

Синтез и кристаллохимический анализ фаз в системе Mg-Al-Zn

М.А. Солодовникова

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Обоснование. Интерметаллические соединения представляют собой большой и очень важный класс современных материалов. Поэтому, интерметаллические соединения находят практическое применение в промышленности и имеют огромное значение в нашей повседневной жизни. Малоизученная природа металлической связи и типы химических реакций образования в интерметаллических соединениях не позволяют прогнозировать результирующие кристаллические структуры и взаимосвязь между кристаллической структурой и свойствами. Одним из возможных способов получить более глубокое представление о взаимосвязи структуры и свойств является систематизация и классификация множества известных структурных схем.

Цель — провести кристаллохимический анализ фаз системы Mg-Al-Zn и осуществить их синтез.

Методы. Метод нанокластеров основан на нескольких принципах, которые имеют четкий физический смысл и описаны в научной работе [1–3]. Основная концепция определения состава и строения нанокластеров основано на следующих правилах:

1) структура состоит из многослойных оболочек, похожих на первичные кластеры; каркас оболочки имитирует рост наночастиц из затравки; затравкой может быть как отдельный атом, так и простой нецентрированный кластер, такой как тетраэдр, октаэдр или икосаэдр;

2) центры первичных нанокластеров занимают наиболее симметричные положения структуры. Это условие предполагает, что процессы предварительной зарождения приводят к появлению высокосимметричных локальных областей (фундаментальных конфигураций [2]), которые имеют тенденцию сохраняться в кристалле;

3) первичные нанокластеры не проникают друг в друга, т. е. не имеют общих внутренних атомов, но могут пересекаться друг с другом, т.е. иметь общие атомы в своих внешних оболочках;

4) первичные нанокластеры, как правило, включают в себя все атомы структуры. Если есть атомы, не принадлежащие к первичным нанокластерам, следует выбрать другое наиболее симметричное положение и включить в модель еще один вид нанокластера до тех пор, пока не будет выполнено условие. Пример, рис. 1.

Механохимический синтез интерметаллида был проведен в атмосфере аргона. В течение 12 ч (5 циклов по 3 ч с продувкой Ar между циклами) со скоростью 400 об/мин.

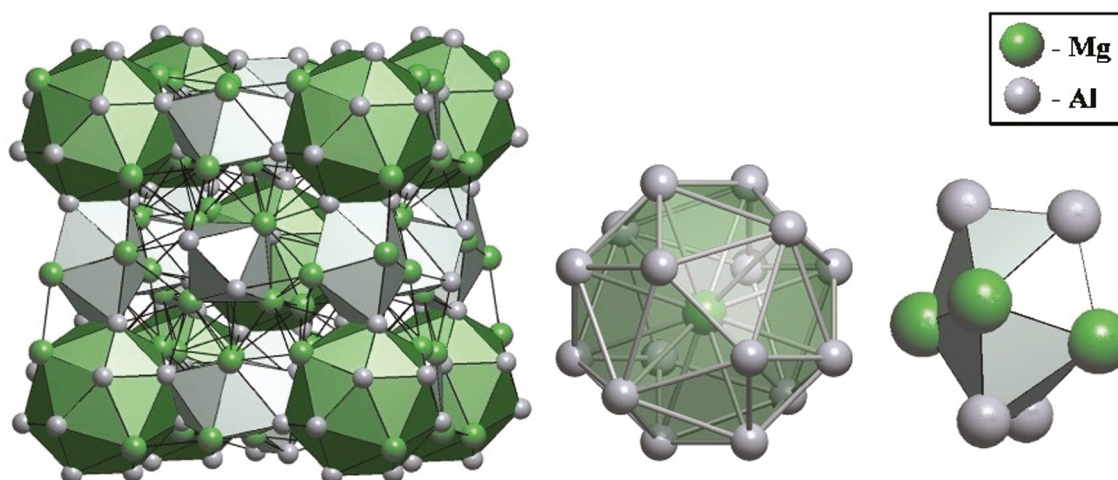


Рис. 1. Нанокластерное моделирование структуры $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$. Из ансамбля однооболочечных нанокластеров (1@16; 0@8)

Результаты. Для каждой структуры системы проведен расчет геометрико-топологических параметров, предложен способ сборки интерметаллических структур путем нанокластерного моделирования. Определены локальные атомные конфигурации характерные для изучаемого состава.

Выводы. Проведен поиск структур состава Mg-Al-Zn по базе данных ICSD. Отобрано 16 бинарных соединений, из которых 9 фаз Mg-Zn, 7 фаз Mg-Al. Фаз состава Zn-Al не обнаружено. Определены возможные строительные блоки (нанокластеры) изучаемых структур. Наиболее встречаемые обладают 12-, 14-, 16-, 8-атомным ядром, среди которых кластер Маккея, Бергмана и многогранник Фриауфа. Проведена классификация отобранных соединений по топологическому типу. Определено 14 топологических типов, среди которых присутствуют следующие структурные типы: фаза Лавеса, ГЦК решетка, α -марганец. Определили локальные атомные конфигурации системы Mg-Al-Zn, для изучаемого состава превалирует икосаэдрическая форма многогранника. Окружение по форме гексагонального кубооктаэдра для данной системы не характерно. Механохимическим методом в атмосфере аргона синтезирован интерметаллид $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$.

Ключевые слова: интерметаллические соединения; нанокластер; металлы.

Список литературы

1. Shevchenko V.Ya., Blatov V.A., Ilyshin G.D. Intermetallic compounds of the NaCd₂ family perceived as assemblies of nanoclusters // Struct Chem. 2009. Vol. 20. P. 975–982. DOI: 10.1007/s11224-009-9500-6
2. Shevchenko V.Ya., Medrish I.V., Ilyushin G.D., Blatov V.A. From Clusters to Crystals: Scale Chemistry of Intermetallics // Struct. Chem. 2019. Vol. 30. P. 2015–2027.
3. Blatov V.A. Nanocluster analysis of intermetallic structures with the program package TOPOS // Struct Chem. 2012. Vol. 23. P. 955–963. DOI: 10.1007/s11224-012-0013-3

Сведения об авторах:

Мария Алексеевна Солодовникова — студентка, группа 106М, химико-технологический факультет; Самарский государственный технический университет, Самара, Россия. E-mail: maria.sll@yandex.ru

Екатерина Михайловна Егорова — научный руководитель, кандидат химических наук, доцент; Самарский государственный технический университет, Самара, Россия. E-mail: dvoryanova_kat@mail.ru

Ольга Александровна Блатова — научный руководитель, кандидат химических наук, доцент; Самарский государственный технический университет, Самара, Россия. E-mail: olga_blatova@mail.ru