



FASES METAESTABLES CON ESTRUCTURA BCC EN EL SISTEMA Mg-Nb

María Belén Moro^{(1,2)*}, Facundo Castro^(1,2,3) y Guillermina Urretavizcaya^(1,2,3)

⁽¹⁾Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo Km 9500, Bariloche, Argentina.

⁽²⁾Centro Atómico Bariloche, CNEA, Av. Bustillo Km 9500, Bariloche, Argentina.

⁽³⁾CONICET, Bariloche, Argentina.

*Correo Electrónico (autor de contacto): mariabelenmoro@gmail.com

RESUMEN

En este trabajo se presenta un estudio de fases metaestables del sistema Mg-Nb con estructura cristalina bcc sintetizadas por medio de molienda mecánica. La motivación son las interesantes propiedades para almacenamiento de hidrógeno reportadas para la fase Mg_3Nb , obtenida en forma de película delgada [1]. Experimentalmente, se prepararon mezclas con distintas relaciones atómicas Mg:Nb en el rango 0.5:1 - 3:1, las mismas se molieron en atmósfera controlada. Se utilizaron estrategias combinadas de hidruración, deshidruración y molienda para lograr una mezcla eficiente de los metales. Los materiales se caracterizaron por XRD, DSC, TG, TEM y SEM. De manera complementaria, se realizó el refinamiento de los patrones obtenidos por XRD empleando el método de Rietveld. El resultado principal del trabajo es la obtención de una solución sólida sustitucional Mg-Nb de composición cercana a la equimolar, que mantiene la estructura bcc del Nb. Esta fase tiene un parámetro de red (3.341 Å) mayor al del Nb metálico (3.302 Å), en acuerdo con el mayor radio atómico del Mg respecto del Nb. La estructura bcc se mantiene y aumenta su tamaño de celda cuando la solución sólida incorpora hidrógeno, el cual se ubica en sitios intersticiales de la red. Tanto la solución sólida como su hidruro son metaestables, pero requieren temperaturas del orden de 400°C para su descomposición. Los materiales que tienen mayor contenido de Mg muestran la fase bcc con el mismo parámetro de red y un exceso de Mg, lo cual indica que se ha llegado al límite de solubilidad de Mg en Nb con estructura bcc. Los materiales con defecto de magnesio respecto de la composición de la fase bcc equimolar presentan la coexistencia de dos fases isoestructurales con distinta proporción Mg:Nb.

ABSTRACT

A study of metastable phases of the Mg - Nb system with bcc crystalline structure synthesized by mechanical milling is presented. Our motivation is the interesting properties for hydrogen storage reported for the phase Mg_3Nb , obtained as a thin film [1]. Mixtures with various atomic ratios Mg:Nb in the range 0.5:1 - 3:1 were prepared and milled in a controlled atmosphere. Hydriding, dehydriding and milling combined strategies were used to achieve efficient mixing of the metals. The materials were characterized by XRD, DSC, TG, TEM and SEM. In addition, refinement of the XRD patterns obtained was made by using the Rietveld method. The main result of this work is the synthesis of a substitutional solid solution of Mg-Nb with a composition close to equimolar, which maintains the bcc structure of Nb. This phase has a lattice parameter (3.341 Å) greater than metallic Nb (3.302 Å), in accordance with the higher atomic radius of Mg compared with Nb. The bcc structure is kept and increases its cell size when the solid solution incorporates hydrogen, which is located in interstitial sites of the lattice. Both, the solid solution and its hydride, are metastable but require temperatures of 400°C to decompose. Materials with higher Mg content also present a bcc structure with the same lattice parameter and excess of Mg, indicating that the limit of solubility of Mg in Nb with bcc structure has been reached. Materials with lower magnesium content than the equimolar bcc phase present the coexistence of two isostructural phases with different Mg: Nb ratios.

REFERENCIAS

1. X.H. Tan, L. Wang, C.M.B. Holt, B. Zahiri, M.H. Eikerling, D. Mitlin, “Body centered cubic magnesium niobium hydride with facile room temperature absorption and four weight percent reversible capacity”; Phys. Chem. Chem. Phys. Vol. 14 (2012), p. 10904.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T05*

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *P (poster)*