

Kristallografiya, 17, 804-11 (1972)
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Том 17

1972

Вып. 4

Т. И. Дюжева.

С. С. Кабалкина

Л. Ф. Верещагин

УДК 548.31

Т. И. ДЮЖЕВА, С. С. КАБАЛКИНА и Л. Ф. ВЕРЕЩАГИН
Polymorphism of Magnesium Stannide at High Pressures and Temperatures
ПОЛИМОРФИЗМ Mg_2Sn ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ И ДАВЛЕНИЯХ

Проведено рентгенографическое исследование влияния высоких давлений и температур на структуру соединения Mg_2Sn , при нормальных условиях имеющего структуру антифлюорита, при $p \sim 30$ кбар и $T = 25^\circ C$ испытывает обратимый фазовый переход первого рода, а при ~ 40 кбар и $400^\circ C$ — необратимый полиморфный переход с образованием метастабильной фазы. Показано, что структуры фаз высокого давления, полученных при обратимом и необратимом переходах, идентичны. Определены плотность (пикнометрически) для метастабильной фазы Mg_2SnII ($\rho_s = 4,1 \pm 0,2$ г/см³) и параметры гексагональной элементарной ячейки: $a_0 = 13,18 \pm 0,02$ и $c_0 = 6,99 \pm 0,04$ Å, $z = 15$. Предложена новая гексагональная модель структуры фазы высокого давления Mg_2SnII с мотивом, близким к типу Ni_2Si .

Проведено рентгенографическое исследование влияния высокого давления на кристаллическую структуру Mg_2Sn в интервале давлений до 100 кбар и температур от комнатной до $400^\circ C$. В обычных условиях соединение Mg_2Sn кристаллизуется в структурном типе антифлюорита с параметрами $a_0 = 6,7630$ Å и $\rho_p = 3,592$ г/см³ [1]. Согласно полученным данным, при $p \sim 30$ кбар и $T = 25^\circ C$ в Mg_2Sn зафиксирован полиморфный обратимый переход, ранее обнаруженный по измерениям электросопротивления и изомерного смещения Меллером, а также рентгенографически Дрикамером и Христоп [2]. При этом дифракционная картина, полученная нами, явно не соответствует предположению, высказанному в [2] о кубической симметрии фазы высокого давления, которую они трактуют как *bcc* или примитивную кубическую. Следует заметить, что экспериментальные данные по дифракции в [2] не приведены.

В настоящей работе использованы рентгеновские камеры высокого давления для съемки при комнатной [3] и высокой [4] температурах. Для оценки давления в отдельных случаях к исследуемому веществу добавлялся в качестве внутреннего стандарта порошок NaCl; давление определялось с использованием полуэмпирического уравнения состояния для NaCl Деккера [5].

В табл. 1 представлены рентгенографические данные для фазы высокого давления при $p = 70 \pm 3$ кбар и $T = 25^\circ C$, полученные на фильтрованном Мо-излучении.

Рентгенограммы Mg_2Sn , снятые при 40 кбар и $400^\circ C$ на фильтрованном Мо-излучении, оказались идентичными рентгенограммам, полученным при этом давлении и комнатной температуре. Однако при снятии нагрузки в этом случае фаза высокого давления сохраняется неопределенно долго в метастабильном состоянии при $25^\circ C$. Результаты сравнения дифракционных данных приведены в табл. 2. Метастабильный характер фазы высокого давления Mg_2SnII при $25^\circ C$ доказывает отжиг в течение 1 час при $300^\circ C$, в результате которого происходит полное превращение Mg_2SnII в Mg_2SnI (антифлюоритовый тип структуры).

Таким образом, оказалось, что модификацию Mg_2SnII можно сохранить в метастабильном состоянии при нормальных условиях, только если она