалічна структура якої досліджена методом порошку. Тому наша мета –дослідити систему Dy–Co–C у повному концентраційному інтервалі з уточненням фазових рівноваг при 800 °C і за атмосферного тиску.

Зразки для дослідження системи синтезували методом сплавлення спресованих у таблетку порошоків вихідних компонентів високої чистоти (не менше 99,99 мас. % основного компонента) в електродуговій печі на мідному, охолоджуваному водою поді з використанням вольфрамового електрода в атмосфері аргону, додатково очищеного Ti-гетером. Для досягнення гомогенності сплавів їх відпалювали у вакуумованих кварцових ампулах при 800 °C у муфельній печі тривалістю 30 діб. Після гомогенізації ампули зі зразками гартували в проточній холодній воді.

Фазовий аналіз синтезованих зразків проводили за масивами експериментальних даних дифракції рентгенівського випромінювання методом порошку, одержаних за допомогою дифрактометра ДРОН-2.0 М (FeK_α-випромінювання) з використанням комп'ютерної програми STOE WinXPOW [4]. Кристалічну структуру сполук методом порошку уточнювали пакетом програм

WinCSD [5, 6]. Дослідження монокристала Dy_2Co_{17} виконано за масивом даних автоматичного монокристалного дифрактометра STOE IPDS II ($MoK_{\alpha 1}$ -випромінювання) з використанням комплексу комп'ютерних програм, що входять до пакета WinGX [7, 8]. Для підтвердження фазового складу деяких концентраційних областей системи застосовували метод енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії (ЕДРС) у поєднанні з растровим електронним мікроскопом РЭММА-102-2.

На рис. 1 показано ізотермічний переріз діаграми стану системи Dy–Co–C при $800\text{ }^\circ\text{C}$ і частково при $700\text{ }^\circ\text{C}$ (в області 38–75 ат. % Dy і 0–10 ат. % C), побудований за результатами цього дослідження.

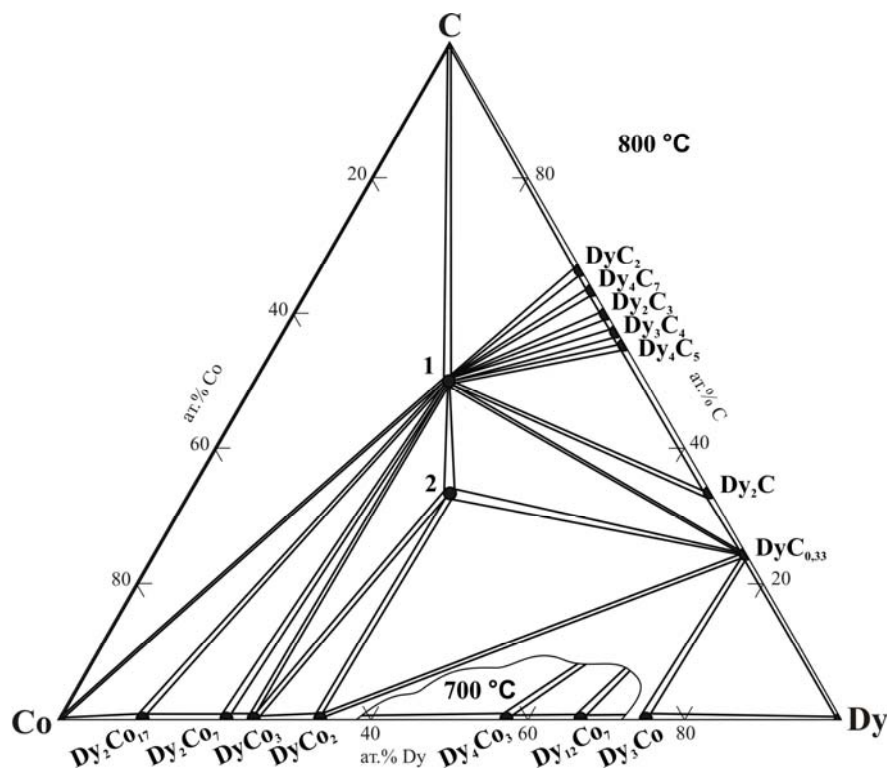


Рис. 1. Ізотермічний переріз діаграми стану системи Dy–Co–C при $800\text{ }^\circ\text{C}$ і частково при $700\text{ }^\circ\text{C}$ (в області 38–75 ат. % Dy і 0–10 ат. % C). Тернарні сполуки: 1 – $DyCoC_2$; 2 – $DyCoC$

У подвійній системі Dy–Co при $800\text{ }^\circ\text{C}$ в діапазоні $\sim 57\text{--}70$ ат. % Dy мала б простежуватися область розплаву [9]. Для того щоб перевірити, чи розчинність карбону в цьому концентраційному інтервалі збільшить температуру евтектичного перетворення, ми виготовили зразки з додаванням 5–10 ат. % C. Під час відпалювання таких сплавів при $800\text{ }^\circ\text{C}$ вони частково розплавлялися. Рентгенофазовий аналіз (РФА) нерозпавлених залишків засвідчив існування двофазових рівноваг $Dy_3Co - DyC_{0,33}$ та $DyCo_2 - DyC_{0,33}$.

Оскільки розплав прореагував з матеріалом ампули, то в цій концентраційній області діаграми синтезовано додатково декілька зразків з вмістом Dy 38–75 ат. % та C 0–10 ат. %, відпалених при 700 °С. Ця ділянка виділена на рис. 1. РФА зразків цієї області дав змогу виявити рівноваги карбіду DyC_{0,33} з двома бінарними сполуками Dy₁₂Co₇ і Dy₄Co₃, що узгоджується з діаграмою стану двокомпонентної системи Dy–Co [9].

У табл. 1 наведено відомості про сполуки, які утворюються в системі Dy–Co–C при 800 °С, і ті, які зафіксовані при 700 °С. У літературі [10, 18, 19] повідомлено про існування метастабільних фаз Co₃C та Co₂C, які під час цього дослідження рентгенівськими методами не виявлені (див. рис. 1).

Таблиця 1

Кристалографічні характеристики сполук систем Dy–Co,
Co–C, Dy–C і Dy–Co–C

Сполука	СТ	СП	ПГ	Параметри елементарної комірки			Літера- тура
				<i>a</i> , нм	<i>b</i> , нм	<i>c</i> , нм	
Dy ₃ Co	Fe ₃ C	<i>oP16</i>	<i>Pnma</i>	0,6965	0,9341	0,6233	11
DyCo ₂	MgCu ₂	<i>cF24</i>	<i>Fd $\bar{3} m$</i>	0,7188 0,7223(3)			12 *
DyCo ₃	PuNi ₃	<i>hR36</i>	<i>R $\bar{3} m$</i>	0,5004		2,435	13
Dy ₄ Co ₃	Ho ₄ Co ₃	<i>hP22</i>	<i>P6₃/m</i>	1,148		0,3994	14
DyCo ₅	CaCu ₅	<i>hP6</i>	<i>P6/mmm</i>	0,4924		0,3986	15
Dy ₂ Co ₇	β - Gd ₂ Co ₇	<i>hR54</i>	<i>R $\bar{3} m$</i>	0,4992		3,613	14
Dy ₁₂ Co ₇	Ho ₁₂ Co ₇	<i>mP38</i>	<i>P12₁/c1</i>	0,836	1,125; $\beta = 138,8^\circ$	1,392	16
Dy ₂ Co ₁₇	Th ₂ Ni ₁₇	<i>hP38</i>	<i>P6₃/mmc</i>	0,83614 0,8307(1)		0,81170 0,8045(1)	17 *
Dy ₂ Co ₁₇	Th ₂ Zn ₁₇	<i>hR57</i>	<i>R $\bar{3} m$</i>	0,83650		1,2169	17
Co ₂ C	Fe ₂ C	<i>oP6</i>	<i>Pnnm</i>	0,44465	0,43707	0,28969	18
Co ₃ C	Fe ₃ C	<i>oP16</i>	<i>Pnma</i>	0,5033	0,6731	0,4483	19
DyC ₂	CaC ₂	<i>tI6</i>	<i>I4/mmm</i>	0,3668		0,6176	20
Dy ₄ C ₇	Ho ₄ C ₇	<i>mP44</i>	<i>P12₁/n1</i>	0,3688(1)	1,2540(4) $\beta = 96,65(2)^\circ$	1,3650(2)	*
Dy ₂ C ₃	Pu ₂ C ₃	<i>cI40</i>	<i>I $\bar{4} 3d$</i>	0,8189			21
Dy ₃ C ₄	Sc ₃ C ₄	<i>tP70</i>	<i>P4/mnc</i>	0,8084		1,5881	22
Dy ₄ C ₅	Y ₄ C ₅	<i>oP18</i>	<i>Pbam</i>	0,6574	1,1905	0,36654	23
Dy ₂ C	anti- CdCl ₂	<i>hR9</i>	<i>R $\bar{3} m$</i>	0,3584		1,789	24
DyC _{0,33}	NaCl	<i>cF8</i>	<i>Fm $\bar{3} m$</i>	0,5083 0,50722(8)			25 *
DyCoC	YCoC	<i>tP6</i>	<i>P4₂/mmc</i>	0,3647		0,6864	2
		<i>tP4</i>	<i>P4/mmm</i>	0,3645		0,3430	3
DyCoC ₂	CeNiC ₂	<i>oS8</i>	<i>Amm2</i>	0,3533	0,4500	0,6019	26
				0,35396(5)	0,45122(5)	0,60329(7)	*

*Результати нашого дослідження.

Для підтвердження окремих фазових полів проведено ЕДРС аналіз, результати якого зображені на рис. 2. Вони добре узгоджуються з результатами РФА.

Щодо бінарних карбідів системи Dy–C, то нам вдалося підтвердити існування всіх раніше відомих сполук та виявити новий бінарний карбід складу Dy₄C₇ (СТ Ho₄C₇ [27]) (див. табл. 1). Сьогодні немає відомостей про будову діаграми стану системи Dy–C. Сполуки мають точкові склади, за винятком DyC_{0,33}, у якої дефектна структура типу NaCl і яка через зміну заповнення позиції 4a атомами

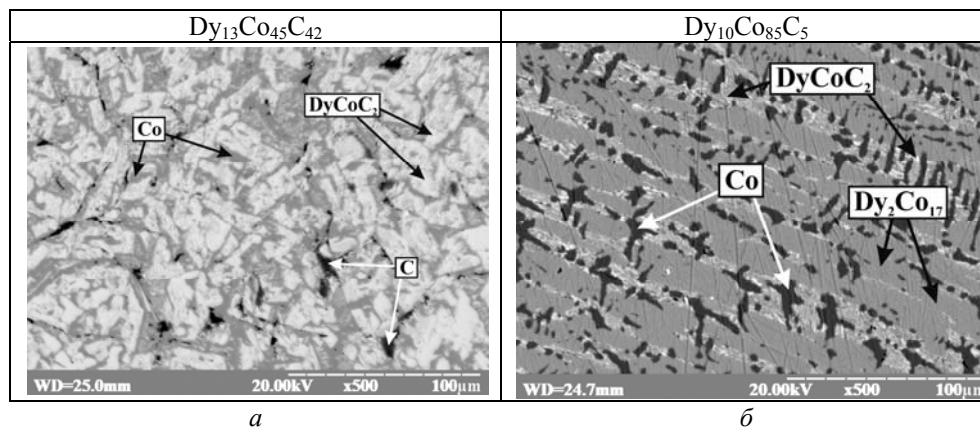


Рис. 2. Фотографії мікрошліфів зразків Dy₁₃Co₄₅C₄₂ (а), Dy₁₀Co₈₅C₅ (б). Фазовий склад наведено за результатами ЕДРС

карбону може існувати в широкому концентраційному інтервалі. З огляду на обмеження можливостей технічних засобів, за допомогою яких проводили це дослідження, точних меж області гомогенності виявити не вдалося. Параметр *a* елементарної комірки, уточнений для сполуки DyC_{0,33}, виявленої в різних зразках, змінюється в межах від 0,507(1) до 0,509(1) нм і добре узгоджується з літературними даними (див. табл. 1). Тому на ізотермічному перерізі діаграми стану (див. рис. 1) сполука зображена як така, що має точковий склад.

Як бачимо з табл. 1, для сполуки Dy₂Co₁₇ характерний поліморфізм. РФА засвідчив, що при 800 °С стабілізується модифікація з гексагональною структурою типу Th₂Ni₁₇ [17]. У двофазовому зразку (Dy₂Co₁₇ та DyCoC₂), використовуючи оптичний мікроскоп, відібрано монокристали. Унаслідок їхнього дослідження за допомогою автоматичного монокристалного дифрактометра одержано масив експериментальних даних монокристала сполуки Dy₂Co₁₇. Деталі рентгеноструктурного дослідження й уточнення кристалічної структури цієї сполуки наведені в табл. 2, а координати атомів та їхні ізотропні теплові параметри – у табл. 3, анізотропні теплові параметри атомів у структурі сполуки Dy₂Co₁₇ – у табл. 4.

Сполука Dy₂Co₁₇ кристалізується у структурному типі Th₂Ni₁₇. У ході уточнення кристалічної структури виявлено підвищені значення теплових параметрів атомів Dy. Коефіцієнти заповнення позицій Dy1 і Dy2 становлять 83(3) та 90(3) %, відповідно, що приводить до складу сполуки Dy_{1,73(3)}Co₁₇. Отже, результати здійснених нами обчислень дещо відмінні від складу Er_{1,89}Co₁₇, наведеного в літературі [28], визначеного в ході уточнення кристалічної структури ізоморфної сполуки Er₂Co₁₇. Це пояснюють тим, що в структурі сполуки Dy_{1,73(3)}Co₁₇ нема заповнення позицій 2c

атомами Dy, відсутністю заповнення позицій $4e$, ще двох $12j$ та ще однієї $12k$ атомами Co, порівняно з позиціями атомів у структурі сполуки $\text{Er}_{1,89}\text{Co}_{17}$. На відміну від упорядкованої моделі структури сполук ізоструктурного ряду $R_2\text{Co}_{17}$ типу $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$, запропонованої у [17], у структурі $\text{Dy}_{1,73(3)}\text{Co}_{17}$ позиції атомів Dy заповнені не повністю.

Таблиця 2

Кристалохімічні характеристики, деталі знімання та уточнення структури сполуки $\text{Dy}_2\text{Co}_{17}$

Формула	$\text{Dy}_{1,73(3)}\text{Co}_{17}$
Просторова група	$P6_3/mmc$ (№ 194)
Символ Пірсона, Z	$hP38, 2$
Параметри комірки	
a , нм	0,8307(1)
c , нм	0,8045(1)
Об'єм елементарної комірки, нм^3	0,4808(1)
Обчислена густина, $\text{г}/\text{см}^3$	9,165
Коефіцієнт абсорбції, см^{-1}	43,667
Розмір кристала, мм^3	$0,12 \times 0,10 \times 0,06$
Випромінювання і довжина хвилі, Å	0,71073
Дифрактометр	STOE IPDS II
Кількість уточнюваних параметрів	26
Уточнення	F^2
$2\theta_{\max}$ та $(\sin\theta/\lambda)_{\max}$	56,88; 0,680
h, k, l	$-11 \leq h \leq 10$ $-10 \leq k \leq 10$ $-10 \leq l \leq 10$
Загальна кількість відбить	3192
Кількість незалежних відбить	226 ($R_{int} = 0,089$)
Кількість відбить з $I_o \geq 2\sigma(I_o)$	140 ($R_\sigma = 0,021$)
Фактор розбіжності R_1 (R_1 всі відбиття) ^a	0,052 (0,11)
wR_2 (wR_2 всі відбиття) ^b	0,066 (0,074)
S по F^2 :	1,05
$\Delta\rho_{\max}$ та $\Delta\rho_{\min}$ ($\text{e} \cdot \text{Å}^{-3}$)	-2,09; +4,23

$$^a R_1(F) = [\sum(|F_o| - |F_c|)] / \sum|F_o|$$

$$^b wR_2(F^2) = [\sum[w(F_o^2 - F_c^2)^2] / \sum[w(F_o^2)^2]]^{1/2}; [w^{-1} = \sigma^2(F_o)^2 + (0,014)^2 + 0,0P],$$

де $P = (F_o^2 + 2F_c^2) / 3$

Таблиця 3

Координати та ізотропні теплові параметри атомів у структурі $\text{Dy}_2\text{Co}_{17}$

Атом	ПСТ	КЗП	x	y	z	$U_{eq}/U_{iso}, \text{Å}^2$
Dy1	$2b$	0,83(3)	0	0	1/4	0,008(1)
Dy2	$2d$	0,90(3)	1/3	2/3	3/4	0,010(1)
Co1	$4f$	1,0	1/3	2/3	0,1029(6)	0,018(1)
Co2	$6g$	1,0	1/2	0	0	0,012(1)
Co3	$12j$	1,0	0,3279(4)	0,9591(3)	1/4	0,017(1)
Co4	$12k$	1,0	0,1654(2)	0,3309(5)	0,9800(3)	0,013(1)

Таблиця 4

Анізотропні теплові параметри атомів у структурі Dy_2Co_{17} , Å^2

Атом	U_{11}	U_{22}	U_{33}	U_{23}	U_{13}	U_{12}
Dy1	0,005(2)	0,005(2)	0,010(2)	0,000	0,000	0,0026(8)
Dy2	0,011(1)	0,011(1)	0,011(1)	0,000	0,000	0,0053(7)
Co1	0,021(2)	0,021(2)	0,013(3)	0,000	0,000	0,011(1)
Co2	0,011(2)	0,016(2)	0,012(3)	0,006(3)	0,003(1)	0,008(1)
Co3	0,016(2)	0,017(2)	0,010(2)	0,000	0,000	0,0018(2)
Co4	0,011(1)	0,016(2)	0,013(2)	0,002(3)	0,001(1)	0,0080(9)

У потрійній системі Dy–Co–C ми підтвердили існування двох сполук $DyCoC_2$ [26] та $DyCoC$ [2, 3], відомих раніше. Нові тернарні сполуки не виявлені. Існування сполуки $DyCoC_2$ у рівновазі з Co і C та її наявність у литих і відпалених зразках свідчить про її високу термодинамічну стійкість. Результати повнопрофільного уточнення порошкової дифракції однофазового зразка (сполука $DyCoC_2$) показані на рис. 3. У табл. 5 наведено деталі цього уточнення. Координати атомів та їх ізотропні теплові параметри наведені в табл. 6.

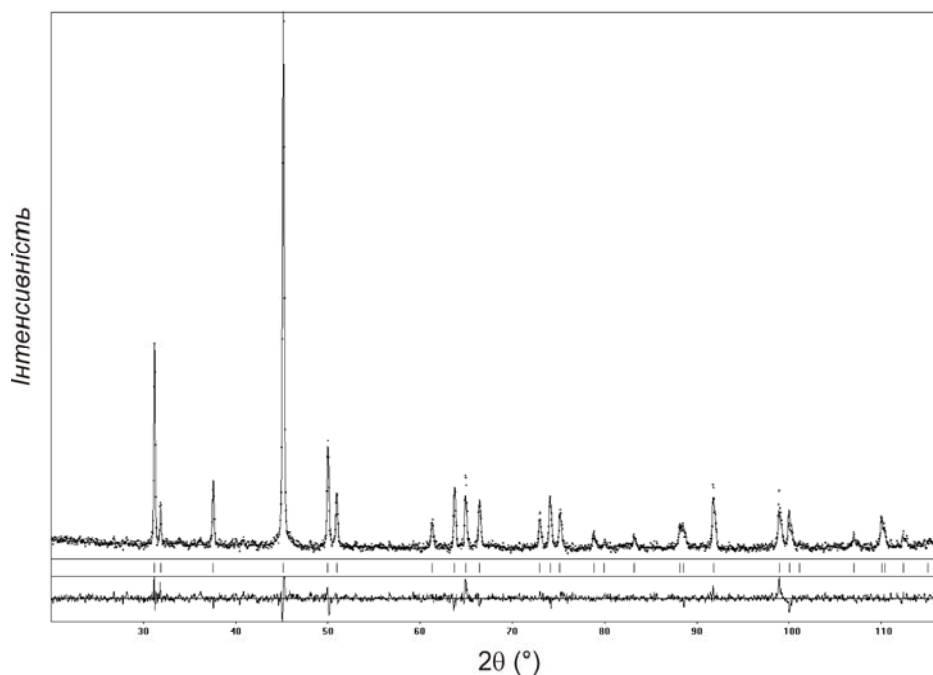


Рис. 3. Теоретична (суцільна лінія), експериментальна (точки) та різницєва (внизу) дифрактограми однофазового сплаву складу $Dy_{25}Co_{25}C_{50}$ (сполука $DyCoC_2$). Уточнені положення піків позначено вертикальними лініями

Таблиця 5

Деталі уточнення дифрактограми порошку зразка $Du_{25}Co_{25}C_{50}$

Фаза	$DuCoC_2$
Відносний вміст, мас. %	100
Структурний тип	$CeNiC_2$
Просторова група	$Amm2$ (№ 38)
Символ Пірсона	$oS8$
Параметри елементарної комірки	
a , нм	0,35396(5)
b , нм	0,45122(5)
c , нм	0,60329(7)
Об'єм елементарної комірки V , нм ³	0,096353(8)
Кількість формульних одиниць, Z	2
Розрахована густина, г·см ⁻³	8,46(2)
Фактори достовірності, %	
R_I	8,44
R_P	15,34
R_{WP}	11,76
R_{Exp}	4,12
R_{dbw}	7,94

Таблиця 6

Координати та ізотропні параметри теплових коливань атомів у структурі сполуки $DuCoC_2$

Атом	ПСТ	x	y	z	B_{iso} , Å ²
Du	$2a$	0	0	0,010(2)	0,41(4)
Co	$2b$	1/2	0	0,628(2)	0,58(5)
C	$4e$	1/2	0,182(3)	0,304(3)	0,87(5)

Структура сполуки $DuCoC_2$, наведена у [2, 3], уточнена лише методом порошку. Проте в цих працях простежуються певні суперечності (див. табл. 1) і наведено різні моделі її кристалічної структури. У літературі [2, 3] повідомляють про ізоструктурність $DuCoC_2$ з $YCoC_2$, параметри комірки уточнені за цією моделлю. Методом монокристала структуру сполуки $YCoC_2$ не досліджували. Її структурне дослідження потрібно продовжити.

1. Путьятин А. А., Козловский В. Ф. Фазовые соотношения в системах РЗЭ – Со – С при различных давлениях // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 1991. Т. 32. С. 58–61.
2. Gerst M. H., Jeitschko W. $YCoC_2$ and isotypic carbides with a new, very simple structure type // Z. Naturforsch. 1986. Bd. 41b. S. 946–950.
3. Цоколь А. О., Бодак О. И., Марусин Е. П. Кристаллическая структура $YCoC_2$ // Кристаллография. 1989. Т. 34. С. 1014–1016.
4. Stoe & Cie. STOE Win XPOW (Version 2.10). 2004.
5. Akselrud L. G., Zavalii P. Yu., Grin Yu. N. et al. WinCSD (Version 08.11). 2012.
6. Akselrud L. G., Zavalii P. Yu., Grin Yu. N. et al. Use of the CSD program package for structure determination from powder data // Mater. Sci. Forum. 1993. Vol. 133–136. P. 335–342.

7. *Farrugia L. J.* WinGX (Version 1.80.05). 2009.
8. *Farrugia L. J.* WinGX suite for small-molecule single-crystal crystallography // *J. Appl. Cryst.* 1999. Vol. 32. P. 837–838.
9. Binary alloy phase diagrams. Second edition / Ed. by T. B. Massalski. ASM International, Materials Park, Ohio. 1990. Vol. 2. P. 1183–1184.
10. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник / Под ред. Н.П. Лякишева. М. : Машиностроение. 1996. Т. 1. С. 709–711.
11. *Buschow K. H. J., van der Goot A. S.* The crystal structure of rare-earth cobalt compounds of the type R_3Co // *J. Less-Common Metals.* 1969. Vol. 18. P. 309–311.
12. *Lee E. W., Pourarian F.* Magnetoelastic properties of (rare-earth)- Co_2 compounds. I. Exchange-striction // *Phys. Stat. Sol. (a).* 1976. Vol. 33. P. 483–489.
13. *Yakinthos J. K., Mentzafos D. E.* Neutron-diffraction study of ferrimagnetic $DyCo_3$ // *Phys. Rev. B.* 1975. Vol. 12. P. 1928–1932.
14. *Buschow K. H. J.* Rare-earth cobalt intermetallic compounds // Ref. Philips Research Rep. 1971. Vol. 26. P. 49–64.
15. *Andreev A. V., Zadvorkin S. M.* Thermal expansion and spontaneous magnetostriction of RCO_5 intermetallic compounds // *Physica B.* 1991. Vol. 172. P. 517–525.
16. *Adams W., Moreau J.-M., Parthé E., Schweizer J.* $R_{12}Co_7$ compounds with R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er // *Acta Cryst.* 1976. Vol. B32. P. 2697–2699.
17. *Khan Y.* The crystal structures of R_2Co_{17} intermetallic compounds // *Acta Cryst.* 1973. Vol. B29. P. 2502–2507.
18. *Clark J., Jack K. H.* The preparation and the crystal structures of cobalt nitride, Co_2N , of cobalt carbonitrides, $Co_2(C, N)$ and of cobalt carbide, Co_2C // *Chem. and Ind.* 1951. Vol. 46. P. 1004–1005.
19. *Nagakura S.* Study of metallic carbides by electron diffraction Part IV. Cobalt carbides // *J. Phys. Soc. Japan.* 1961. Vol. 16. P. 1213–1219.
20. *Atoji M.* Magnetic structure of DyC_2 // *J. Chem. Phys.* 1968. Vol. 48. P. 3384–3388.
21. *Atoji M.* Neutron diffraction studies of Pr_2C_3 , Nd_2C_3 , and Dy_2C_3 at 300 to 1.6 K // *J. Solid State Chem.* 1978. Vol. 26. P. 51–57.
22. *Hüfken T., Jeitschko W.* The high-temperature (β) modification of Y_4C_7 with Lu_4C_7 type and Dy_3C_4 with Sc_3C_4 type structure // *J. Alloys Compd.* 1998. Vol. 278. P. 161–164.
23. *Czekalla R., Hüfken T., Jeitschko W.* et al. The rare earth carbides R_4C_5 with R = Y, Gd, Tb, Dy, and Ho // *J. Solid State Chem.* 1997. Vol. 132. P. 294–299.
24. *Atoji M.* Neutron-diffraction studies of Tb_2C and Dy_2C in the temperature range 4–296 K // *J. Chem. Phys.* 1981. Vol. 75. P. 1434–1441.
25. *Aoki Y., Williams D. E. G.* Some properties of alloys with compositions close to $DyCo_{0.33}$ // *J. Less-Common Metals.* 1979. Vol. 65. P. 35–40.
26. *Schäfer W., Kochelmann W., Will G.* et al. Structural and magnetic properties of $RCoC_2$ (R = Pr, Dy, Ho) compounds studied by neutron diffraction // *J. Magn. Magn. Mater.* 1994. Vol. 132. P. 243–248.
27. *Mattausch H. J., Gulden T., Kremer R. K.* et al. Ho_4C_7 , Y_4C_7 : Carbide mit $C_3^{(4-)}$ - und $C^{(4-)}$ -Ionen // *Z. Naturforsch. B.* 1994. Bd. 49. S. 1439–1443.
28. *Givord D., Givord F., Lemaire R.* et al. Evidence of disordered substitutions in the “ Th_2Ni_{17} -type” structure. Exact structure determination of the Th-Ni, Y-Ni and Er-Co compounds // *J. Less-Common Metals.* 1972. Vol. 29. P. 389–396.

SYSTEM Dy–Co–C AT 800 °C

V. Levytskyy, A. Kostetska, V. Babizhetskyy, B. Kotur, R. Serkiz

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

The isothermal section of the Dy–Co–C phase diagram at 800 °C and partially at 700 °C in the range 38–75 at. % Dy and 0–10 at. % C has been investigated by means of the X-ray phase and structural analyses and energy-dispersive X-ray spectroscopy. The existence of two ternary compounds DyCoC₂ and DyCoC and fourteen binary compounds has been confirmed. The crystal structure of DyCoC₂ compound: SG *Amm2*, $a = 0.35396(5)$ nm, $b = 0.45122(5)$ nm, $c = 0.60329(7)$ nm, $Z = 2$, $R_1 = 0.08$ has been refined from powder X-ray diffraction data. The crystal structure of the Dy_{2-x}Co₁₇ ($x = 0,27(3)$) compound: SG *P6₃/mmc*, $a = 0.8307(1)$ nm, $c = 0.8045(1)$ nm, $Z = 2$, $R_1 = 0.052$ ($wR_2 = 0.110$) for 140 reflections with $I_0 > 2\sigma(I_0)$, has been refined from the single-crystal X-ray diffraction data for the first time.

Key words: ternary system, phase equilibria, metal carbides, crystal structure.

СИСТЕМА Dy–Co–C ПРИ 800 °C

В. Левицький, А. Костецька, В. Бабижецький, Б. Котур, Р. Серкиз

*Львівський національний університет імені Івана Франка,
ул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
e-mail: v.levycky@gmail.com*

Методами рентгенофазового, рентгеноструктурного аналізу і енергодисперсійної рентгеновської спектроскопії побудовано ізотермічне сечення діаграми стану системи Dy–Co–C при 800 °C і частково при 700 °C (в області 38–75 ат. % Dy і 0–10 ат. % C). Підтверджено існування двох тернарних сполучень DyCoC₂ і DyCoC і чотирнадцяти бінарних сполучень. Методом порошку уточнено кристалічну структуру сполучення DyCoC₂: ПГ *Amm2*; $a = 0,35396(5)$ нм; $b = 0,45122(5)$ нм; $c = 0,60329(7)$ нм; $Z = 2$; $R_1 = 0,08$. Структура сполучення Dy_{2-x}Co₁₇ ($x = 0,27(3)$) вперше уточнена методом монокристала: ПГ *P6₃/mmc*; $a = 0,8307(1)$ нм; $c = 0,8045(1)$ нм; $Z = 2$; $R_1 = 0,052$ ($wR_2 = 0,110$) для 140 відбиттів з $I_0 > 2\sigma(I_0)$.

Ключеві слова: трійна система, фазові рівноваги, металокарбиди, кристалічна структура.

Стаття надійшла до редколегії 31.10.2012

Прийнята до друку 26.12.2012