

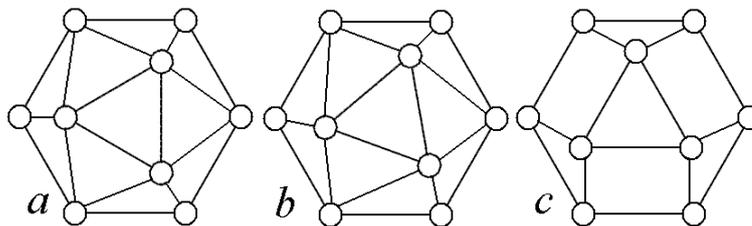
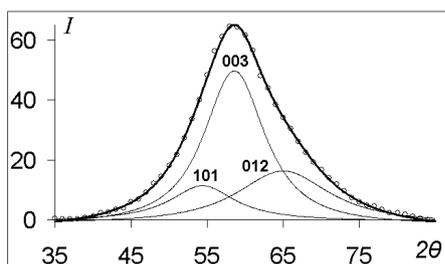
ИКОСАЭДРИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА КАК 10-КРАТНЫЙ ДВОЙНИК

Пугачев В.М.,^a Захаров Ю.А.,^{a,b} Додонов В.Г.,^a Якубик Д.Г.^a

^aКемеровский государственный университет,
 650043, Кемерово, ул. Красная 6, e-mail: vm1707@mail.ru

^bФедеральный исследовательский центр угля и углекислоты СО РАН,
 650000, Кемерово, Советский проспект 18

Икосаэдрическая квазикристаллическая структура (ИКС) реализуется в металлах и их сплавах. Она представляет собой 10-кратный двойник из антисимметричных пар тригональных пирамид (в форме песочных часов) с искаженной ГЦК-решеткой, описываемой в гексагональном аспекте (см. рисунок – слева) с параметрами, однозначно определяемыми геометрией икосаэдра: $a = R(2(1 - 5^{-0.5}))^{0.5}$, $c = R(3(1 + 2 \cdot 5^{-0.5}))^{0.5}$, где R – кратчайшее межатомное расстояние. Икосаэдр легко трансформируется в кубооктаэдр (ГЦК-структура) и обратно.



Представление рентгенодифракционного профиля ИКС никеля рефлексами гексагональной решетки – слева; превращение икосаэдра в кубооктаэдр (а–с) и обратно (с–а).

ИКС характерна для очень малых металлических кластеров и является первичной структурой при образовании многих металлов в результате кристаллизации из расплава или при восстановлении^{1,2}. По мере укрупнения энергетически более выгодной становится нормальная ГЦК-структура, которая может легко трансформироваться также в ОЦК-структуру. Превращение ИКС и ГЦК структур в ГПУ протекает посредством смещения слоев и осуществляется труднее, однако легкоплавкие металлы (Mg, Zn, Cd) могут кристаллизоваться сразу в ГПУ-форме.

В докладе также рассматриваются результаты синтеза и анализа ИКС никеля и твердых растворов Fe–Co методами широко- и малоугловой дифракции рентгеновских лучей, а также методами молекулярной динамики.

Литература

1. Zakharov Yu.A., Pugachev V.M., Kolmykov R.P., Russakov D.M., Dodonov V.G., Obratsova I.I., Prosvirin I.P., Ivanova N.V., Ivanov N.N. Gold Bulletin, 2017, 50, 225.
2. Zakharov Yu.A., Kolmykov R.P., Pugachev V.M., Dodonov V.G., Russakov D.M., Ya-kubik D.G., Ivanova N.V., Ivanov N.N., Obratsova I.I., Hitsova L.M., Prosvirin I.P. Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, 2018, 27, 111.