

**РАЗМЕРНЫЕ ЭФФЕКТЫ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ  
СОСТАВОВ АВ И А<sub>3</sub>В**

С.А. Шалыгин, Н.О. Солоницина, И.А. Рахманова

Научный руководитель профессор, д.т.н., Ю.С. Саркисов

Томский государственный архитектурно-строительный университет,

Россия, г. Томск, пл.Соляная, 2, 634003

E-mail: ir9039508837@yandex.ru

**SIZE FACTOR IN BINARY ALLOYS WITH AB AND A<sub>3</sub>B STOICHIOMETRIC COMPOUNDS**

S.A. Shalygin, N.O. Solonitsina, I.A. Rakhmanova

Academic supervisor Professor, Dr Yu.S. Sarkisov,

Tomsk State University of Architecture and Building, Russia, Tomsk, Solyanaya Sq., 2, 634003

E-mail: ir9039508837@yandex.ru

**Abstract.** *The paper focuses on the formation of metallic compounds depending on the relation between several atom parameters among which is the size factor. The analysis of the binary compounds of intermetallic alloys with the simple stoichiometric compounds of AB and A<sub>3</sub>B is presented in this paper. The block diagrams are plotted for various structures depending on the R<sub>B</sub>/R<sub>A</sub> size factor. Close-packed lattice structures are investigated herein.*

**Введение.** История изучения вопроса образования кристаллических решеток в зависимости от кристаллогеометрических параметров является длительной [1,2] и в настоящее время не потеряла своей актуальности [3,4]. Действительно, дальнейшее развитие этого подхода позволило выявить ряд принципиально новых положений [5].

В связи с этим напомним, что металлические соединения формируются в зависимости от соотношения нескольких параметров атомов. К ним относится коэффициент заполнения пространства  $\psi$ , величина сверхструктурного сжатия  $\Delta\Omega$ , число атомов на координационных сферах, кратчайшие расстояния между ближайшими соседями и др. Сосредоточим свое внимание на анализе кристаллогеометрических параметров таких, как размерный фактор, обычно выражаемый в соотношениях радиусов элементов R<sub>B</sub>/R<sub>A</sub> или  $\delta=1-R_B/R_A$  [2,3].

**Экспериментальная часть.** Роль относительных размеров атомов при формировании структур АВ и А<sub>3</sub>В можно выявить при помощи анализа распределений различных структур от размерного фактора R<sub>B</sub>/R<sub>A</sub> (рис. 1, 2). Область существования структур В2 от размерного фактора R<sub>B</sub>/R<sub>A</sub> простирается от 0,5 до 1,0 (рис. 1 а). Такое представление можно сделать только при составе АВ, и это связано с тем, что элементы в сплаве равнозначны. Из анализа гистограмм интерметаллидов со структурами В2 и L1<sub>2</sub> можно заключить, что они являются «универсальными» и могут существовать в широком интервале значений размерного фактора. При эквиатомном составе в ряде сплавов обнаружены орторомбические структуры типа В19 (рис. 1. б). Интерметаллиды с этой структурой существуют в более узком интервале размерного фактора по сравнению с универсальной структурой В2 (рис. 1. а). В том же интервале отношений атомных радиусов существуют интерметаллиды с тетрагональной

структуры  $L1_0$  (рис. 1. в). В единственной двойной системе Pt-Cu при эквипотном составе реализуется упорядоченная фаза PtCu с  $L1_1$  структурой (рис. 1. з).

Распределение структур  $L1_2$  (рис. 2 а) от размерного фактора  $R_B/R_A$  в силу асимметрии состава  $A_3B$  не может быть представлено только на участке от 0,5 до 1,0, как это имеет место для бинарных систем эквипотного состава АВ. Для состава  $A_3B$  распределение структур от размерного фактора занимает участок от 0,7 до 1,4. Т.е. существуют структуры, которые попадают в область значений размерного фактора, как меньше единицы, так и больше единицы (рис. 2). Видно, что основная масса структур в сплавах состава  $A_3B$  существует в области значений  $R_B/R_A > 1$  (за исключением структуры A15). Судя по размерному фактору, структуры состава  $A_3B$  в основном устойчивы, когда размеры атомов основного компонента больше размеров атомов не основного компонента. Распределение числа тетрагональных структур состава  $A_3B$  (рис.2 б, в) от размерного фактора показывает, что они могут существовать только при определенных значениях размерного фактора: от 1,0 до 1,2.

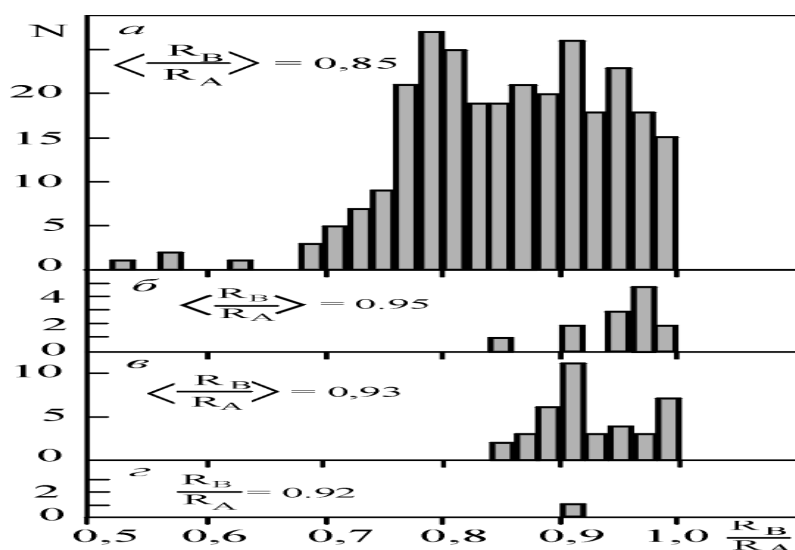


Рис. 1. Распределения в бинарных сплавах АВ интерметаллических соединений со структурами B2 (а), B19 (б),  $L1_0$  (в) и  $L1_1$  (з) от отношения атомных радиусов элементов

На сплавы с гексагональными структурами такого строгого ограничения не накладывается. Сплавы с гексагональной сингонией могут иметь значительный разброс значений размерного фактора: от 0,8 до 1,4 (рис.2 з, д). Качественно вид гистограмм от размерного фактора для сплавов со структурами  $L1_2$  и A15 похож. Хорошо просматриваются два вида максимумов: первого основного и второго более слабого. Причем второй слабый максимум полностью лежит в области значений размерного фактора больше единицы, как в интерметаллидах с  $L1_2$ , так и в A15 структурах (рис.2 а, е). При этом в структуре  $L1_2$  выполняется основной принцип, который часто описывается в учебниках по материаловедению, что в твердых растворах лучше растворяются атомы меньших размеров, чем крупных. Это нашло отражение в том, что основное количество сплавов с  $L1_2$  структурой имеет размерный фактор больше единицы. Тогда как в сплавах с A15 структурой этот принцип не всегда выполняется. Здесь, наоборот, основная масса сплавов с A15 структурой реализуется при отношении радиусов атомов  $R_B/R_A$  меньше единицы (рис. 2 е). Отличие в этой структуре от всех рассматриваемых структур состава  $A_3B$  состоит в том, что в ней нарушается принцип стремления атомов окружить себя только разноименными атомами в упорядоченных сверхструктурах [6].

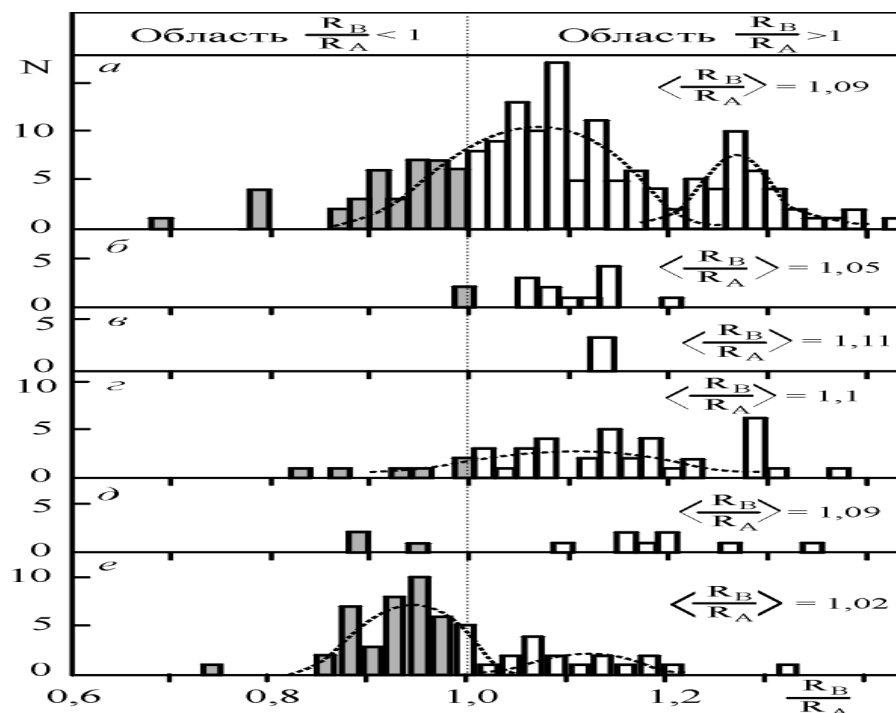


Рис. 2. Распределения в бинарных сплавах  $A_3B$  интерметаллических соединений со структурами  $L1_2$  (а),  $D0_{22}$  (б),  $D0_{23}$  (в),  $D0_{19}$  (г),  $D0_{24}$  (д) и  $A15$  (е) от отношения атомных радиусов элементов

**Выводы.** Проведен детальный и тщательный кристаллогеометрический анализ интерметаллидов стехиометрических составов АВ и  $A_3B$  в зависимости от размерного фактора. Установлено, что область существования всех структур стехиометрического состава АВ от размерного фактора  $R_B/R_A$  простирается от 0,5 до 1,0. Основная масса структур в сплавах состава  $A_3B$  существует в области значений  $R_B/R_A > 1$  (за исключением структуры  $A15$ ).

Обнаружено, что половина сплавов структуры  $A15$  образуется при условии  $R_B/R_A < 1$  и различие в размерах атомов не превышает 10%. Вторая половина существует при  $R_B/R_A > 1$  при значительном различии атомных радиусов, и это различие может достигать величины порядка 30%.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агеев Н.В. Химия металлических сплавов. - М.:АН СССР, 1941. -120с.
2. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. - М.: Наука, 1989. – 247с.
3. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. - Томск: ТГУ, 1994. -247с.
4. Потекаев А.И., Клопотов А.А. Козлов Э.В. и др. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана. - Томск: НТЛ, 2004. -296с.
5. Клопотов А.А., Солоницина Н.О., М.В. Федорищева, Козлов Э.В. Кристаллогеометрические факторы и области устойчивости соединений с  $\sigma$ -фазой //Сб. трудов. Упорядочение в металлах и в сплавах. 11-й международный симпозиум. Ростов н/Д . - 2008. С. 246-250.
6. Юм-Розери У. Факторы, влияющие на стабильность металлических фаз.- М. : Мир, 1970. - С.179-199.