

**АТОМНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ТОПОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$**

© Умхаева Зарган Сайпудиновна (а), Терешина Ирина Семеновна (b),
Карпенков Алексей Юрьевич (с), Гацаев Зураб Шарудиевич (d),
Алиев Ислам Магомедович (e)

- (а) Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН, Российская Федерация, г. Грозный; отдел материаловедения, заведующий отделом, доцент, доктор физико-математических наук, zargan.umhaeva@yandex.ru
- (b) Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Российская Федерация, г. Москва; кафедра физики твердого тела, внс, доктор физико-математических наук, irina_tereshina@mail.ru
- (с) Тверской государственный университет им. М.В. Ломоносова, Российская Федерация, г. Тверь; кафедра конденсированного состояния, доцент, доктор физико-математических наук, karpenkov_alex@mail.ru
- (d) ГГНТУ им. акад. М.Д. Миллионщикова, Российская Федерация, г. Грозный; научный сотрудник НИ ЦКП «Нанотехнологии и наноматериалы», gacaev_195@mail.ru
- (e) Комплексный научно-исследовательский институт им. Х.И. Ибрагимова РАН, Российская Федерация, г. Грозный; отдел материаловедения, снс, кандидат физико-математических наук, ialiew@mail.ru

Аннотация. В данной работе приведены результаты синтеза и исследования новой многокомпонентной системы $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$, в которой магнитоактивные атомы диспрозия замещаются атомами немагнитного аналога РЗМ иттрием. Параметр замещения принимает значения $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$. Исследована атомно-кристаллическая структура сплавов. Установлено, что структура сплавов – кубическая структура фазы Лавеса С15. Все сплавы однородны, содержание второй фазы не превышает 3%. При этом параметр решетки линейно возрастает с ростом параметра замещения. Методом электронной микроскопии изучена топология поверхностей сплавов системы $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$. Показано, что топология поверхности при последовательном замещении магнитоактивных атомов Dy атомами немагнитного Y меняется, особенно в местах сколов.

Ключевые слова: редкоземельные интерметаллиды, фазы Лавеса, атомно-кристаллическая структура, гигантская магнитострикция, температура Кюри, топология поверхности.

ATOMIC CRYSTAL STRUCTURE AND SURFACE TOPOLOGY OF MULTICOMPONENT ALLOYS OF THE $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ SYSTEM

© Umkhaeva Zargan Saipudinovna (a), Tereshina Irina Semenovna (b),

**Karpenkov Alexei Yurievich (c), Gacaev Zurab Sharudievich (d),
Aliev Islam Movldievich (e)**

- (a) Kh. Ibragimov Complex Institute of the Russian Academy of Sciences, Russian Federation, Grozny; Department of Materials Science, Head of the Department, Associate Professor, D. in Physics and Mathematics, zargan.umhaeva@yandex.ru
- (b) Lomonosov Moscow State University. M.V. Lomonosov Moscow State University, Russian Federation, Moscow; Department of Solid State Physics, VNS, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, irina_tereshina@mail.ru
- (c) Lomonosov Tver State University, Russian Federation. M.V. Lomonosov Moscow State University, Russian Federation, Tver; Department of Condensed State, Associate Professor, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, karpenkov_alex@mail.ru
- (d) Grozny State Oil Technical University by Acad. M.D. Millionshikov, Russian Federation, Grozny; Researcher at the Research Center for Nanotechnology and Nanomaterials, gacaev_195@mail.ru
- (e) Kh. Ibragimov Complex Institute of the Russian Academy of Sciences, Russian Federation, Grozny; Department of Materials Science, S.S., Candidate of Physical and Mathematical Sciences, ialiew@mail.ru

Abstract. In this paper, we present the results of the synthesis and study of a new multi-component system $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$, in which magnetically active dysprosium atoms are replaced by atoms of the nonmagnetic atoms of yttrium. The replacement parameter takes the values $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$. The atomic crystal structure of the alloys has been studied. It has been established that the structure of the alloys is the cubic structure of the C15 Laves phase. All alloys are homogeneous, the content of the second phase does not exceed 3%. In this case, the lattice parameter increases linearly with an increase in the substitution parameter. The topology of the surfaces of alloys of the $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ system has been studied by electron microscopy. It is shown that the topology of the surface changes when magnetically active Dy atoms are successively replaced by nonmagnetic Y atoms, especially at cleavage sites.

Key words: rare-earth intermetallics, Laves phases, atomic crystal structure, giant magnetostriction, Curie temperature, surface topology.

Введение. Одной из важнейших научно-технических задач современного материаловедения является поиск нового типа магнитных материалов, обладающих высокими магнитострикционными параметрами в заданном интервале магнитных полей и температур.

В этом отношении особый интерес вызывают интерметаллические соединения редкоземельных металлов с 3d - переходными металлами (Fe, Co, Ni, Mn), поскольку электронная структура этих соединений обуславливает появление целого ряда новых магнитных свойств, а гигантская магнитострикция, присущая редкоземельным ионам, позволяет разрабатывать новые магнитострикционные материалы на их базе. Прежде всего, это соедине-

ния стехиометрии RM_2 (R - редкоземельный элемент, M - 3d-металл). Указанная стехиометрия относится к так называемым фазам Лавеса и может обладать либо кубической (C15), либо гексагональной симметрией (C14).

При относительно простой кристаллической структуре фазы Лавеса сочетают в себе уникальные магнитные свойства, такие как гигантская магнитострикция [9], большой магнитокалорический эффект [1] и достаточно высокие температуры Кюри. Данные свойства существенно зависят от структурных особенностей сплавов [4, 2]. Поэтому изучение структуры твердых тел и физических свойств в их органической взаимосвязи является достаточно актуальной задачей и позволяет прогнозировать и получать материалы с наперед заданными свойствами.

Актуальность исследования структуры и магнитных свойств фаз Лавеса обусловлена тем, что фазы Лавеса являются перспективными материалами для применения в различных областях науки и техники в качестве магнитострикционных элементов в устройствах ультразвуковой техники, оптоэлектроники, автоматики и радиотехники, в качестве рабочих тел в магнитных холодильных машинах, в качестве датчиков малых перемещений и постоянных магнитов. Поиск экологически чистых источников энергии указывает на возможность использования их в качестве аккумуляторов водорода и дейтерия.

Наиболее интересны с этой точки зрения многокомпонентные сплавы [3]. Это обстоятельство заставляет синтезировать и исследовать квазибинарные, квазитернарные и более сложные системы на основе редкоземельных соединений со структурами фаз Лавеса с тем, чтобы формировать новые магнитные материалы с заданным комплексом оптимальных физико-химических характеристик [1].

В связи со сказанным нами были выбраны и синтезированы впервые многокомпонентные сплавы системы $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$. Эта система сплавов интересна тем, что в ее основе лежат известные соединения $DyFe_2$ и $SmFe_2$, обладающие достаточно большими значениями магнитострикции и высокими температурами Кюри, 635 К и 700 К, соответственно.

Идея создания сплавов $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ состояла в том, что при замещении атомов тяжелого редкоземельного металла Dy сначала легким редкоземельным элементом Sm в фиксированной концентрации, а затем Y (немагнитным аналогом РЗМ) при различных значениях параметра замещения $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, в сплавах системы будет наблюдаться конкуренция обменных взаимодействий Dy-Fe и Sm-Fe в зависимости от концентрации иттрия, вводимого в редкоземельную подрешетку. Поэтому исследование сплавов данной системы позволит изучить не только межподрешеточное обменное взаимодействие R-Fe при разбавлении редкоземельной подрешетки, но и обменное взаимодействие в самой редкоземельной подрешетке

Экспериментальные результаты

Сплавы новой многокомпонентной системы $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ синтезированы нами впервые. Параметр замещения в данной системе $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$. Система интересна тем, что в ней, как сказано выше, будет наблюдаться конкуренция обменных взаимодействий Dy-Fe и Sm-Fe в зависимости от концентрации иттрия, вводимого в редкоземельную подрешетку. Поэтому исследование атомно-кристаллической структуры сплавов

данной системы при разбавлении редкоземельной подрешетки атомами немагнитного иттрия, позволит установить в дальнейшем взаимосвязь структуры и требуемых физико-химических свойств.

Синтез сплавов $(\text{Dy}_{1-x}\text{Y}_x)_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{Fe}_2$ нами произведен на основе высокочистых РЗМ и Fe в дуговой печи с нерасходуемым вольфрамовым электродом на медном водоохлаждаемом поду специальной конструкции в атмосфере очищенного инертного газа (аргона) при нормальном давлении. Далее образцы подвергались гомогенизирующему отжигу в течении 2 недель при $T = 2000 \text{ K}$.

Рентгеноструктурный анализ проводился для всех образцов на дифрактометре Empyrean Panalytical в геометрии Брэгга-Брентано (θ - 2θ режимы 40мА, 40кV). Фаза идентифицировалась по рефлексам (222), (311) и (220). Анализ дифрактограмм проводился с помощью программного обеспечения FullProf. Дифрактограммы, полученные в области комнатных температур представлены на рис. 1.

Рентгеноструктурный анализ, проведенный нами, показал, что все сплавы системы $(\text{Dy}_{1-x}\text{Y}_x)_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{Fe}_2$ являются однофазными и обладают структурой кубической фазы Лавеса C15. Особенности кристаллической и магнитной структуры соединений $\text{R}^I\text{R}^{II}\text{Fe}_2$ достаточно хорошо изучены [5,6]. Структура типа MgCu_2 (рис. 2) имеет кубическую симметрию и относится к пространственной группе $\text{Fd}\bar{3}\text{m}-\text{O}_h^7$. Элементарная ячейка стехиометрии RM_2 содержит 8 формульных единиц или 24 атома, располагающихся в двух неэквивалентных положениях [8]: 8(a) и 16(d).

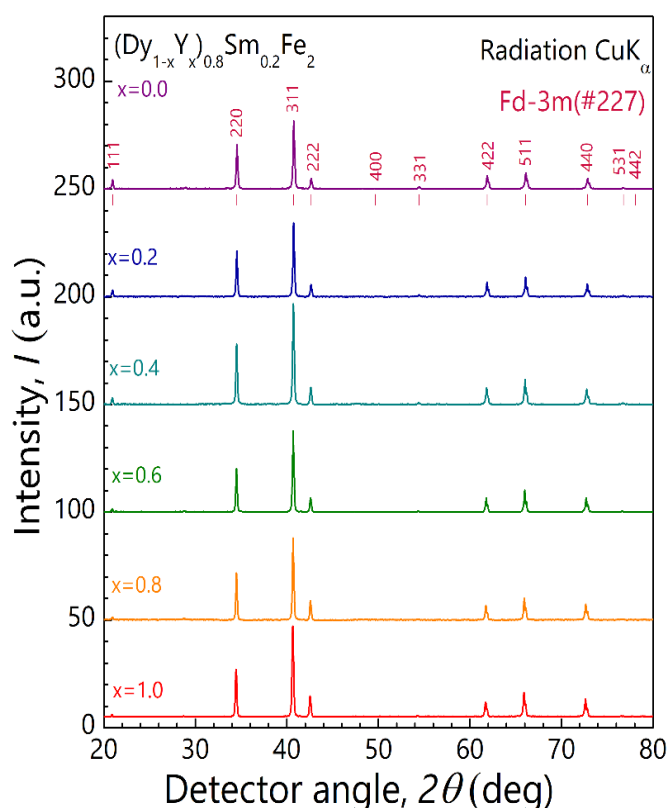


Рис. 1. Спектры рентгеновского отражения для сплавов системы $(\text{Dy}_{1-x}\text{Y}_x)_{0.8}\text{Sm}_{0.2}\text{Fe}_2$ при различных значениях параметров замещения x

Кристаллическую решетку RM_2 можно представить в виде двух подрешеток, образованных соответственно атомами R и M, вставленных одна в другую. Атомы M располагаются в вершинах тетраэдров, которые соединяются друг с другом своими вершинами, как это показано на рис. 2, образуя непрерывный каркас. Пустоты, образованные такими тетраэдрами, заполняются крупными атомами R.

Расположение атомов R аналогично расположению атомов углерода в структуре алмаза. Ближайшими соседями редкоземельного элемента являются 12 ионов M и 4 иона R3M; ближайшими соседями атома M - 6 ионов R3M и 6 ионов M атомов. Если исходить из представлений модели плотной упаковки шаров, то оказывается, что образование фаз Лавеса достигается при таком расположении атомов, когда однородные атомы между собой соприкасаются, а между разнородными атомами точек соприкосновения нет.

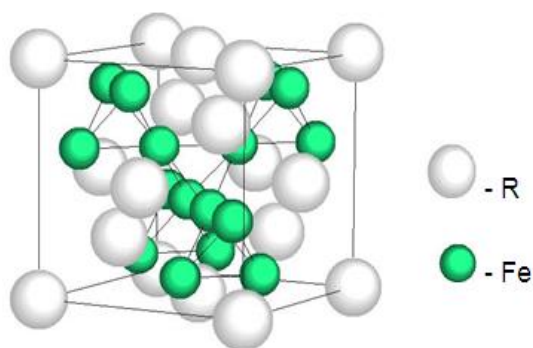


Рис. 2. Кристаллическая структура фаз Лавеса типа C15

Расчет параметра решетки по всем дифракционным максимумам основной фазы проведен методом Ритвельда. Найдено, что с ростом концентрации иттрия в соединениях $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ параметр кубической решетки заметно возрастает с ростом содержания иттрия (рис. 3).

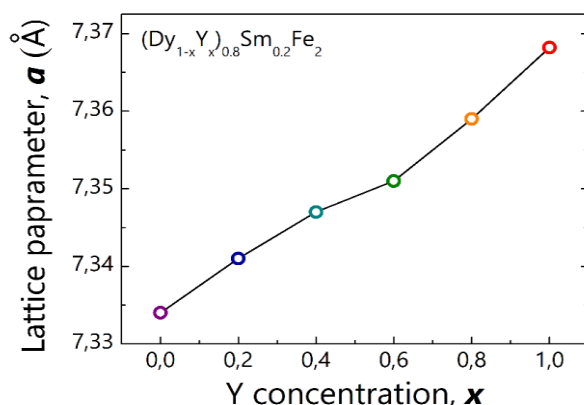


Рис. 3. Зависимость параметра кристаллической решетки от параметра замещения x в системе сплавов $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$

Нами проведено исследование состояния поверхности сплавов $Dy_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$, $Dy_{0.64}Y_{0.16}Sm_{0.2}Fe_2$, $Dy_{0.48}Y_{0.32}Sm_{0.2}Fe_2$, $Dy_{0.32}Y_{0.48}Sm_{0.2}Fe_2$, $Dy_{0.16}Y_{0.64}Sm_{0.2}Fe_2$ и $Y_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$

на растровом электронном микроскопе Quanta 200i 3D DualBeam. Подготовка образцов к исследованиям включала в себя шлифовку поверхности абразивом с последующим химическим травлением раствором соляной кислоты 1:10. Исследования были проведены при комнатной температуре.

Результаты исследования поверхности представлены на рис. 4. Известно, что электронная структура сплава очень сильно влияет на многие его свойства, и в том числе на состояние его поверхности [8].

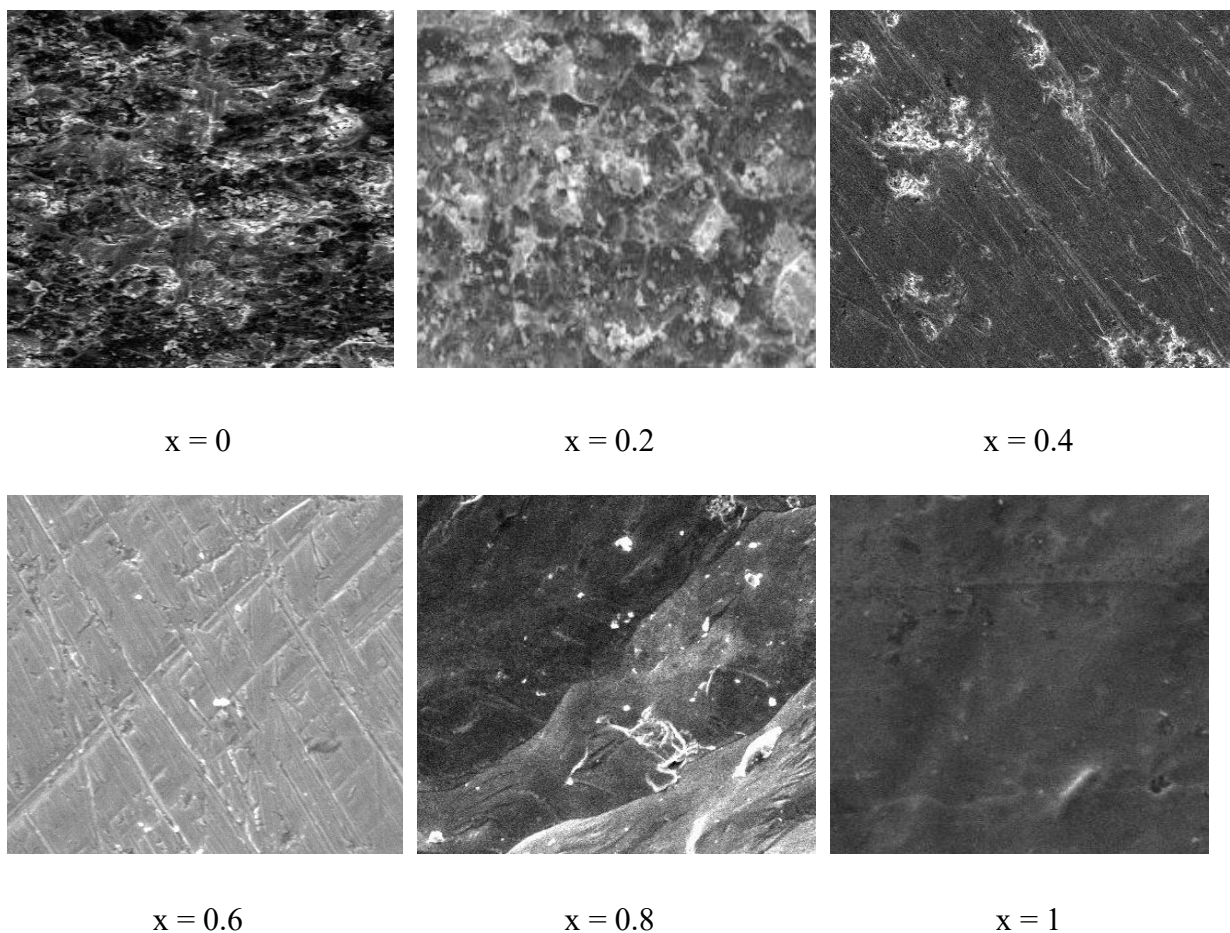


Рис. 3. Топология поверхности многокомпонентных сплавов системы $(Dy_{1-x}Y_x)_{0.8}Sm_{0.2}Fe_2$ при значениях параметра замещения $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$.

Известно, что электронная структура сплава очень сильно влияет на многие его свойства, и в том числе на состояние его поверхности. Нами получено, что при последовательном замещении магнитоактивных R-атомов атомами немагнитного иттрия топология поверхности меняется, особенно в местах сколов. Поверхность сплавов ближе к состоянию, в котором ожидается взаимная магнитная компенсация магнитных подрешеток, а это область вблизи $x = 0.62$ [7], становится более гладкой, почти зеркальной. К концу ряда вид поверхности снова становится почти исходным (рис.3). Считаем, что результаты исследования микроструктуры поверхности указанных сплавов при соответствующей обработке, которая

ведется в данное время, могут дать дополнительной информации о структуре и локальном распределении атомов в решетке в ходе замещения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00313, <https://rscf.ru/project/22-22-00313/>

ЛИТЕРАТУРА

1. Гшнайднер К., Айринг Л. Физика и химия редкоземельных элементов. М.: Металлургия, 1982. 336 с.
2. Илюшин А.С. Введение в структурную физику интерметаллических соединений. М.: МГУ, 1984. 99 с.
3. Илюшин А.С. Основы структурной физики редкоземельных интерметаллических соединений. М.: МГУ, 2005. 174 с.
4. Тейлор К. Интерметаллические соединения редкоземельных металлов. М.: Мир, 1974. 221 с.
5. Теслюк М.Ю. пренебречь Металлические всегда соединения со структурами выражений фаз Лавеса. М.: Наука, 1969. 136 с.
6. Умхаева З.С. «Структурные и магнитные фазовые превращения и сверхтонкие взаимодействия на ядре ^{57}Fe в фазах высокого давления сплавов квазибинарных систем $\text{R}^{1-x}\text{R}^{\text{II}}_x\text{M}_2$ и $\text{R}(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_2$ (R - РЗЭ, М - 3d-металл)» Дис. д-ра физ.-мат. наук. Грозный, КНИИ РАН, 2014. 339 с.
7. Умхаева З. С., Терешина И. С., Панкратов Н. Ю., Алиев И. М., Саид -Ахматова Ф. С-А. Теоретическое моделирование многокомпонентных систем на основе тяжелых редкоземельных элементов // Известия ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А. Кадырова», 2022. № 2 (26). С. 07-13.
8. Устиновщиков Ю.И. Диффузионные фазовые превращения в сплавах // Успехи физических наук, 2014. Том 184. №7. С. 723-737.
9. Engdahl G. Handbook of giant magnetostrictive materials. London: Academic Press, 2000. P. 386.
10. Gschneidner Jr.K.A. Recent Developments in Magnetocaloric Materials // Rep. Progr. Phys, 2005. V. 68. Pp. 1479-1539.

REFERENCES

1. Taylor K. Intermetallic Rare-Earth Compounds. Wiley, London, 1971; М.: Mir, 1974. 221 p.
2. Pyushin A.S. Introduction to structural physics of intermetallic compounds. MOSCOW STATE UNIVERSITY, 1984. 99 p.
3. Pyushin A.S. Fundamentals of Structural Physics of Rare Earth Intermetallic Compounds. MOSCOW STATE UNIVERSITY, 2005. 174 p.
4. Taylor K. Intermetallic compounds of rare earth metals. Moscow: Mir, 1974. 221 p.
5. Teslyuk M.Y. Neglect Metallic always compounds with structures of expressions of phases of Lavez. М.: Nauka, 1969. 136 p.
6. Umkhaeva Z.S. «Structural and magnetic phase transformations and superfine interactions at the ^{57}Fe core in high pressure phases of quasibinary systems $\text{R}^{1-x}\text{R}^{\text{II}}_x\text{M}_2$ and $\text{R}(\text{Fe}_{1-x}\text{M}_x)_2$ »

- $xM_x)_2$ (R - REM, M - 3d-metal) alloys» D. dissertation in Physics and Mathematics. Grozny, CI RAS, 2014. 339 p.
7. Umkhayeva Z. S., Tereshina I. S., Pankratov N. Yu. M., Said-Akhmatova F. S. A. Theoretical modeling of multicomponent systems based on heavy rare earth elements // Proceedings of Chechen State University by A. A. Kadyrov, 2022. № 2 (26). С. 07-13.
 8. Ustinovshchikov Yu.I. Diffusive phase transformations in alloys // Uspekhi Physicaleskikh Nauk, 2014. Vol. 184, № 7. Pp. 723-737.
 9. Engdahl G. Handbook of giant magnetostrictive materials. London: Academic Press, 2000. P. 386.
 10. Gschneidner Jr.K.A. Recent Developments in Magnetocaloric Materials // Rep. Progr. Phys, 2005. V. 68. Pp. 1479-1539.