

**СВЕРХСТРУКТУРНОЕ СЖАТИЕ В БИНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ 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](mailto:ir9039508837@yandex.ru)**SUPERSTRUCTURE COMPRESSION IN BINARY COMPOUNDS OF AB AND A<sub>3</sub>B COMPOSITIONS**S.A. Shalygin, N.O. Solonitsina, I.A. Rakhmanova

Professor Yu. S. Sarkisov, dsc, Academic supervisor

Tomsk State University of Architecture and Building,

Russia, Tomsk, Solyanaya Sq., 2, 634003

E-mail: [ir9039508837@yandex.ru](mailto: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  $\Delta\Omega/\Omega$  size factor. Close-packed lattice structures are investigated herein.*

**Введение.** В металлических соединениях атомный объем является чувствительным параметром, характеризующим размер атомов. Этот параметр является менее структурно зависимым параметром, чем размерный [1,2]. Это находит отражение, хоть и в интегральном виде, в изменении атомного объема. С учетом вышесказанного, параметром, учитывающим изменение размеров атомов при образовании из них сплавов, например в простейшем случае бинарного сплава, является так называемое «сверхструктурное сжатие» абсолютное или относительное [3,4]. Величина сверхструктурного сжатия соединения определяется из разницы между экспериментально определенным атомным объемом соединения и вычисленной средней величиной атомных объемов элементов, из которых она состоит ( $\Delta\Omega/\Omega$ , здесь  $\Omega$  – атомный объем,  $\Delta\Omega$  – изменение атомного объема в соединении). Сверхструктурное сжатие с комбинацией размерного фактора в кристаллических структурах является хорошим сочетанием для того, чтобы оценить вклад размеров атомов в стабильность кристаллических структур [5,6].

**Экспериментальная часть.** Роль относительных размеров атомов при формировании структур АВ и А<sub>3</sub>В можно выявить при помощи анализа гистограмм различных структур от сверхструктурного сжатия. Для интерметаллических соединений составов АВ и А<sub>3</sub>В распределение числа структур от относительного сверхструктурного сжатия приведены на рис. 1 и 2. Видно, что распределения от сверхструктурного сжатия в интерметаллидах со структурами В2 и L1<sub>2</sub> имеют полимодальный характер и распространяются на широкий спектр значений от – 0,6 до +0,4. Интерметаллиды с эквиатомным составом, обладающие орторомбической структурой В19 имеют очень узкий интервал значений сверхструктурного сжатия (рис. 1 б). Причем отклонение от закона Зена в этих структурах является незначительным. Более широкий интервал значений

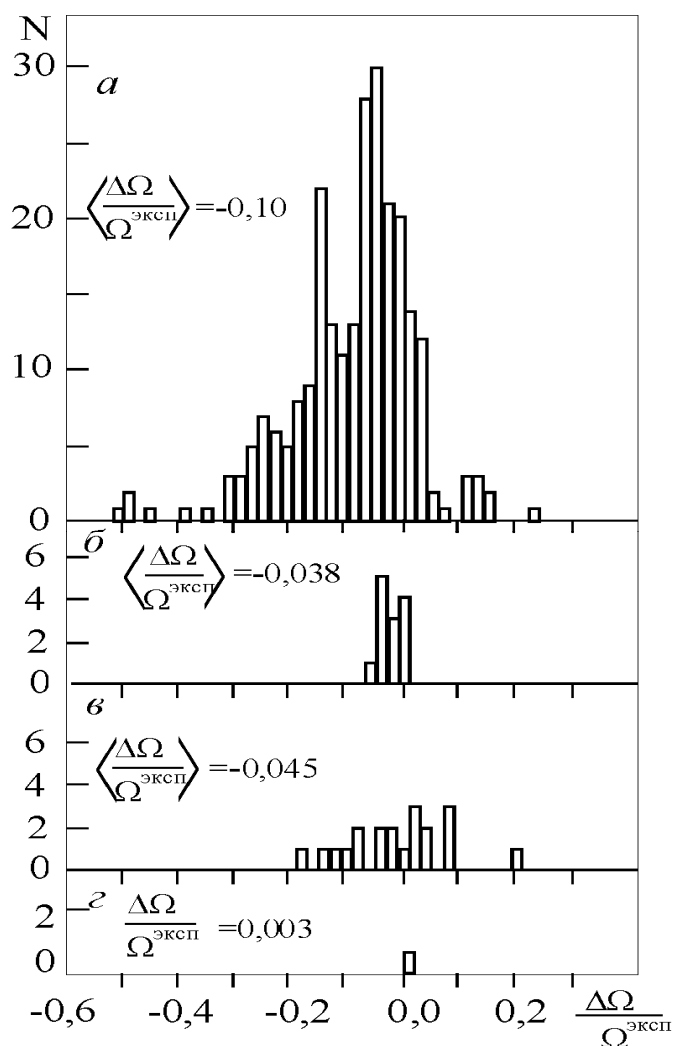


Рис. 1. Распределения в бинарных сплавах АВ интерметаллических соединений со структурами B2 (а), B19 (б), L1<sub>0</sub> (в) и L1<sub>1</sub> (г) от сверхструктурного сжатия

Сверхструктурного сжатия занимают интерметаллиды с тетрагональной структурой L1<sub>0</sub> (рис. 1 в). В сплаве PtCu с ромбоздрической структурой L1<sub>1</sub> величина сверхструктурного сжатия является минимальной и практически равна нулю (рис. 1 г). Из гистограмм интерметаллических соединений сплавов состава A<sub>3</sub>B с кубическими, тетрагональными и гексагональными структурами видно, что в этих структурах может иметь место самый широкий набор значений сверхструктурного сжатия (рис. 2.). При этом следует отметить, что во всех рассматриваемых структурах, кроме тетрагональной структуры D0<sub>22</sub> и кубической структуры A15, средняя величина сверхструктурного сжатия имеет отрицательное значение. Выявленные положительные значения сверхструктурного сжатия у интерметаллидов (особенно у структур A15 и D0<sub>22</sub>), позволяют сделать предположение, что здесь не может полностью реализоваться принцип плотной упаковки, и оказывают существенный вклад другие конкурирующие факторы.

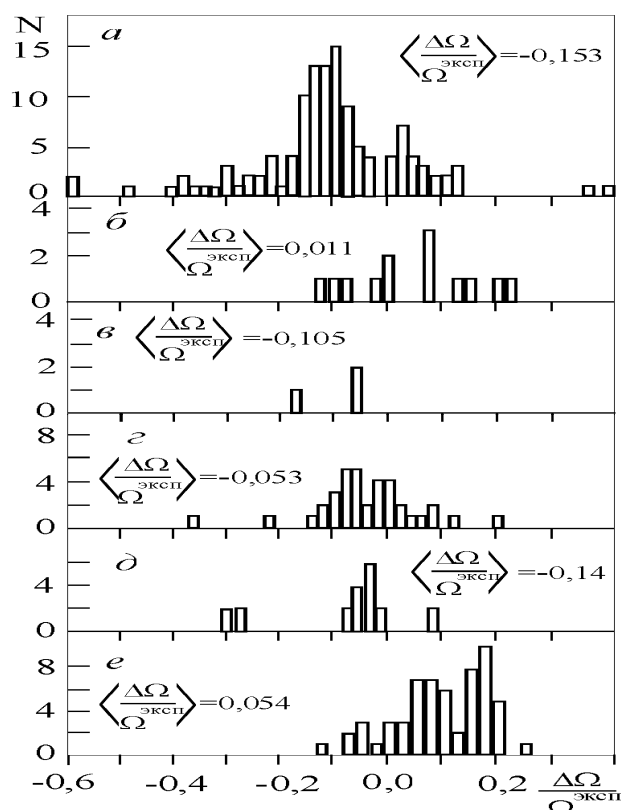


Рис. 2. Распределения интерметаллических соединений со структурами  $L1_2$  (а),  $D0_{22}$  (б),  $D0_{23}$  (в),  $D0_{19}$  (г),  $D0_{24}$  (д) и  $A15$  (е) от сверхструктурного сжатия в бинарных сплавах  $A_3B$

**Выводы.** Обнаружена важная закономерность, связанная с последовательностью изменения ширины интервалов кристаллогеометрических параметров, внутри которых могут существовать интерметаллические структуры в порядке их убывания по сверхструктурному сжатию. Для интерметаллидов состава  $AB$ : кубические структуры  $\rightarrow$  тетрагональные структуры  $\rightarrow$  орторомбические структуры. Для состава  $A_3B$ : кубические  $\rightarrow$  гексагональные и кубические  $\rightarrow$  тетрагональные.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Агеев Н.В. Химия металлических сплавов. - М.:АН СССР, 1941. -120с.
2. Юм-Розери У. Факторы, влияющие на стабильность металлических фаз.- М.: Мир, 1970. - С.179-199.
3. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. - М.: Наука, 1989. – 247с.
4. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. - Томск: ТГУ, 1994. -247с.
5. Потекаев А.И., Клопотов А.А. Козлов Э.В. и др. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана. - Томск: НТЛ, 2004. -296с.
6. 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 на Дону . - 2008. С. 246-250.