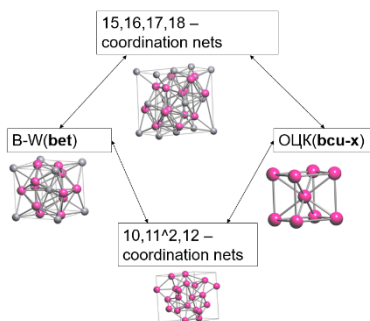


АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУР ТИПА ОЦК И β -W НА ПРИМЕРЕ СИСТЕМЫ Nb-Al

Славнов Т.Д., Дворянова Е.М., Блатов В.А.

Самарский государственный технический университет
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

Изучение взаимосвязи кристаллических структур, относящихся к различным структурным типам, является важной задачей современного материаловедения, так как способствует пониманию химических процессов, протекающих в многокомпонентных системах, а также может помочь при поиске новых материалов. В исследованной нами системе Nb-Al представлены следующие фазы: Al NbAl₃, Nb₂Al, Nb₃Al, Nb_{0,79}Al_{0,21}, Nb_{1,75}Al_{0,25}, Nb_{0,84}Al_{0,16}, Nb. Нами были рассмотрены две фазы Nb и Nb₃Al с топологиями ОЦК (**bcc-x**) и β -W(**bet**). Для поиска взаимосвязи между структурами была использована топологическая модель атомной сетки, где переходы между структурами рассматриваются как изменение от исходной атомной сетки к её подсетке (разрыв связей) или надсетке (образование новых связей). Данный метод был реализован с помощью программного комплекса ToposPro (<https://topospro.com>) (см. рисунок).



Связь подсетка-надсетка для топологий β -W (**bet**) и ОЦК (**bcc-x**)

Переходы на рисунке можно рассматривать эквивалентно через общую 10,11²,12 координированную сетку и 15, 16, 17, 18 координированную сетку.

Была проведена проверка получившейся структуры на стабильность при помощи метода DFT и программного обеспечения VASP. При обычной оптимизации структуры была получена топология **bet**, после применения MD (molecular dynamics) была получена топология **12,14 T11**. Наиболее стабильной является фаза с топологическим типом **12,14 T11** и энергией решётки -34,9607 эВ/атом.

Были рассмотрены представители топологии β -W(**bet**) с целью выявить закономерности в топологии. Общая формула для представителей топологического типа AB₃, где в качестве А чаще всего выступают металлы IIIA, IVA, VIIIB групп, которые, как правило, имеют топологию ГЦК (**fcc**) или ГПУ (**hcp**). А в качестве В металлы IVB, VB, VIB групп, которые имеют ГПУ (**hcp**) и ОЦК (**bcc-x**) топологии.