

НЕЙТРОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТОЯНИЯ ТЕРМОБАРИЧЕСКИ ОБРАБОТАННОГО ПНИКТИДА Mn_2Sb

¹В.М. Рыжковский, ¹В.С. Гончаров, ²С.Е. Кичанов, ²Д.П. Козленко, ²Б.Н. Савенко

¹ Институт физики твердого тела и полупроводников НАНБ, Минск, Беларусь.

² Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна, Россия.

В системе Mn-Sb при нормальных условиях (диаграмма состояния T-x) существуют два соединения - MnSb и Mn_2Sb с гексагональной типа *NiAs* и тетрагональной типа *Cu₂Sb* кристаллическими структурами соответственно [1]. Между тем в последнее время широкое распространение получил метод синтеза материалов с использованием техники высоких давлений. Термобарический синтез, включающий воздействие на синтезируемый материал в технологическом процессе как температуры, так и давления, позволяет получать новые соединения и однофазные твердые растворы, которые в обычных условиях (без давления) не реализуются. В частности, нами было показано [2], что введение дополнительного параметра «давление» при исследовании фазового состояния системы Mn-Sb (P-T-x диаграмма) обеспечивает образование нового соединения Mn_3Sb , которое имеет гранецентрированную кубическую структуру. Атомы Mn занимают положение 3(c) ($0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$), а атомы Sb – положение 1(a) (0 0 0) пространственной группы $Pm\bar{3}m$ (2 2 1) (рис. 1).

Ранее было обнаружено, что термобарическая обработка соединения Mn_2Sb с кристаллической тетрагональной структурой типа *Cu₂Sb* (C38), реализующегося в системе Mn-Sb при нормальных условиях, вызывает

в нем при определенных значениях температуры и давления ($T > 1800$ К, $P = 70$ кбар) структурную перестройку [3]. Рентгенограммы фазы высокого давления Mn_2Sb были проиндексированы на основе орторомбической ячейки. Имеющиеся на рентгенограммах несколько дополнительных рефлексов, не соответствующих орторомбической симметрии, объяснялись присутствием в образце марганецсодержащих примесей.

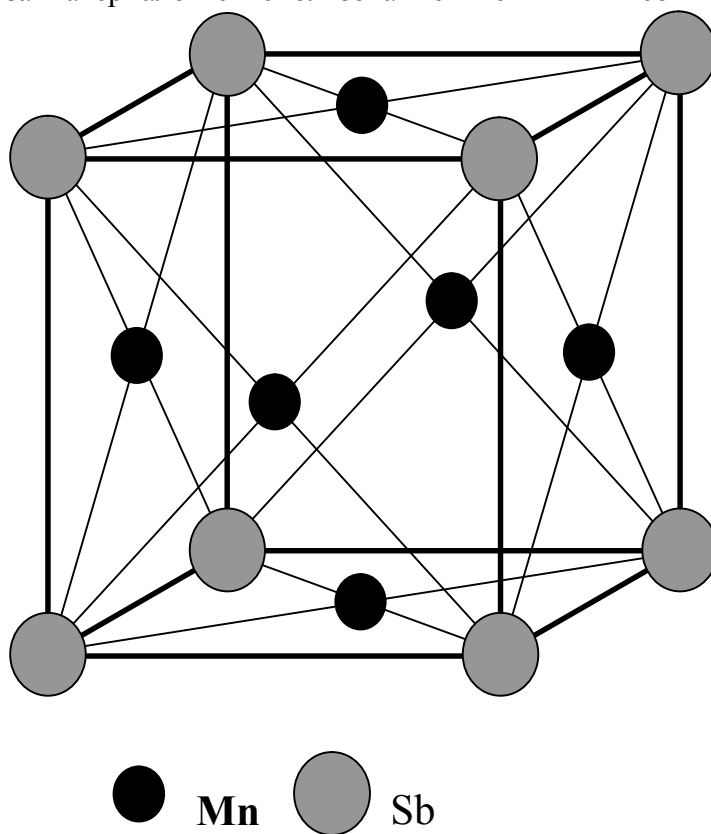


Рис. 1. Кристаллическая структура соединения Mn_3Sb

Получение путем термобарического синтеза неизвестного ранее соединения Mn_3Sb в системе Mn-Sb позволило по-новому подойти к анализу и интерпретации рентгенограмм и нейтронограмм термобарически обработанных образцов Mn_2Sb . Оказалось, что они хорошо описываются в рамках двухфазной модели. Одна из фаз является кубической с параметрами элементарной ячейки $a=4\text{Å}$, вторая – гексагональной с параметрами $a=4,33\text{Å}$, $c=5,61\text{Å}$.

Рентгенографические результаты при аттестации термобарически обработанных образцов Mn_2Sb были дополнены данными нейтронографических измерений, которые проводились с использованием нейтронного дифрактометра ДН-12 на импульсном высокопоточном реакторе ИБР-2 (Лаборатория нейтронной физики, ОИЯИ, Дубна). Дифракционные спектры снимались при угле рассеяния $2\theta=45,5^\circ$. Для данного угла рассеяния разрешение дифрактометра на длине волны $\lambda=2\text{Å}$ составляло $\Delta d/d=0,022$. Так как по техническим ограничениям использовались образцы малых размеров ($V\sim 2\text{мм}^3$), характерное время измерения одного спектра было достаточно большим (20ч).

При обработке дифракционных данных по методу Ритвельда с помощью программы FullProf методом проб и ошибок установлено, что наилучшее соответствие экспериментальной и рассчитанной нейтронограмм достигается для гексагональной фазы при использовании в расчете модели, в которой атомы Mn_1 занимают положения $(0\ 0\ 0)$, $(0\ 0\ \frac{1}{2})$; $Mn_2 - (\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{3}{4})$, $(\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{4})$; $Sb - (\frac{1}{3}\ \frac{2}{3}\ \frac{1}{4})$, $(\frac{2}{3}\ \frac{1}{3}\ \frac{3}{4})$ пространственной группы $P\ 6-3/mmc\ (194)$ (рис. 2). На рис. 3 представлены точки экспериментальной нейтронограммы при $T=300\text{ К}$ термобарически обработанного образца Mn_2Sb и вычисленный профиль рефлексов.

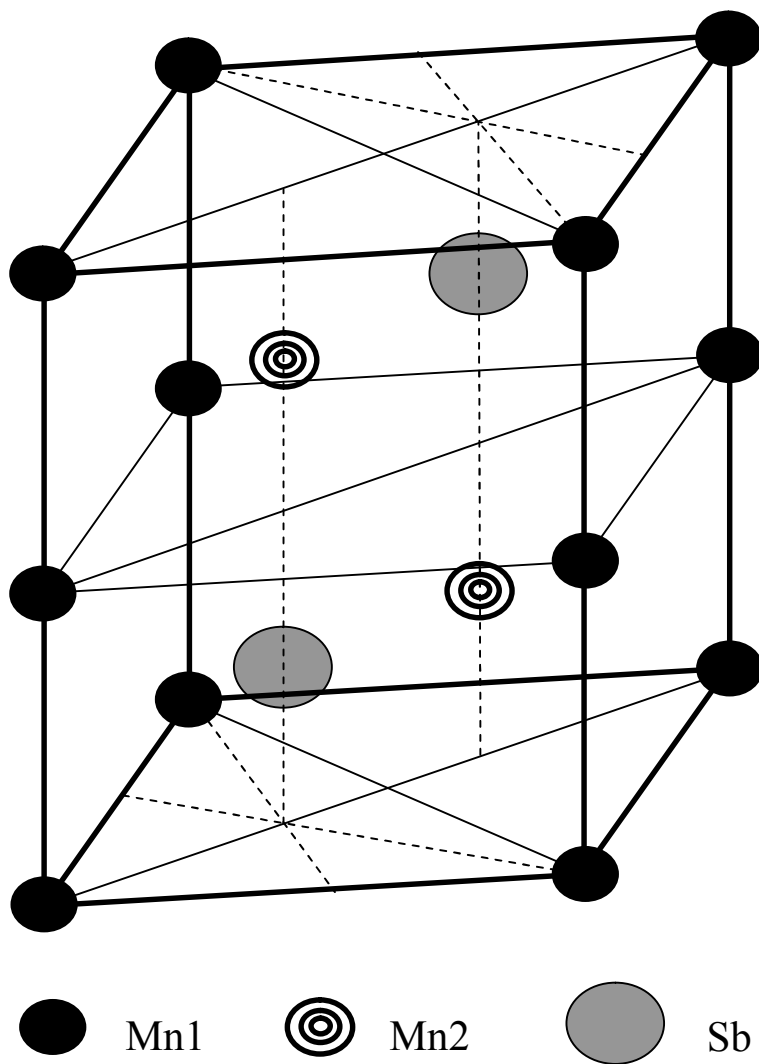


Рис. 2. Кристаллическая структура гексагональной фазы термобарически обработанного пниктида Mn_2Sb

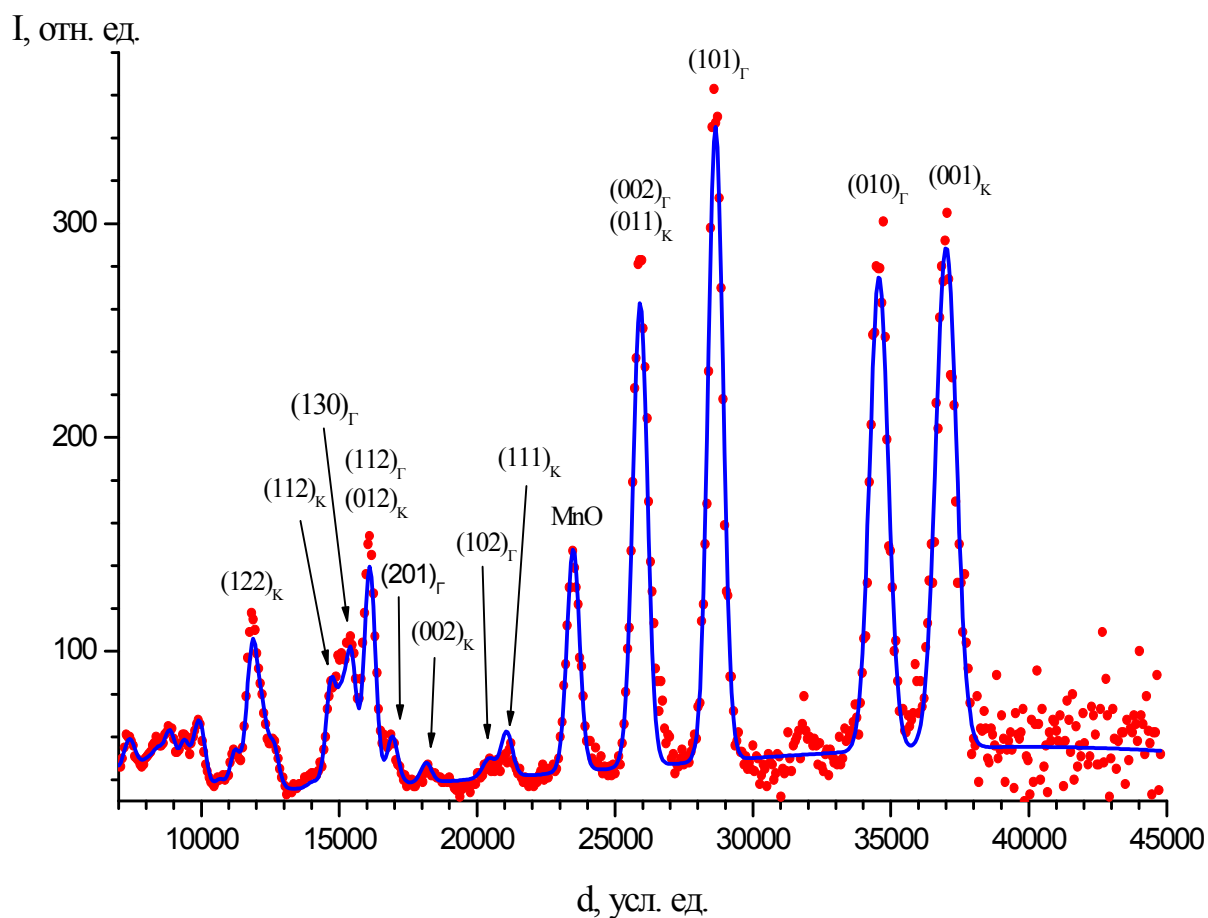


Рис. 3 Нейтронограмма термобарически обработанного пниктида Mn_2Sb

Таким образом, анализ нейтронографических данных подтверждает вывод о двухфазности кристаллического состояния термобарически обработанного пниктида Mn_2Sb .

Литература:

1. М. Хансен, К. Андерко. Структуры двойных сплавов. Металлургиздат, М. 1962. Т. 2, 1488 с.
2. В.С. Гончаров, В.М. Рыжковский Неорганические материалы, 2005, т.41, №5, с.1-3
3. В.С. Гончаров, В.М. Рыжковский. ПЖТФ, 27, 13, 39 (2001).