

**Теоретическая и экспериментальная оценка изменений кристаллической структуры и физических свойств NiAs<sub>2</sub> в высокотемпературных условиях.**

**Научный руководитель – Каримова Оксана Владимировна**

**Михайлова Полина Сергеевна**

*Студент (магистр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

*E-mail: mihaylova.pol@yandex.ru*

По литературным данным [1] при температуре около 600°C происходит полиморфный переход низкотемпературной фазы NiAs<sub>2</sub> со структурой парараммельсбергита (пр.гр. *Pbca*) в высокотемпературную фазу со структурой раммельсбергита (пр. гр. *Pnnt*) (рис. 1).

В связи с трудностями в исследовании данной группы соединений, связанными в первую очередь с летучестью мышьяка, с целью моделирования процесса полиморфного перехода, а также оценки изменения структурных и физических свойств парараммельсбергита и раммельсбергита при повышении температуры, целесообразным является использование метода атомистического структурного моделирования.

Так как в настоящий момент в литературе данные по теоретическим моделям бинарных соединений мышьяка и никеля отсутствуют, в рамках данного исследования была разработана собственная согласованная модель потенциалов межатомного взаимодействия. Разработанный набор межатомных потенциалов позволил получить расчётные модели низкотемпературной и высокотемпературной фаз NiAs<sub>2</sub>, воспроизвести с хорошей точностью экспериментальные значения геометрических параметров обеих фаз, а также произвести расчёт их структурных, термодинамических и упругих свойств при изменении термодинамических условий. Был сделан вывод, что для более точной теоретической оценки температуры перехода парараммельсбергит - раммельсбергит в связи с малой разницей свободных энергий в двух данных фазах, необходимы дополнительные расчёты ab initio методами квантовой химии.

Для экспериментальной части исследования были синтезированы образцы С288 и С289 в равновесии с мышьяком и моноарсенидом никеля соответственно, содержание фазы парараммельсбергита в которых находится в диапазоне от 90 до 95%. Были осуществлены ДТА (дифференциальный термический), ТГ (термогравиметрический), ДТГ (дифференциальный термогравиметрический) анализы, показавшие наличие эндотермических пиков при температурах 646,8°C для С288 и 649,4°C для С289, которые свидетельствуют о наличии в соединении структурных перестроек, связанных с полиморфным переходом парараммельсбергит-раммельсбергит.

С целью более детального изучения изменений в кристаллической структуре диарсенида никеля под воздействием высоких температур, и моделирования процесса полиморфного перехода, была поставлена цель провести серию анализов образцов методом терморентгенографии в диапазоне температур от 100 до 700°C.

### **Источники и литература**

- 1) Singleton M., Nash P. // Journal of Phase Equilibria. 1987. V. 8. P. 419 – 422.

### **Иллюстрации**

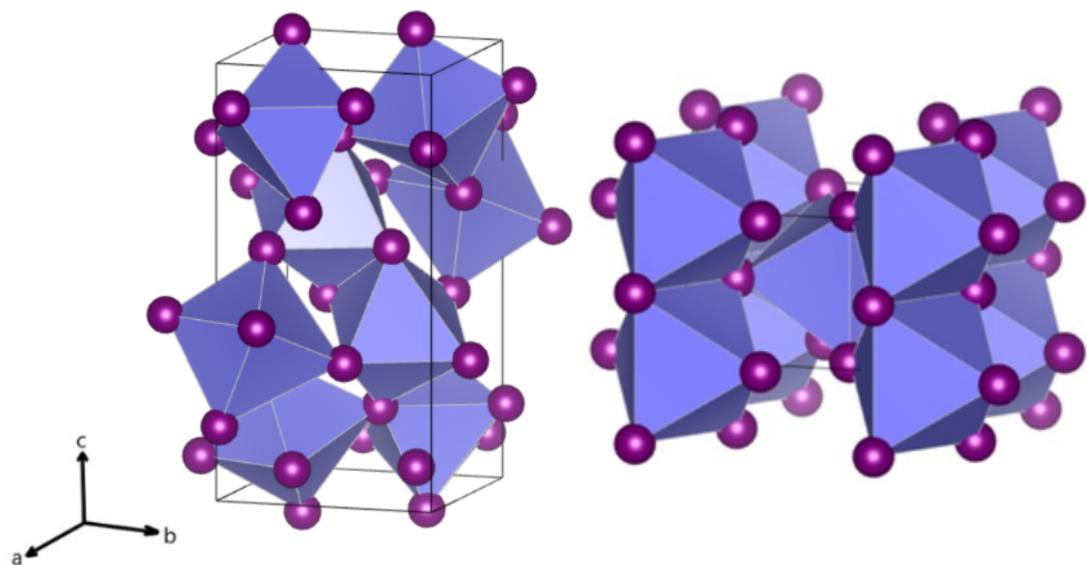


Рис. 1. Кристаллические структуры парараммельсбергита (слева) и раммельсбергита (справа).