

## Франк-касперовские кластеры в кристаллических и квазикристаллических структурах

Научный руководитель – Еремина Татьяна Александровна

*Якименко Алиса Анатольевна*

*Студент (бакалавр)*

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

*E-mail: Yakimenko\_Alice@mail.ru*

В случае плотнейшей упаковки самым большим координационным числом является 12. Однако, существуют очень плотные структуры, построенные не по принципу плотнейшей упаковки с КЧ, превышающими 12.

В этом случае формируются структуры со взаимопроникающими координационными многогранниками только с треугольными гранями, а пространство заполняется немного искаженными тетраэдрами. Для более точного их описания в 1956 году Франком и Каспером была проведена систематизация, в результате чего были выявлены так называемые Франк-Касперовские полиэдры, реализуемые в структурах интерметаллидов.

Можно доказать, что существует четыре многогранника данного типа: 12, 14, 15 и 16-вершинники. Все они получаются путем добавления 6-координированных вершин к 12 5-координированным вершинам икосаэдра. Взаимопроникающие икосаэдры в комбинации с координационными полиэдрами Франка Каспера встречаются довольно часто. Геометрически многогранники Франка-Каспера проще всего представить как производные гексагональной антипризмы (12+2=14-вершинник), усеченной тригональной призмы (12+3=15-вершинник), усеченного тетраэдра или лавесовского полиэдра (12+4=16-вершинник). При этом во всех вариантах каждая гексагональная грань «разбивается» на 6 треугольных с образованием дополнительной 6-координированной вершины.

Франк и Каспер показали, что в структурах, образующихся в результате взаимного проникновения описанных координационных многогранников, имеются плоские и приблизительно плоские слои атомов. Причем обязательно присутствие так называемых первичных сеток, состоящих из треугольников, шестиугольников или пятиугольников в любых комбинациях, и чередующихся с ними вторичных слоев, состоящих из треугольников и квадратов. При этом атомы вторичных слоев должны центрировать пятиугольники и шестиугольники, но не треугольники первичных сеток [2].

Например, структуру  $\mu\text{-Fe}_7\text{W}_6$  с точки зрения межатомных расстояний корректнее рассматривать как франк-касперовскую, в основе которой лежат икосаэдрически окруженные атомы железа и взаимопроникающие многогранники вольфрама, представленные характерными для  $\mu$ -фаз 14-, 15- и 16-вершинники Франка-Каспера. Структуру можно представить как параллельное плоскости (110) переслаивание двух типов сеток: первичных пентагон-треугольных, занятых атомами W и Fe и вторичных треугольно-квадратных  $3^34^2$ , сложенных только атомами Fe.

Наличие икосаэдрических координационных полиэдров позволяет считать структуры Франка-Каспера промежуточной фазой между периодическими интерметаллидами и квазикристаллами, получившими в последнее время широкое распространение благодаря своим уникальным свойствам [1].

### Источники и литература

- 1) Нельсон Квазикристаллы // В мире науки. 1986. No. 10. С. 19-28;

- 2) Франк Ф. и Каспер Дж. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. М., 1977.