ISSN 2078-5615. Вісник Львівського університету. Серія хімічна. 2026. Випуск 67. С. 33–41
Visnyk of the Lviv University. Series Chemistry. 2026. Issue 67. P. 33–41

УДК 548.736.4

ІЗОТЕРМІЧНИЙ ПЕРЕРІЗ ДІАГРАМИ СТАНУ СИСТЕМИ Y–Sn–Bi (600 °C)

І. Огоновський*, Я. Токайчук, Р. Гладишевський

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

Методами рентгенівських фазового, структурного та спектрального аналізів побудовано ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi за температури 600 °C у повному концентраційному інтервалі. Виявлено утворення обмежених твердих розчинів заміщення на основі бінарних станідів Y_5Sn_3, Y_5Sn_4, $Y_{11}Sn_{10}$ та YSn_2 протяжністю 16, 5,4, 6,2 та 4,5 ат. % Bi, відповідно, і бінарних бісмутидів Y_5Bi_3 та YBi протяжністю 7 та 5 ат. % Sn, відповідно. Параметри елементарної комірки в межах твердого розчину заміщення $Y_5Sn_{3-1.72}Bi_{0-1.28}$ (структурний тип Mn_5Si_3, символ Пірсона *hP*16, просторова група $P6_3/mcm$) змінюються анізотропно: за збільшення вмісту Bi параметр *a* елементарної комірки збільшується (*a* = 8,8935(4)–8,9718(3) Å), тоді як параметр *c* – зменшується (*c* = 6,5355(3)–6,4734(2) Å); об'єм елементарної комірки при цьому збільшується (*V* = 447,66(3)–451,25(2) Å^3). Залежності параметра *a* та об'єму *V* елементарної комірки від вмісту Sn/Bi характеризуються від'ємними відхиленнями від лінійності, а параметра *c* – додатним відхиленням.

Ключові слова: ітрій, олово, бісмут, рентгенівська порошкова дифракція, діаграма стану, твердий розчин, кристалічна структура.

DOI: https://doi.org/10.30970/vch.6701.033

1. Вступ

Про дослідження діаграми стану і кристалічної структури фаз потрійної системи Y–Sn–Bi у літературі відомостей немає. У споріднених системах *R*–Sn–Bi (*R* – рідкісноземельний метал) виявлено існування п'яти тернарних фаз, кристалічні структури яких належать до чотирьох структурних типів [1]. Кристалографічні характеристики тернарних фаз систем *R*–Sn–Bi наведено у табл. 1.

Таблиця 1

Кристалографічні характеристики тернарних фаз систем *R*–Sn–Bi

Table 1

Crystallographic characteristics for the ternary phases of the systems *R*–Sn–Bi

Сполука	СТ[1]	СП[2]	ПГ[3]	Параметри комірки, Å			Літ.
				a	*b*	*c*	
La_4SnBi_2	Th_3P_4	*cI*28	*I*-43*d*	9,779	–	–	[2]
$Eu_3Sn_{3,99-3.39}\times$ $\times Bi_{1,01-1,61}$	Tl_4PbTe_3	*tI*32	*I*4/*mcm*	8,794–8,826	–	12,443–12,564	[3]
$Eu_{11}Sn_{1,93}Bi_{8,07}$	$Sc_{11}Al_2Ge_8$	*tI*84	*I*4/*mmm*	12,5369	–	18,124	[4]
$Yb_{11}Sn_2Bi_8$	$Sc_{11}Al_2Ge_8$	*tI*84	*I*4/*mmm*	12,1080	–	17,516	[5]
$Yb_{11}Sn_{4,8}Bi_{5,2}$	$Sm_{11}In_6Ge_4$	*tI*84	*I*4/*mmm*	12,0183	–	17,413	[6]

[1] Структурний тип; [2] символ Пірсона; [3] просторова група.

© Огоновський І., Токайчук Я., Гладишевський Р., 2026

Подвійні системи Y–Sn, Y–Bi і Sn–Bi, що обмежують потрійну систему Y–Sn–Bi, досліджено достатньо повно, для всіх них побудовано діаграми стану у повних концентраційних інтервалах [7, 8]. Повідомлено про утворення та кристалічну структуру семи бінарних станідів у системі Y–Sn і двох бінарних бісмутидів у системі Y–Bi [1]. Їхні кристалографічні характеристики наведено у табл. 2. Система Sn–Bi характеризується евтектичною реакцією L ↔ β-Sn + Bi за температури 129 °C і вмісту Bi 43 ат. %, бінарні сполуки у ній не утворюються. За температури дослідження (600 °C) олово і бісмут перебувають у рідкій фазі, а отже, область рідкого стану перебуватиме у відповідній частині ізотермічного перерізу діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi (600 °C).

Таблиця 2

Кристалографічні характеристики бінарних сполук систем Y–Sn та Y–Bi

Table 2

Crystallographic characteristics of the binary compounds of the systems Y–Sn and Y–Bi

Сполука	СТ	СП	ПГ	Параметри комірки, Å			Літ.
				a	*b*	*c*	
Y_5Sn_3	Mn_5Si_3	*hP*16	$P6_3/mcm$	8,902	–	6,536	[9]
Y_5Sn_4	Sm_5Ge_4	*oP*36	*Pnma*	8,050	15,290	8,050	[10]
$Y_{11}Sn_{10}$	$Ho_{11}Ge_{10}$	*tI*84	*I*4/*mmm*	11,530	–	16,910	[10]
YSn_2	$ZrSi_2$	*oS*12	*Cmcm*	4,332	16,052	4,235	[11]
	YSn_2	*oS*12	*Ama*2	4,3034	16,296	4,3408	[11]
$Y_{0,94}Sn_2$	$Y_{0,94}Sn_2$	*oS*12	$Cmc2_1$	4,332	16,052	4,235	[11]
Y_2Sn_5	Er_2Ge_5	*oP*14	*Pmmn*	4,322	4,409	19,089	[12]
YSn_3	$GdSn_{2,75}$	*oS*16	*Amm*2	4,345	4,391	21,937	[12]
hp-YSn_3[1]	Cu_3Au	*cP*4	*Pm*-3*m*	4,666	–	–	[13]
Y_5Bi_3	Y_5Bi_3	*oP*32	*Pnma*	8,179	9,401	11,957	[14]
YBi	NaCl	*cF*8	*Fm*-3*m*	6,2609	–	–	[15]

[1] Високотискова модифікація.

Мета цієї праці – експериментальне визначення фазових рівноваг у системі Y–Sn–Bi, виявлення розчинності третього компонента у бінарних станідах і бісмутидах ітрію і побудова ізотермічного перерізу діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi за температури 600 °C.

2. Матеріали та методика експерименту

Для синтезу сплавів використали компактні метали з таким вмістом основного компонента (в мас. %): ітрій ≥ 99,99; бісмут ≥ 99,99; олово ≥ 99,9. Зразки для дослідження синтезували сплавлянням компонентів в електродуговій печі на мідному водоохолоджуваному поді з використанням вольфрамового електрода в атмосфері аргону. Як гетер використали пористий титан. Для гомогенізації сплави відпалили у вакуумованих кварцових ампулах за температури 600 °C у муфельній електропечі VULKAN A-550 впродовж 720 год і загартували у холодній воді без попереднього розбивання ампул. Контроль складу проводили порівнянням маси вихідної шихти з масою сплаву. Якщо втрати під час синтезу не перевищували 2 мас. %, склад сплаву приймали рівним складу шихти. В окремих випадках відповідність складів синтезованих сплавів вихідним складам підтверджували рентгенівським флуоресцентним спектральним аналізом на аналізаторі ElvaX Pro. Загалом синтезовано 11 дво- та 20 трикомпонентих сплавів.

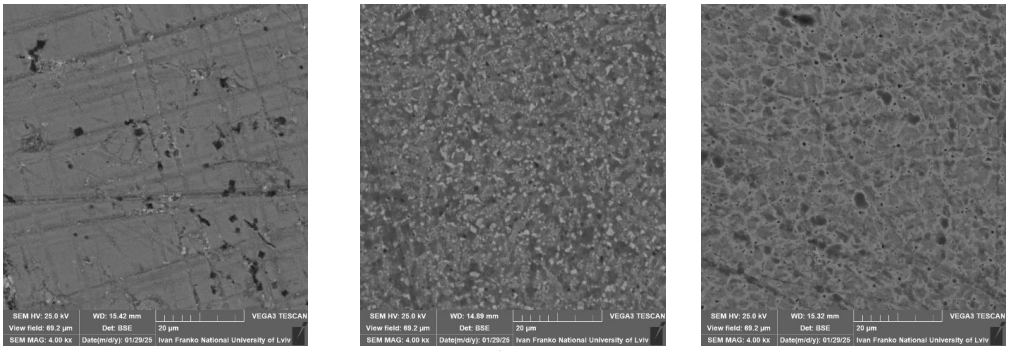
Двокомпонентні сплави синтезували з метою встановлення існування бінарних сполук при 600 °C та підтвердження типу їхньої структури.

Рентгенофазовий аналіз зразків і рентгеноструктурний аналіз сполук провели за масивами рентгенівських дифракційних даних, отриманих на порошковому дифрактометрі PROTO AXRD Banchtop (проміння Cu *K*α). Фазовий аналіз виконували порівнянням експериментальних дифрактограм сплавів з розрахованими дифрактограмами бінарних та тернарних сполук і чистих компонентів з використанням пакета програм WinXPow [16], а параметри профілю рентгенограм та параметри кристалічної структури фаз уточнювали методом Рітвельда з використанням пакета програм FullProf Suite [17]. Уточнювали фактори шкали, параметри елементарних комірок, параметри форми піків (функція профілю пвевдо-Войт), координати і параметри зміщення атомів, а також параметри заповнення їхніх позицій. Фон уточнювали за допомогою поліномних функцій з використанням алгоритму фільтрування Фур'є. Оцінку достовірності вибраної моделі здійснювали за значеннями факторів розбіжності. Межі твердих розчинів на основі бінарних сполук встановлено за допомогою локального рентгеноспектрального аналізу, виконаному на скануючому електронному мікроскопі Tescan Vega 3 LMU, оснащеному детекторами вторинних електронів (SE) і зворотно розсіяних електронів (BSE), та енергодисперсійним рентгенівським аналізатором Oxford Instruments Aztec ONE, оснащеним детектором X-Max^{N}20.

3. Результати досліджень та їх обговорення

За результатами рентгенофазного аналізу двокомпонентних сплавів у подвійних системах Y–Sn та Y–Bi за температури 600 °C виявлено існування шести бінарних сполук: Y_5Sn_3 (СТ Mn_5Si_3), Y_5Sn_4 (СТ Sm_5Ge_4), $Y_{11}Sn_{10}$ (СТ $Ho_{11}Ge_{10}$), YSn_2 (СТ $ZrSi_2$), Y_5Bi_3 (СТ Y_5Bi_3) та YBi (СТ NaCl). Повідомлені у літературі бінарні станіди Y_2Sn_5 та YSn_3 за температури дослідження не існують. Отримані результати узгоджуються з діаграмами стану подвійних систем Y–Sn та Y–Bi [7, 8]. На основі бінарних сполук утворюються обмежені тверді розчини заміщення. Найбільшою розчинністю третього компонента характеризується бінарна сполука Y_5Sn_3 – 16 ат. % Bi. Бінарні станіди Y_5Sn_4, $Y_{11}Sn_{10}$ та YSn_2 розчиняють 5,4, 6,2 та 4,5 ат. % Bi, відповідно, а бінарні бісмутиди Y_5Bi_3 та YBi – 7 та 5 ат. % Sn, відповідно. Протяжності усіх твердих розчинів визначено за результатами рентгенівського дифракційного та енергодисперсійного спектрального аналізів багатофазних сплавів (рис. 1, табл. 3).

Ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi за температури 600 °C побудовано у повному концентраційному інтервалі і зображено на рис. 2. Він характеризується 8-ма одно-, 13-ма дво- і 6-ма трифазними областями. Найбільшу кількість подвійних рівноваг (6) утворює твердий розчин заміщення на основі монобісмутиду ітрію YBi. За температури 600 °C сплави подвійної системи Sn–Bi перебувають у рідкому стані. Межі рідкої фази у потрійній системі було екстрапольовано, виходячи з її меж у подвійних системах: 3,0 ат. % Y у системі Y–Sn і 1,2 ат. % Y у системі Y–Bi. У рівновазі з рідиною перебувають дві фази – тверді розчини заміщення на основі бінарних сполук YSn_2 та YBi.



а *б* *в*

Рис. 1. Фотографії у вторинних електронах шліфів поверхонь зразків:
а – $Y_{33,3}Sn_{61,7}Bi_5$; *б* – $Y_{52,4}Sn_{37,6}Bi_{10}$; *в* – $Y_{25}Sn_{10}Bi_{65}$ (Tescan Vega 3 LMU)
Fig. 1. Secondary electron image of polished surfaces of the samples:
a – $Y_{33.3}Sn_{61.7}Bi_5$; *b* – $Y_{52.4}Sn_{37.6}Bi_{10}$; *c* – $Y_{25}Sn_{10}Bi_{65}$ (Tescan Vega 3 LMU)

Таблиця 3

Результати енергодисперсійного рентгенівського спектрального аналізу сплавів системи Y–Sn–Bi (рис. 1)

Table 3

Results of EDXS analysis of the alloys of the system Y–Sn–Bi (Fig. 1)

Вихідний склад сплаву – $Y_{33,3}Sn_{61,7}Bi_5$ (рис. 1, *а*), визначений склад сплаву – $Y_{33,8}Sn_{60,9}Bi_{5,3}$	
Сіра фаза (основна)	$Y_{33,5(3)}Sn_{62,0(2)}Bi_{4.5(2)}$ ($Y_{1,00(1)}Sn_{1,86(1)}Bi_{0,14(1)}$)
Темна фаза	$Y_{50,2(3)}Sn_{5,1(3)}Bi_{44,7(2)}$ ($Y_{1,00(1)}Sn_{0,10(1)}Bi_{0,90(1)}$)
Вихідний склад сплаву – $Y_{52,4}Sn_{37,6}Bi_{10}$ (рис. 1, *б*), визначений склад сплаву – $Y_{52,6}Sn_{37,9}Bi_{9,5}$	
Темно-сіра фаза (основна)	$Y_{52,3(3)}Sn_{41,5(2)}Bi_{6,2(3)}$ ($Y_{11,00(6)}Sn_{8,70(4)}Bi_{1,30(6)}$)
Сіра фаза	$Y_{55,7(3)}Sn_{38,9(2)}Bi_{5,4(3)}$ ($Y_{5,00(3)}Sn_{3,51(2)}Bi_{0,49(3)}$)
Світла фаза	$Y_{50,4(4)}Sn_{5,0(4)}Bi_{44,6(3)}$ ($Y_{1,01(1)}Sn_{0,10(1)}Bi_{0,89(1)}$)
Вихідний склад сплаву – $Y_{62,5}Sn_{12,5}Bi_{25}$ (рис. 1, *в*), визначений склад сплаву – $Y_{62,1}Sn_{13,7}Bi_{24,2}$	
Сіра фаза (основна)	$Y_{62,3(3)}Sn_{21,7(3)}Bi_{16,0(3)}$ ($Y_{5,0(2)}Sn_{1,7(2)}Bi_{1,3(2)}$)
Світла фаза	$Y_{49,9(4)}Sn_{5,0(4)}Bi_{45,1(3)}$ ($Y_{1,00(1)}Sn_{0,10(1)}Bi_{0,90(1)}$)
Темна фаза	$Y_{62,6(3)}Sn_{7,0(4)}Bi_{30,4(3)}$ ($Y_{5,0(2)}Sn_{0,6(3)}Bi_{2,4(2)}$)

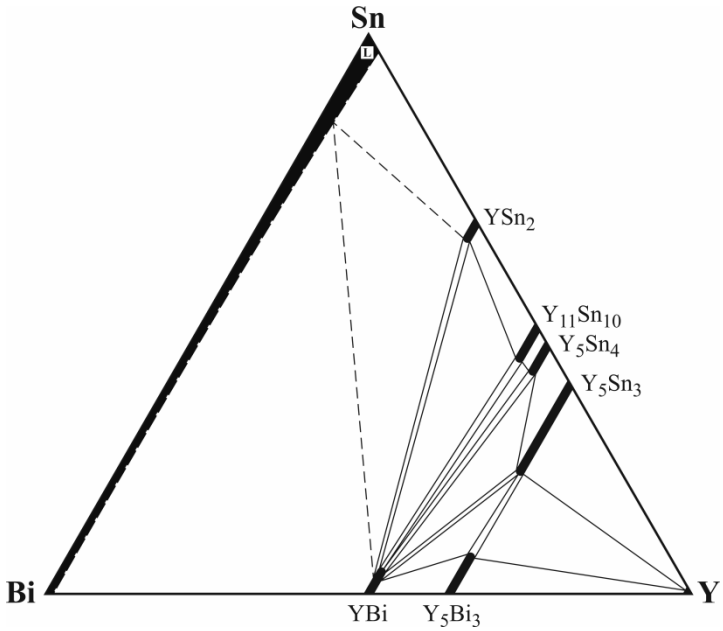


Рис. 2. Ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi за температури 600 °C
Fig. 2. Isothermal section of the phase diagram of the ternary system Y–Sn–Bi at 600 °C

Для твердого розчину заміщення на основі бінарної сполуки Y_5Sn_3 уточнено кристалографічні параметри, використовуючи масиви рентгенівських дифракційних даних п'яти сплавів з ізоконцентрати 62,5 ат. % Y і різним вмістом Sn і Bi (табл. 4). Зразки складів $Y_{62,5}Sn_{37,5}$, $Y_{62,5}Sn_{33,5}Bi_4$, $Y_{62,5}Sn_{28,5}Bi_9$ та $Y_{62,5}Sn_{25,5}Bi_{12}$ виявилися однофазними, тоді як зразок складу $Y_{62,5}Sn_{12,5}Bi_{25}$ – трифазним. У результаті рентгеноструктурного аналізу багатокомпонентного сплаву уточнено параметри комірки для граничних складів трьох твердих розчинів: $Y_5Sn_{1,72(4)}Bi_{1,28(4)}$ (СТ Mn_5Si_3, СП *hP*16, ПГ $P6_3/mcm$, a = 8,9718(3), c = 6,4734(2) Å), $Y_5Sn_{0,56}Bi_{2,44}$ (СТ Y_5Bi_3, СП *oP*32, ПГ *Pnma*, a = 8,1632(8), b = 9,3982(9), c = 11,9501(12) Å) та $YSn_{0,1}Bi_{0,9}$ (СТ NaCl, СП *cF*8, ПГ *Fm*-3*m*, a = 6,2521(4) Å).

Найкоротшими віддалями у структурі твердого розчину $Y_5Sn_{3-1,7}Bi_{0-1,3}$ є віддалі між атомами Y1 і статистичною сумішшю атомів M (δ_{Y1-M} = 3,08–3,09 Å, δ_{Y2-M} = 3,18–3,20 Å), а також між атомами Y (δ_{Y2-Y2} = 3,24–3.27 Å). Ці віддалі є меншими за суму атомних радусів компонентів ($r_{ат.}$(Y) = 1,78, $r_{ат.}$(Sn) = 1,62, $r_{ат.}$(Bi) = 1,70 Å [18]), що свідчить про сильну взаємодію між відповідними атомами і значну частку ковалентності зв'язків ($r_{ков.}$(Y) = 1,62, $r_{ков.}$(Sn) = 1,41, $r_{ков.}$(Bi) = 1,46 Å [18]). Значення інших міжатомних віддалей корелюють з відповідними сумами атомних радіусів компонентів. Варто зазначити, що у структурі твердого розчину $Y_5Sn_{3-1,7}Bi_{0-1,3}$ немає гомоатомних зв'язків між атомами *p*-елементів (найкоротша віддаль δ_{M-M} = 3,75 Å).

Таблиця 4

Умови експерименту та результати уточнення
кристалічної структури тернарної фази $Y_5Sn_{3-1,7}Bi_{0-1,3}$

Table 4

Experimental conditions and results of the refinement
of the crystal structures of the ternary phase $Y_5Sn_{3-1.7}Bi_{0-1.3}$

Склад зразка	$Y_{62,5}Sn_{37,5}$	$Y_{62,5}Sn_{33,5}Bi_4$	$Y_{62,5}Sn_{28,5}Bi_9$	$Y_{62,5}Sn_{25,5}Bi_{12}$	$Y_{62,5}Sn_{12,5}Bi_{25}$[1]
Уточнений склад фази	Y_5Sn_3	$Y_5Sn_{2,68(2)}Bi_{0,32(2)}$	$Y_5Sn_{2,28(2)}Bi_{0,72(2)}$	$Y_5Sn_{2,05(3)}Bi_{0,95(3)}$	$Y_5Sn_{1,72(4)}Bi_{1,28(4)}$
Структурний тип	Mn_5Si_3				
Символ Пірсона	*hP*16				
Просторова група	$P6_3/mcm$				
Параметри елементарної комірки: *a*, Å	8,8935(4)	8,9052(4)	8,9256(3)	8,9426(6)	8,9718(3)
c, Å	6,5355(3)	6,5306(3)	6,5173(2)	6,5035(5)	6,4734(2)
Об'єм комірки *V*, Å^3	447,66(3)	448,50(3)	449,65(3)	450,41(6)	451,25(2)
Кількість формульних одиниць *Z*	2				
Густина D_X, г·см$^{-3}$	5,940	6,143	6,394	6,536	6,743
Параметр текстури *G* / [напрям]	0,9029(19)/ [001]	0,984(2) / [001]	0,925(5) / [001]	0,988(7) [001]	0,981(3) [001]
Параметри профілю:*U*	0,273(11)	0,308(7)	0,261(7)	0,290(9)	0,211(4)
V	0,105(10)	0,104(9)	0,114(7)	0,121(9)	0,103(4)
W	0,022(4)	0,026(3)	0,0250(16)	0,028(4)	0,055(6)
Параметр змішування η	0,516(15)	0,692(8)	0,712(14)	0,520(18)	0,381(18)
Параметри асиметрії:*P*1	0,110(19)	0,103(19)	0,102(18)	0,114(17)	0,104(11)
*P*2	0,060(3)	0,053(4)	0,032(2)	0,041(3)	0,031(4)
Фактори розбіжності:R_B	0,0471	0,0428	0,0435	0,0614	0,0536
R_p	0,0254	0,0325	0,0291	0,0399	0,0413
R_{wp}	0,0331	0,0427	0,0383	0,0525	0,0527
χ^2	1,27	1,32	1,14	1,63	1,49
Координати атомів[2]:					
x (Y1)	0,2395(2)	0,2396(3)	0,2397(2)	0,2393(3)	0,2391(4)
x (*M*)	0,6036(2)	0,6037(2)	0,60384(18)	0,6043(3)	0,6056(3)
Склад статистичної суміші *M*	Sn	0,893(8)Sn + 0,107(8)Bi	0,758(7)Sn + 0,242(7)Bi	0,682(10)Sn + 0,318(10)Bi	0,573(13)Sn + 0,427(13)Bi
Ізотропні параметри зміщення атомів:					
$B_{ізо}$(Y1), Å^2	0,98(6)	0,94(7)	0,89(3)	0,83(4)	0,87(4)
$B_{ізо}$(Y2), Å^2	1,16(7)	1,13(7)	1,06(3)	1,01(4)	1,05(4)
$B_{ізо}$(*M*), Å^2	0,85(4)	0,72(5)	0,68(3)	0,65(3)	0,62(3)
Найкоротші міжатомні віддалі:					
δ(Y1–*M*), Å	3,075(2)	3,079(2)	3,085(2)	3,087(2)	3,087(5)
δ(Y2–*M*), Å	3,1796(5)	3,1822(5)	3,1863(5)	3,1902(8)	3,1976(8)
δ(Y1–Y1), Å	3,689(2)	3,696(3)	3,706(4)	3,707(5)	3,716(4)
δ(Y1–Y2), Å	3,825(2)	3,828(2)	3,833(2)	3,840(3)	3,848(2)
δ(Y2–Y2), Å	3,2678(3)	3,2651(3)	3,2587(2)	3,2518(5)	3,2367(2)
δ(*M*–*M*), Å	3,7515(12)	3,7511(12)	3,7490(12)	3,7488(12)	3,7506(19)

[1] Трифазний зразок: $Y_5Sn_{1,72(4)}Bi_{1,28(4)}$ (65,4(8) мас. %), $Y_5Sn_{0,56}Bi_{2,44}$ (26,7(4) мас. %), $YSn_{0,1}Bi_{0,9}$ (7,9(2) мас. %);
[2] Y1 (6*g*) *x* 0 1/4, Y2 (4*d*) 1/3 2/3 0, *M* ((6*g*) *x* 0 1/4).

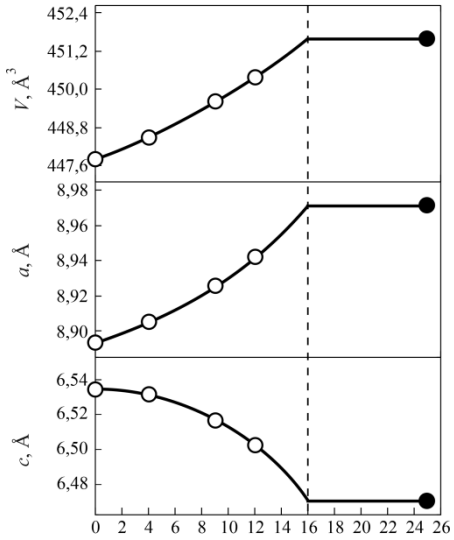


Рис. 3. Залежність параметрів елементарної комірки від вмісту Bi в області гомогенності твердого розчину $Y_5Sn_{3-1.72}Bi_{0-1.28}$
Fig. 3. Dependence of the unit-cell parameters on the Bi content within the homogeneity range of the solid solution $Y_5Sn_{3-1.72}Bi_{0-1.28}$

Для твердого розчину заміщення $Y_5Sn_{3-1,72}Bi_{0-1,28}$ (СТ Mn_5Si_3, СП *hP*16, ПГ $P6_3/mcm$) спостерігається анізотропна зміна параметрів елементарної комірки: за збільшення вмісту Bi параметр *a* елементарної комірки збільшується (*a* = 8,8935(4)–8,9718(3) Å), тоді як параметр *c* – зменшується (*c* = 6,5355(3)–6,4734(2) Å); об'єм елементарної комірки при цьому збільшується (*V* = 447,66(3)–451,25(2) $Å^3$). Залежності параметрів та об'єму елементарної комірки є нелінійними: для параметра *a* та об'єму *V* елементарної комірки спостерігаються від'ємні відхилення від правила Веґарда, тоді як для параметра *c* – додатне відхилення від правила Веґарда (рис. 3).

4. Висновки

Ізотермічний переріз діаграми стану потрійної системи Y–Sn–Bi за температури 600 °C характеризується існуванням обмежених твердих розчинів заміщення на основі бінарних сполук Y_5Sn_3 (16 ат. % Bi), Y_5Sn_4 (5,4 ат. % Bi), $Y_{11}Sn_{10}$ (6,2 ат. % Bi), YSn_2 (4,5 ат. % Bi), Y_5Bi_3 (7 ат. % Sn) та YBi (5 ат. % Sn). Заміщення атомів Sn на атоми Bi у бінарній сполуці Y_5Sn_3 (СТ Mn_5Si_3, СП *hP*16, ПГ $P6_3/mcm$) супроводжується протилежною зміною параметрів елементарної комірки: параметр *a* елементарної комірки збільшується, тоді як параметр *c* – зменшується; об'єм елементарної комірки при цьому збільшується. Залежності параметра *a* та об'єму *V* елементарної комірки характеризуються від'ємними відхиленнями від правила Веґарда, а параметра *c* – додатним відхиленням від правила Веґарда.

5. Подяка

Роботу виконано за фінансової підтримки ґранту від U.S. Office of Naval Research Global (ONRG) і U.S. National Academy of Sciences (NAS) за програмою "International Multilateral Partnerships for Resilient Education and Science System in Ukraine" (IMPRESS-U) в рамках ґранту "Розділення структури та складу з поліморфами фаз Цинтля", а також ґранту Міністерства освіти і науки України № 0124U000989.

---

1. *Villars P., Cenzual K. (Eds.).* Pearson's Crystal Data – Crystal Structure Database for Inorganic Compounds. Materials Park: ASM International (OH), Release 2023/24.
2. *Hulliger F., Ott H. R.* Superconductivity of lanthanum pnictides // J. Less-Common Met. 1977. Vol. 55. P. 103–113. DOI: https://doi.org/10.1016/0022-5088(77)90266-1
3. *Ge M. H., Corbett J. D.* Synthesis, structure, and bonding of $Eu_3Bi(Sn,Bi)_4$. A rare inverse-Cr_5B_3-type structure with a new tin/bismuth network // Inorg. Chem. 2007. Vol. 46. P. 6864–6870. DOI: https://doi.org/10.1021/ic070281c
4. *Choi W., Lee J., Lee Y., Ahn K., You T. S.* Single and double-doping effects on the thermoelectric properties of two Zintl compounds: $Eu_{11}Bi_{8.07(2)}Sn_{1.93}$ and $Eu_{10.74(2)}K_{0.26}Bi_{9.14(2)}Sn_{0.86}$ // Dalton Trans. 2017. Vol. 46. P. 11840–11850. DOI: https://doi.org/10.1039/C7DT02410J
5. *Ge M. H., Corbett J. D.* Crystal structure of hendecaytterbium ditin octabismuthide, $Bi_8Sn_2Yb_{11}$ // Z. Kristallogr. New Cryst. Struct. 2012. Vol. 227. P. 283–284. DOI: https://doi.org/10.1524/ncrs.2012.0137
6. *Liang Y., Cardoso Gil R. H., Schnelle W., Zhao J. T., Grin Y.* Synthesis, crystal structure and physical properties of $Yb_{11}Bi_{10-x}Sn_x$ // Solid State Sci. 2013. Vol. 18. P. 127–130. DOI: https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2013.01.010
7. *Villars P., Cenzual K., Daams J. L. C., Hulliger F., Massalski T. B., Okamoto H., Osaki K., Prince A. (Eds.).* Pauling File. Binaries Edition. Materials Park: ASM International (OH), 2002.
8. *Massalski T. B.* (Ed.). Binary Alloy Phase Diagrams. 2nd Edition, Plus Updates, CD version 1.0. Materials Park: ASM International (OH), 1996.
9. *Holmén S.* A $D8_8$-type phase in the yttrium-tin system // Acta Chem. Scand. 1964. Vol. 18. P. 2394.
10. *Schmidt F. A., McMasters O. D.* Yttrium-tin alloy system // Less-Common Met. 1968. Vol. 15. P. 1–11. DOI: https://doi.org/10.1016/0022-5088(68)90002-7
11. *Zhu Y., Cao H., Fang Z., Weng H.* et al. Multiple topologically nontrivial bands in noncentrosymmetric YSn_2 // Phys. Rev. B. 2018. Vol. 98. Art. 035117. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.035117
12. *Palenzona A., Manfrinetti P.* The tin-rich side of the rare earth-tin systems (*R* = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Lu and Y) // J. Alloys Compd. 1993. Vol. 201. P. 43–47. DOI: https://doi.org/10.1016/0925-8388(93)90859-L
13. *Miller K., Hall H. T.* High-pressure synthesis of rare earth-tritin compounds // Inorg. Chem. 1972. Vol. 11. P. 1188–1191. DOI: https://doi.org/10.1021/ic50112a006
14. *Wang Y., Gabe E. J., Calvert L. D., Taylor J. B.* The crystal structure of Y_5Bi_3 and its relation to the Mn_5Si_3 and the Yb_5Sb_3 type structures // Acta Crystallogr., Sect. B. 1976. Vol. 32. P. 1440–1445. DOI: https://doi.org/10.1107/S0567740876005529

15. *Yoshihara K., Taylor J. B., Calvert L. D., Despault G. J. G.* Rare-earth bismuthides // J. Less-Common Met. 1975. Vol. 41. P. 329–337. DOI: https://doi.org/10.1016/0022-5088(75)90038-7
16. STOE *WinXPow* (Version 2.21). Darmstadt: Stoe & Cie, 2005.
17. *Rodríguez-Carvajal J.* Recent developments of the Program *FULLPROF* // Commission on Powder Diffraction (IUCr), Newsletter. 2001. Vol. 26. P. 12–19.
18. *Gladyshevskii R. E., Pukas S. Ya.* Applied Crystal Chemistry. 4th Edition // Ivan Franko National University of Lviv. 2022. 126 p. (in Ukrainian).

ISOTHERMAL SECTION OF THE PHASE DIAGRAM OF THE SYSTEM Y–Sn–Bi (600 °C)

I. Ohonovskyi*, Ya. Tokaychuk, R. Gladyshevskii

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

The interaction of the components in the ternary system Y–Sn–Bi was studied by X-ray diffraction and energy-dispersive X-ray spectroscopy, and the isothermal section of the phase diagram at 600 °C was constructed in the full concentration range. The compositions and crystal structures of four binary stannides in the system Y–Sn and two binary bismuthides in the system Y–Bi were confirmed. On the basis of binary compounds, limited substitutional solid solutions are formed. The binary compound Y_5Sn_3 exhibits the highest solubility of the third component, accommodating up to 16 at. % Bi. The binary stannides Y_5Sn_4, $Y_{11}Sn_{10}$, and YSn_2 dissolve 5.4, 6.2, and 4.5 at. % Bi, respectively, whereas the binary bismuthides Y_5Bi_3 and YBi dissolve 7 and 5 at. % Sn, respectively.

Isothermal section of the phase diagram of the ternary system Y–Sn–Bi at 600 °C is characterized by eight single-phase, thirteen two-phase, and six three-phase regions. The substitutional solid solution based on yttrium monobismuthide (YBi) forms the largest number of binary equilibria (six). At 600 °C, alloys of the binary Sn–Bi system remain in the liquid state. Two phases are in equilibrium with the liquid – substitutional solid solutions based on the binary compounds YSn_2 and YBi.

For the substitutional solid solution $Y_5Sn_{3-1.72}Bi_{0-1.28}$ (structure type Mn_5Si_3, Pearson symbol *hP*16, space group $P6_3/mcm$), an anisotropic variation of the unit-cell parameters is observed: with increasing Bi content, the cell parameter *a* increases (a = 8.8935(4)–8.9718(3) Å), whereas the cell parameter *c* decreases (c = 6.5355(3)–6.4734(2) Å). Consequently, the unit-cell volume increases (V = 447.66(3)–451.25(2) Å^3). The dependencies of the unit-cell parameters and volume are nonlinear: for parameter *a* and volume *V*, negative deviations from Vegard's law are observed, while for parameter *c*, a positive deviation from Vegard's law is evident.

Keywords: yttrium, tin, bismuth, X-ray powder diffraction, phase diagram, solid solution, crystal structure.

Стаття надійшла до редколегії 12.11.2025
Після доопрацювання 12.02.2026
Прийнята до друку 05.03.2026
Оприлюднена онлайн 29.05.2026