

УДК 546.665'683'62

НОВІ СПОЛУКИ ІЗ СТРУКТУРОЮ ТИПУ $\sim\text{SmZn}_{11}$ У СИСТЕМАХ $RE\text{-Zn-Al}$ ($RE - Y, Gd\text{-Yb}$)

І. Арсенюк* , Б. Стельмахович 

Львівський національний університет імені Івана Франка,
вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005 Львів, Україна
*e-mail: ivankaarseniuk21@gmail.com

Методом рентгеноструктурного аналізу визначено кристалічну структуру семи нових інтерметалічних сполук з гексагональною структурою типу $\sim\text{SmZn}_{11}$ (просторова група $P6/mmm$) у потрійних системах $RE\text{-Zn-Al}$ ($RE - Y, Gd\text{-Tm}$). Методом порошку повністю уточнено кристалічну структуру для двох сполук: $\text{Dy}_{4,22}\text{Zn}_{32,2}\text{Al}_{2,0}$ ($a = 0,89988(5)$, $c = 0,87642(5)$ нм) та $\text{Er}_{4,14}\text{Zn}_{31,72}\text{Al}_{1,82}$ ($a = 0,897879(6)$, $c = 0,875038(9)$ нм).

Ключові слова: рентгеноструктурний аналіз, статистична суміш атомів, кристалічна структура.

DOI: <https://doi.org/10.30970/vch.6701.053>

1. Вступ

Під час дослідження фазових рівноваг системи Dy-Zn-Al з'ясовано, що в області, багатій цинком, за складу $\sim\text{Dy}_{10}\text{Zn}_{82}\text{Al}_8$, утворюється нова тернарна сполука невідомої структури. З літератури відомо, що у системі Yb-Zn-Al існує сполука складу $\text{Yb}_{3,51}\text{Zn}_{32,18}\text{Al}_{1,26}$ зі структурою, спорідненою до структурного типу (СТ) $\sim\text{SmZn}_{11}$, просторова група (ПГ) $P6/mmm$ з параметрами елементарної комірки $a = 0,90458$, $c = 0,88547$ нм [1], а в праці [2] автори визначили структуру близької за складу сполуки $\text{Yb}_{3,361}\text{Zn}_{30,94}\text{Al}_{4,34}$, яка належить до цього ж СТ з параметрами комірки $a = 0,9061$, $c = 0,8878$ нм. Очевидно, йдеться про одну і цю ж сполуку, яка має незначну область гомогенності. За систематичного дослідження системи Er-Zn-Al автори [3] дослідили кристалічну структуру сполуки $\text{Er}_{3,448}\text{Zn}_{32,19}\text{Al}_{1,89}$ із близькоспорідненою до СТ $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ структурою (ПГ $P6_3/mmc$, $a = 0,897835$, $c = 0,874981$ нм).

Ми припустили ізоструктурність цих сполук. Мета нашої праці – дослідження кристалічної структури нової сполуки і пошук нових тернарних сполук у системах $RE\text{-Zn-Al}$, де RE – важкі рідкісноземельні елементи.

2. Матеріали та методика експерименту

Зразки для дослідження синтезували спіканням спресованих у таблетки порошків вихідних компонентів ($RE > 99,5$ % мас., $\text{Zn} > 99,9$ % мас., $\text{Al} > 99,99$ % мас.) у корундових тиглях, поміщених у вакуумовані кварцові ампули, заповнених аргоном за умов повільного нагрівання до ~ 700 С. Одержані зразки розтирали в порошки, повторно пресували і гомогенізували зо 500 С упродовж 250 год. Дослідження проводили за дифрактограмами порошку, одержаними на автоматичних

дифрактометрах ДРОН 3М (Cu $K\alpha$ - випромінювання, Ni β -фільтр), ДРОН 2 (Fe $K\alpha$ - випромінювання, MnO₂ β -фільтр) та STOE STADI P (Cu $K\alpha_1$ -випромінювання, увігнутий Ge-монохроматор). Всі розрахунки для проведення фазового аналізу та уточнення кристалічних структур виконували з використанням комплексу програм WinCSD [4].

3. Результати експериментальних досліджень

Зразок складу Dy₈Zn₈₅Al₇ проіндексували в гексагональній сингонії з параметрами комірки, наведеними в табл. 1. Уточнення кристалічної структури проводили в моделі СТ ~SmZn₁₁. Умови та результати рентгендифракційних досліджень наведено в табл. 1, координати, спосіб розподілу атомів та їх температурні параметри – в табл. 2. Атоми алюмінію статистично заміщують атоми цинку в кристалографічних позиціях 2*e* і 6*j*, склад сполуки, згідно з результатами рентгенструктурних досліджень, описує формула Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}, що задовільно корелює зі складом вихідного зразка і результатами фазового аналізу. Експериментальну, розраховану та різницеву дифрактограми зображено на рис. 1.

Таблиця 1

Умови рентгеноструктурного дослідження сполуки Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}

Table 1

Conditions for X-ray structural analysis of the Dy₄ Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0} compound

Сполука	Dy _{4,22} Zn _{32,2} Al _{2,0}
Структурний тип	~SmZn ₁₁
Просторова група, №	<i>P6/mmm</i> , № 191
Параметри ґратки, нм	<i>a</i> = 0,89988(5), <i>c</i> = 0,87642(5)
Об'єм комірки, нм ³	0,6146(3)
Кількість атомів у комірці	38,4
Густина (розрахована), г/см ³	7,683(1)
Випромінювання, нм	Cu $K\alpha_1$ λ = 0,1540562
Спосіб уточнення	Full profile (метод Рітвельда)
$2\theta_{\text{макс}}$, $\sin\theta_{\text{макс}}/\lambda$	120,34 5,63
Скалярний чинник	0,26762(1)
R _I , R _P	0,073, 0,136

Таблиця 2

Атомні координати та ізотропні температурні параметри ($10^2, \text{nm}^2$) у структурі сполуки $\text{Dy}_{4,22}\text{Zn}_{32,2}\text{Al}_{2,0}$

Table 2

Atomic coordinates and isotropic temperature parameters ($10^2, \text{nm}^2$) in the structure of the $\text{Dy}_{4,22}\text{Zn}_{32,2}\text{Al}_{2,0}$ compound

Атом	Позиція	x	y	z	$B_{\text{ізо}}, 10^2 \text{nm}^2$
Dy1	1a	0	0	0	0,68(4)
Dy2	2d	2/3	1/3	1/2	0,92(4)
Dy3 ^a	2c	2/3	1/3	0	0,70(5)
Zn1 ^a	4h	2/3	1/3	0,154(3)	0,91(5)
Zn2	6i	1/2	0	0,264(2)	0,83(4)
Zn3	6j	0,6526(13)	0	0	0,92(4)
Zn4	12o	0,1688(6)	2x	0,7615(14)	0,53(4)
X1 ^a	2e	0	0	0,353(5)	0,97(5)
X2 ^a	6k	0,2965(13)	0	1/2	0,97(4)

^aG, (%) Dy3 = 61(2)Dy, Zn1 = 56(3)Zn, X1 = 70(7)Al + 30(7)Zn, X2 = 10(3)Al + 90(3)Zn.

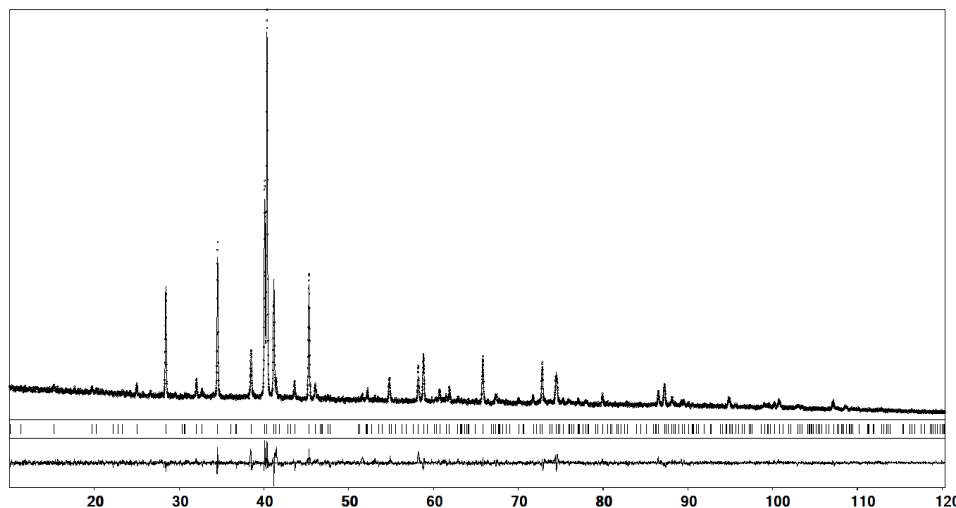


Рис. 1. Експериментальна, розрахована та різницева дифрактограми сполуки $\text{Dy}_{4,22}\text{Zn}_{32,2}\text{Al}_{2,0}$ ($\text{Cu } K\alpha_1$ - випромінювання)

Fig. 1. Experimental, calculated and difference diffractograms of the $\text{Dy}_{4,22}\text{Zn}_{32,2}\text{Al}_{2,0}$ compound ($\text{Cu } K\alpha_1$ - radiation)

Кристалічну структуру сполуки з ербієм розраховували за рентгенограмою зразка вихідного складу $\sim\text{Er}_9\text{Zn}_{84}\text{Al}_7$, який як другу фазу містив сполуку $\text{ErZn}_{12-x}\text{Al}_x$ (СТ ThMn_{12}) (імовірно граничний склад твердого розчину на основі бінарної фази ErZn_{12}). Умови та результати уточнення кристалічної структури наведено в табл. 3, 4.

Таблиця 3

Результати рентгеноструктурного аналізу двофазового зразка складу $\text{Er}_9\text{Zn}_{84}\text{Al}_7$

Table 3

Results of X-ray structural analysis of a two-phase sample with a composition of $\text{Er}_9\text{Zn}_{84}\text{Al}_7$

Фаза	$\text{Er}_{4,14}\text{Zn}_{31,72}\text{Al}_{1,82}$	$\text{ErZn}_{10,8}\text{Al}_{1,2}$
Структурний тип	$\sim\text{SmZn}_{11}$	ThMn_{12}
Просторова група, №	$P6/mmm, 191$	$I4/mmm$
Параметри ґратки, нм	$a = 0,897879(6)$ $c = 0,875038(9)$	$a = 0,88644(1)$ $c = 0,522628(9)$
Об'єм комірки, нм^3	0,61093(2)	0,41067(2)
Кількість атомів у комірці	37,7	26,0
Густина (розрахована), г/см^3	7,6557(2)	7,3296(3)
Випромінювання, нм	Cu $K\alpha_1$ $\lambda = 1,54056$	
Спосіб уточнення	Full profile (метод Рітвельда)	
$2\theta_{\text{макс}}, \sin\theta_{\text{макс}}/\lambda$	142,0	6,14
Скалярний чинник	0,30238	0,32871
R_1, R_p	0,075 0,156	0,129 0,156
Вміст фази (мас. %)	74,1	25,9

Таблиця 4

Атомні координати та ізотропні температурні параметри ($10^2, \text{нм}^2$) у структурі сполуки $\text{Er}_{4,14}\text{Zn}_{31,72}\text{Al}_{1,82}$

Table 4

Atomic coordinates and isotropic temperature parameters ($10^2, \text{нм}^2$) in the structure of the $\text{Er}_{4,14}\text{Zn}_{31,72}\text{Al}_{1,82}$ compound

Атом	Позиція	x	y	z	$B_{\text{ізо}}, 10^2 \text{нм}^2$
Er1	1a	0	0	0	1,28(1)
Er2	2d	1/3	2/3	1/2	1,62(1)
Er3 ^a	2c	1/3	2/3	0	1,04(1)
Zn1 ^a	4h	1/3	2/3	0,1579(11)	0,95(1)
Zn2	6i	1/2	0	0,2701(6)	1,32(1)
Zn3	6j	0,6523(4)	0	0	1,37(1)
Zn4	12o	0,1691(2)	2x	0,7576(5)	1,37(1)
X1 ^a	2e	0	0	0,3568(11)	1,06(1)
X2 ^a	6k	0,2948(4)	0	1/2	1,35(1)

^aG, (%) Er3 = 57,1(5)Er, Zn1 = 39,8(9)Zn, X1 = 61(2)Al + 39(2)Zn, X2 = 10,9(9)Al + 89,1(9)Zn.

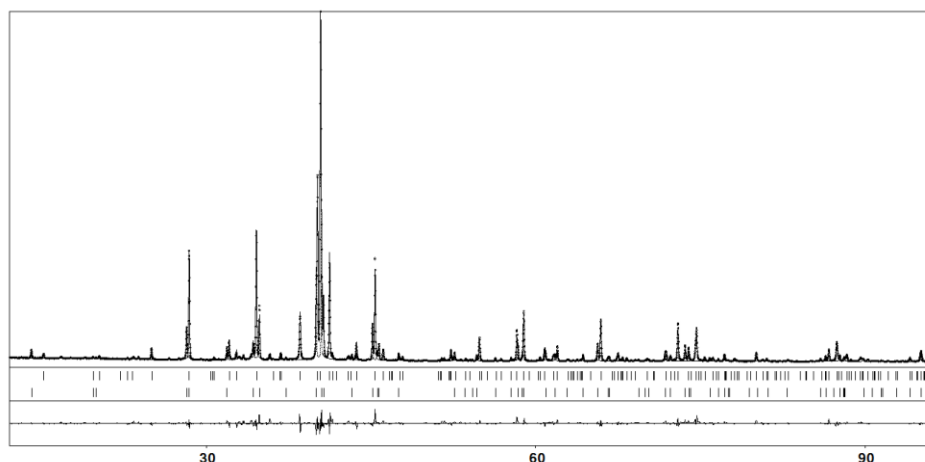


Рис. 2. Експериментальна, розрахована та різницева дифрактограми двофазного зразка складу $Er_9Zn_{84}Al_7$ ($Cu\ K\alpha_1$ - випромінювання)
 Fig. 2. Experimental, calculated and difference diffractograms of the $Er_9Zn_{84}Al_7$ compound ($Cu\ K\alpha_1$ - radiation)

Міжатомні віддалі задовільно корелюють сумам атомних радіусів компонентів ($r_{Dy} = 0,1773$ нм, $r_{Er} = 0,1757$ нм, $r_{Zn} = 0,1332$ нм, $r_{Al} = 0,1431$ нм) [5]. Найбільше скорочення між атомами *RE* і *Zn* в кристалографічних позиціях *2c* і *6k* не перевищує ~5 %, що не суперечить атомним віддалям у структурах інтерметалічних сполук (табл. 5).

Таблиця 5

Міжатомні віддалі (δ , нм) у структурі сполук $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ та $Er_{4,14}Zn_{31,72}Al_{1,82}$

Table 5

Interatomic distances (δ , nm) in the structure of $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ and $Er_{4,14}Zn_{31,72}Al_{1,82}$ compounds

Атоми	$Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$		$Er_{4,14}Zn_{31,72}Al_{1,82}$		КЧ
	δ , нм	* Δ (%)	δ , нм	Δ (%)	
<i>RE1</i> – 6 <i>Zn3</i> – 2 <i>X1</i> – 12 <i>Zn4</i> – 12 <i>Zn2</i>	0,3127(6)	+0,7	0,3122(2)	+1,1	20
	0,309(4)	–2,7	0,3122(9)	–0,9	
	0,3360(9)	+8,2	0,3379(3)	+9,4	
	0,5068(2)	+64	0,5073(2)	+65	
<i>RE2</i> – 2 <i>Zn1</i> – 6 <i>X2</i> – 6 <i>Zn2</i> – 6 <i>Zn4</i> – 2 <i>RE3</i>	0,303(3)	–2,4	0,2993(10)	–3,1	20
	0,3178(6)	+2,0	0,3180(2)	+2,6	
	0,3319(9)	+6,9	0,3281(3)	+6,2	
	0,3440(9)	+10,8	0,3407(3)	+10,3	
	0,43821(2)	+23,6	0,43752(1)	+24,5	
* <i>RE3</i> – 2 <i>Zn1</i> – 6 <i>Zn3</i> – 6 <i>Zn4</i> – 6 <i>Zn2</i> – 2 <i>RE2</i>	0,135(3)	–56,5	0,1382(10)	–55,3	18
	0,2938(6)	–5,4	0,2931(2)	–5,1	
	0,3309(9)	+6,6	0,3320(3)	+7,5	
	0,3481(10)	+12,1	0,3508(4)	+13,6	
	0,43821(2)	+41,1	0,43752(1)	+24,5	

Закінчення табл. 5

*Zn1 – 1RE3	0,1355(3)	–56,4	0,1382(10)	–55,3	
– 3Zn4	0,2669(10)	+0,2	0,2659(3)	–0,2	
– 1Zn1	0,271(4)	+1,7	0,2764(14)	+3,8	8
– 3Zn2	0,2771(11)	+4,0	0,2772(4)	+4,1	
– 1RE2	0,303(3)	–2,4	0,2993(3)	–3,1	
– 6Zn3	0,3235(13)	+21,4	0,3240(5)	+21,6	
Zn2 – 4Zn4	0,2592(6)	–2,7	0,2585(2)	–3,0	
– 2Zn3	0,2693(13)	+1,1	0,2731(5)	+2,5	
– 2X2	0,2760(11)	+3,2	0,2728(4)	+2,0	12
– 2Zn1	0,2771(11)	+4,0	0,2772(4)	+4,1	
– 2RE2	0,3319(9)	+6,9	0,3281(3)	+6,2	
– 2RE3	0,3481(10)	+12,1	0,3508(4)	+13,6	
Zn3 – 4Zn4	0,2612(11)	–2,0	0,2634(4)	–1,1	
– 2Zn2	0,2693(13)	+1,1	0,2731(5)	+2,5	
– 1Zn3	0,2745(8)	+3,0	0,2735(3)	+2,7	
– 2RE3	0,2938(6)	–5,4	0,2931(2)	–5,1	12
– 1RE1	0,3127(3)	+0,7	0,3122(2)	+1,1	
– 2Zn3	0,3127(8)	+17,4	0,3122(3)	+17,2	
– 4Zn1	0,3235(13)	+21,4	0,3240(5)	+21,6	
Zn4 – 2Zn2	0,2592(6)	–2,7	0,2585(2)	–3,0	
– 2Zn3	0,2612(11)	–2,0	0,2634(4)	–1,1	
– 2Zn4	0,2630(8)	–1,3	0,2630(2)	–1,3	
– 1Zn1	0,2669(10)	+0,2	0,2659(3)	–0,2	
– 2X2	0,2671(11)	–0,1	0,2636(4)	–1,4	13
– 1X1	0,281(1)	+2,8	0,2814(4)	+3,3	
– 1RE3	0,3309(9)	+6,6	0,3320(3)	+7,5	
– 1RE1	0,3360(9)	+8,2	0,3379(3)	+9,4	
– 1RE2	0,3440(9)	+10,8	0,3407(3)	+10,3	
– 1Zn4	0,4213(5)	+55,2	0,4242(6)	+55,9	
X1 – 1X1	0,258(4)	–7,9	0,2506(13)	–10,0	
– 6Zn4	0,281(2)	+2,8	0,2814(4)	+3,3	
– 6X2	0,296(2)	+7,9	0,2928(4)	+9,5	14
– 1RE1	0,309(4)	–2,7	0,3122(9)	–0,9	
– 6Zn4	0,4356(8)	+56,2	0,4384(8)	+56,4	
X2 – 2X2	0,2669(8)	–0,6	0,2647(3)	–1,4	
– 4Zn4	0,2671(11)	–0,1	0,2636(4)	–1,4	
– 2Zn2	0,2760(11)	+3,2	0,2728(4)	+2,0	12
– 2X1	0,296(2)	+7,9	0,2928(4)	+7,1	
– 2RE2	0,3178(6)	+2,0	0,3180(2)	+2,6	
– 1X2	0,3662(8)	+33,5	0,3685(3)	+37,3	

$$\Delta = 100(\delta - \Sigma r) / \Sigma r$$
, де Σr – сума атомних радіусів компонентів.

Курсивом позначено атоми, які не входять в координаційну сферу атома.

* Взаємовиключаючі кристалографічні позиції.

Ізоструктурні сполуки утворюються у споріднених системах $RE-Zn-Al$ ($RE - Y, Gd-Yb$) за вихідних складів $RE_{10}Zn_{85}Al_5$, що відповідає складу сполук $\sim RE_4Zn_{34}Al_2$. Зразки містили значні домішки інших фаз, тому уточнити їх кристалічні структури за результатами рентгенструктурного аналізу нам не вдалося. Уточнені за дифрактограмами порошку параметри комірки ізоструктурних сполук наведено у табл. 6. Об'єми елементарних комірок закономірно зменшуються зі збільшенням протонного числа рідкісноземельного елемента, що може свідчити про ступінь окислення +3 атомів рідкісноземельних металів. Суттєве збільшення параметрів і об'єму комірки для сполуки з Ітербієм вказує на перебування їх у стані +2, що підтверджено у [1], помірами магнітних властивостей.

Таблиця 6

Параметри та об'єми комірки сполук $RE_4Zn_{34}Al_2$

Table 6

Cell parameters and volumes of $\sim RE_4Zn_{34}Al_2$ compound

Сполука	Параметри комірки, нм		V, нм ³
	a	b	
$\sim Y_4Zn_{34}Al_2$	0,9019	0,8773	0,6180
$\sim Gd_4Zn_{34}Al_2$	0,9014	0,8779	0,6153
$\sim Tb_4Zn_{34}Al_2$	0,9002	0,8752	0,6142
$Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$	0,89921	0,87625	0,6136
$\sim Ho_4Zn_{34}Al_2$	0,89831	0,87581	0,6120
$Er_{4,1}Zn_{31,7}Al_{1,9}$	0,89788	0,87504	0,6109
$\sim Tm_4Zn_{34}Al_2$	0,8973	0,8741	0,6095
$Yb_{3,50}Zn_{32,1}Al_{1,4}$ [1]	0,90458	0,88547	0,62748

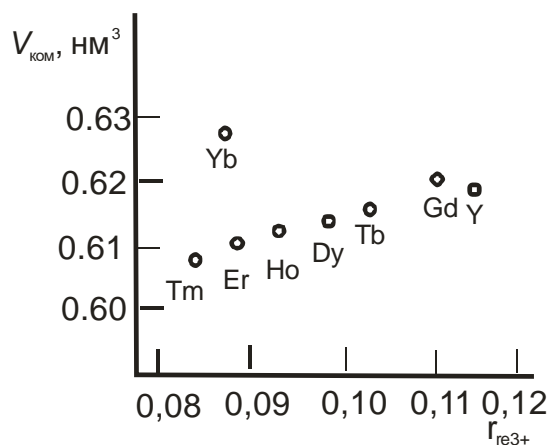


Рис 3. Залежність об'ємів елементарних комірок ізоструктурних сполук $\sim RE_4Zn_{34}Al_2$ ($RE - Y, Gd-Tm$) від атомних радіусів RE

Fig. 3. Dependence of the volumes of elementary cells

of isostructural compounds $\sim RE_4Zn_{34}Al_2$ ($RE - Y, Gd-Tm$) on the atomic radii of RE

4. Обговорення результатів та висновки

Проекцію кристалічної структури сполуки $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ та координаційні многогранники атомів зображено на рис. 4. Атоми Dy1 та Dy2 знаходяться у високосиметричних 20-вершинниках, утворених атомами малого розміру (Zn/Al). Атом Dy3 є альтернативним до пари атомів Zn1 і знаходиться в центрі шестигональної призми з додатковими атомами навпроти кожної грані (КЧ 18). Атоми X1 знаходяться в центрі многогранника, який можна описати як комбінацію гексагональної антипризми та двох гексагональних пірамід (КЧ = 14). Координаційні многогранники інших атомів малого розміру – 12-вершинники. Таким чином, кристалічна структура сполуки належить до структур з ікосаедричною координацією атомів меншого розміру згідно з класифікацією інтерметалічних сполук [6].

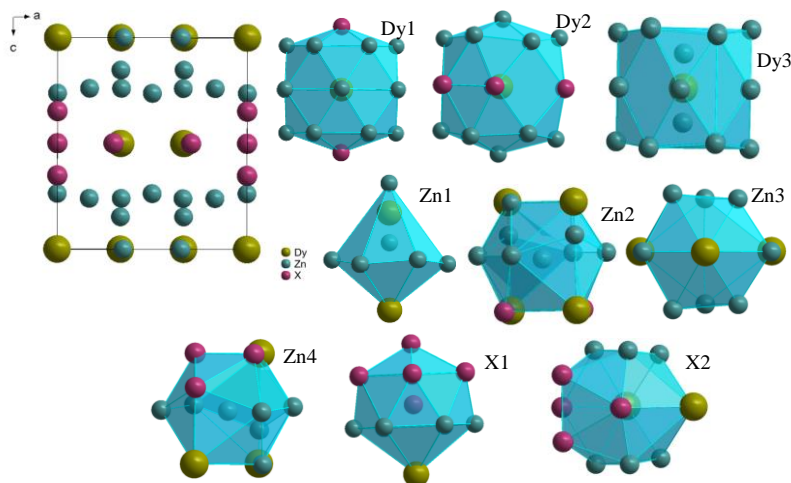


Рис. 4. Проекція кристалічної структури сполуки $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ на площину XZ та координаційні многогранники атомів
Fig. 4. Projection of the crystal structure of the $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ compound onto the XZ plane and coordination polyhedra of atoms

Структура сполуки $Dy_{4,22}Zn_{32,2}Al_{2,0}$ є похідною від структурного типу $CaCu_5$ і характеризується наявністю гексагональних і гексагон-трикутних сіток, утворених атомами меншого розміру. За $z = 0$ утворюються плоскі сітки 66 атомами Zn3, у центрі яких містяться атоми Dy3 ($2/3 \ 1/3 \ 0$, $1/3 \ 2/3 \ 0$) і Dy1 ($0 \ 0 \ 0$). Такі ж сітки 66 з атомів X2, центровані атомами Dy2, утворюються за $z = 1/2$. Між ними за $z \approx 0,24-0,27$ утворюються деформовані по Z гексагон-трикутні сітки 6363 (сітки Кагоме) атомами Zn2 та Zn4 (рис. 5).

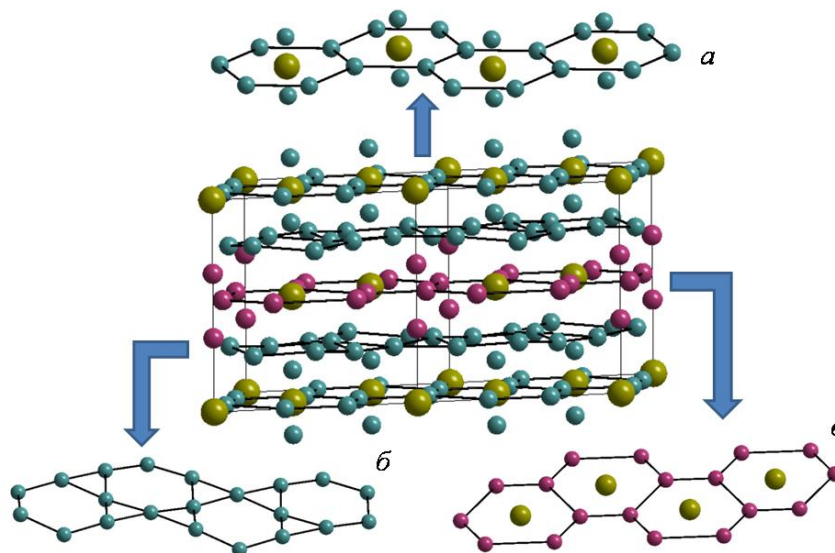


Рис. 5. Гексагональні 66 (а, б) та гексагон-трикутні 6363 сітки (в), утворені атомами меншого розміру у структурі сполуки $\text{Dy}_{4.22}\text{Zn}_{32.2}\text{Al}_{2.0}$
Fig. 5. Hexagonal 66 (a, b) and hexagon-triangular 6363 lattices (c) formed by smaller atoms in the structure of the $\text{Dy}_{4.22}\text{Zn}_{32.2}\text{Al}_{2.0}$ compound

5. Подяка

Автори висловлюють подяку за фінансову підтримку програмі Simons Foundation (Award Number: SFI-PD-Ukraine-00014574.)

1. *Stelmakhovych O., Stelmakhovych B., Uhlřřov K., Mařkov S., Havela L., Kalychak Ya.* SmZn₁₁-type derivative compound in the Yb–Zn–Al system: crystal structure and magnetic properties // J. of Solid State Chem. 2011. Vol. 184. P. 1715–1718. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2011.05.013>
2. *Fornasini M. L., Manfrinetti P., Mazzone D.* Yb–Zn–Al ternary system: CaCu₅-type derived compounds in the zinc-rich corner // J. Solid State Chem. 2006. Vol. 176. P. 2012–2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2006.03.040>
3. *Stelmakhovych B.* The limit composition of the solid solutions of Aluminium in binary compounds of the Er–Zn system // Visnyk Lviv Univ. Ser. Chem. 2013. Iss. 54(1). P. 64–69 (in Ukrainian).
4. *Akselrud L., Grin Yu.* WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4) // J. Appl. Crystallogr. 2014. Vol. 47. P. 803–805. DOI: [10.1107/S_16005767_14001058](https://doi.org/10.1107/S_16005767_14001058)
5. *Emsley J.* Die Elemente: Walter de Gruyter. Berlin. New York, 1994. 247 p.
6. *Krypyakevich P. I.* Structural types of intermetallic compounds. Moscow: Nauka, 1977. 290 p. (in russian).

**NEW COMPOUNDS WITH A STRUCTURE TYPE $\sim\text{SmZn}_{11}$
in $RE\text{-Zn-Al}$ ($RE - Y, \text{Gd-Yb}$) SYSTEMS****I. Arseniuk^{*}, B. Stelmakhovich***Ivan Franko National University of Lviv,
Kyryla i Mefodiya Str., 6, 79005 Lviv, Ukraine
^{*}e-mail: ivankaarseniuk21@gmail.com*

The crystal structure of seven new intermetallic compounds with a hexagonal structure of the $\sim\text{SmZn}_{11}$ type (space group $P6/mmm$) in the $RE\text{-Zn-Al}$ ($RE - Y, \text{Gd-Tm}$) ternary systems was determined by X-ray structural analysis. Samples for the study were synthesized by sintering the powders of the starting components pressed into tablets in corundum furnaces placed in vacuum quartz ampoules filled with argon under conditions of slow heating to ~ 700 C. The obtained samples were ground into powders, re-pressed and homogenized at 500 C for 250 h.

The powder method was used to fully refine the crystal structure for two compounds: $\text{Dy}_{4.21}\text{Zn}_{32.2}\text{Al}_{2.0}$ ($a = 0.89988(5)$, $c = 0.87642(5)$ nm) та $\text{Er}_{4.14}\text{Zn}_{31.72}\text{Al}_{1.82}$ ($a = 0.897879(6)$, $c = 0.875038(9)$ nm). A feature of the crystal structures of the new compounds is the presence of two alternative crystallographic positions $2c$ and $4h$, partially filled with RE and Zn atoms, respectively. Isostructural compounds are formed with other rare earth elements ($RE - Y, \text{Gd-Yb}$), their lattice parameters were specified by powder X-ray diffraction patterns.

The structure of the new compounds is related to the structure of the CaCu_5 type and is characterized by the formation of hexagonal 66 and hexagonal-triangular grids (Kagome grid) from smaller atoms (Zn і Al) located perpendicular to the Z axis. The unit cell contains two hexagonal grids 66 , placed at $z = 0$ і $z = 1/2$, and one Z -deformed hexagonal-triangular 6363 grid at $z \approx 0.24\text{--}0.27$.

Keywords: X-ray structural analysis, statistical mixture of atoms, crystal structure.

Стаття надійшла до редколегії 12.11.2025

Після доопрацювання 30.01.2026

Прийнята до друку 12.02.2026

Оприлюднена онлайн 29.05.2026