

УДК 538.91.405

*О.В. Андрухова, Т.В. Андрухова, Н.В. Ломских, А.Г. Никифоров***Влияние радиуса межатомного взаимодействия на особенности фазового перехода «порядок–беспорядок»***O.V. Andrukhova, T.V. Andrukhova, N.V. Lomskikh, A.G. Nikiforov***Influence of Atomic Interaction Radius Phase on Peculiarities of Phase Transition «Order–Disorder»**

Изучено влияние радиуса межатомного потенциала на характер фазового перехода «порядок–беспорядок». Моделируется процесс разупорядочения сплава стехиометрического состава АВ в условиях изотермического отжига. Рассматриваются структурные и энергетические особенности атомного упорядочения, анализируются необходимость и объективность учета дальнедействующих вкладов при моделировании фазовых превращений «порядок–беспорядок».

Ключевые слова: фазовый переход «порядок–беспорядок», разупорядочение (упорядочение), компьютерное моделирование, дальнее действие, дальний порядок, микродомены.

Современная практика создания материалов с заданными физическими и механическими свойствами тесно связана с изучением атомного упорядочения сплавов и фазовых переходов «порядок–беспорядок». Несмотря на то, что существует большое число экспериментальных и теоретических работ, в которых исследовано атомное упорядочение, данные об особенностях протекания процессов упорядочения в сплавах и фазовых переходов «порядок–беспорядок» противоречивы. Одно из традиционных упрощений – ограничение потенциала межатомного взаимодействия. При этом, опираясь на выводы квантовой механики, часто рассматривается взаимодействие только в ближайшей координационной сфере [1–3]. Однако известно, что в некоторых сплавах, как, например, железоалюминиевых, атомное упорядочение обусловлено взаимодействием во второй координационной сфере [4]. А учет хотя бы двух координационных сфер приводит к особенностям как в ближнем, так и в дальнем упорядочении [5, 6]. Включение во взаимодействие более удаленных соседей (вплоть до 5–6-й координационной сферы) приводит к тому, что потеря устойчивости упорядоченной фазы наступает при разных значениях T [7, 8]. Здесь анализ тонкой структуры материала, полного и локального порядка на структурных особенностях материала в зависимости от протяженности модельного дальнего действия проводился на двумерных модельных тонких пленках.

The paper studies the influence of atomic interaction radius on phase transition «order–disorder». Loss of strength of alloy with stoichiometrical composition AB during isothermal annealing is simulated in the series of computer experiments. The structural and energy features of disordering process are considered. The necessity and objectiveness of long-range contributions in modeling phase interactions «order–disorder» are analyzed.

Key words: phase transition «order–disorder», ordering–disordering transition, computer simulation, long-range operation, long-range order, microdomains.

В представленной работе компьютерная модель диффузионного механизма миграции атомов по вакантным узлам расширена на трехмерные сплавы. Переход к 3D модельным сплавам позволяет не только оценить степень достоверности полученных ранее результатов и сделанных выводов об особенностях фазовых превращений «порядок–беспорядок», но и провести сопоставление с имеющимися экспериментальными данными [3, 6].

В рамках указанной модели проведено моделирование процесса атомного упорядочения в сплаве стехиометрического состава АВ с ОЦК-решеткой. Исследуемый кристаллит включал 10–12 атомных слоев размером 100×100 атомов, на границах использовали периодические граничные условия. Образец подвергался изотермическому отжигу, с равномерным распределением температуры по всему объему кристаллита. Варьируемыми параметрами в данном компьютерном эксперименте выступали температура отжига T и число координационных сфер L , учитываемых во взаимодействии атомов (радиус действия межатомного потенциала). В эксперименте температура отжига задавалась в интервале от 0 до $1,1T_k$ (T_k – температура исчезновения дальнего порядка в атомной системе), а радиус потенциала межатомного взаимодействия включал от одной до девяти координационных сфер. Начальная структура модельного сплава – полностью разупорядоченная.

В ходе эксперимента фиксировались как равновесные, так и неравновесные картины распределения атомов по узлам решетки. Далее по этим картинам восстанавливались структурные и энергетические характеристики процесса и равновесного состояния сплава. Описание равновесных состояний сплава позволяет оценить необходимость и объективность учета дальнедействующих вкладов при моделировании фазовых превращений «порядок–беспорядок».

Для наглядности и удобства обработки полученных картин распределения атомов по узлам кристаллической решетки в работе рассматриваются двумерные срезы в плоскости (1 1 1), проведена также процедура выделения доменов.

На рисунке 1 приводятся типичные равновесные конфигурации модельного сплава при различной протяженности межатомных потенциалов для температуры 300К.

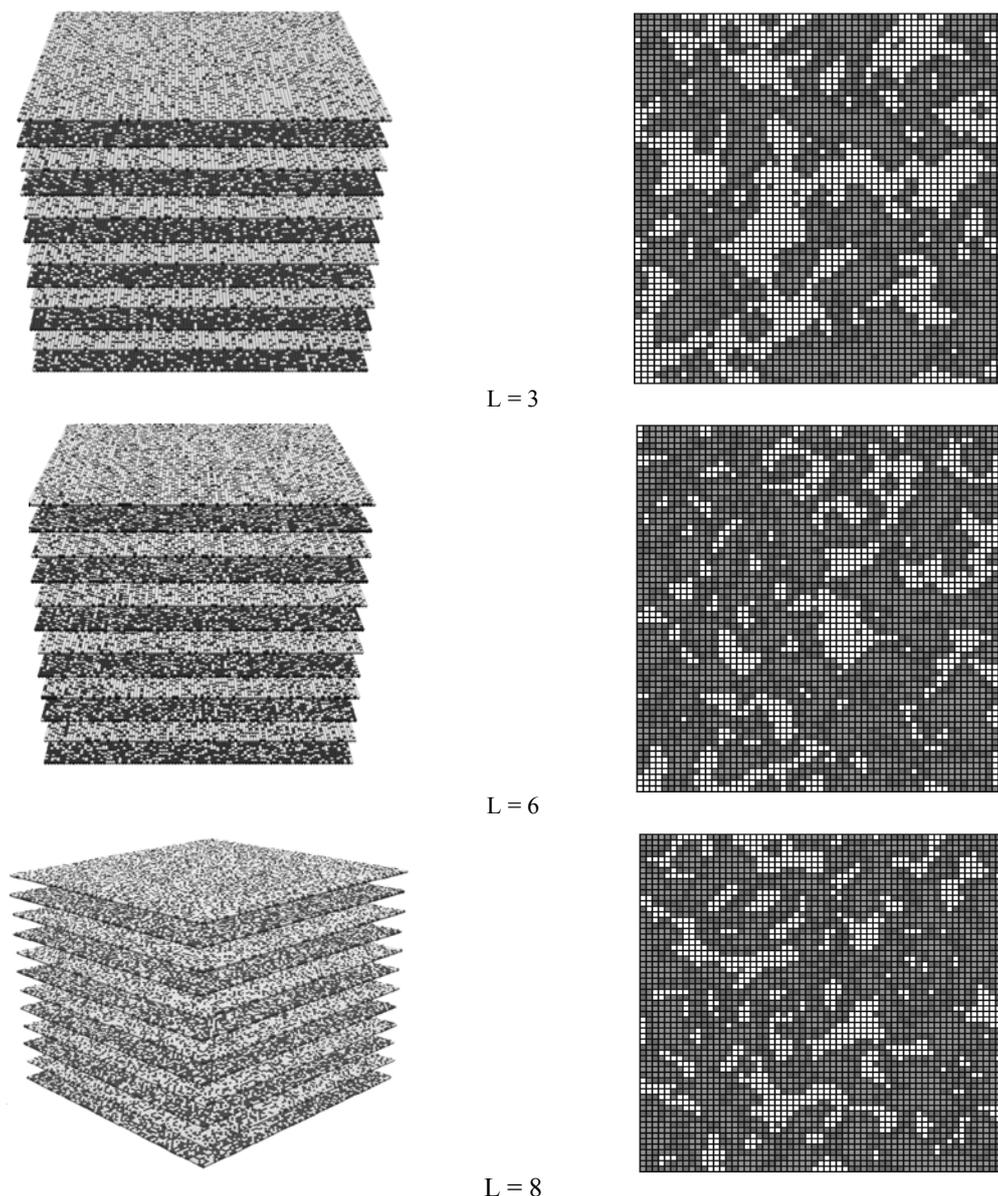


Рис. 1. Типичные равновесные конфигурации модельного сплава при различной протяженности межатомного потенциала. Температура отжига 250–300К

Анализ равновесных конфигураций модельного сплава показал, что последовательное введение во взаимодействие более удаленных атомов приводит к существенному изменению равновесной структуры материала. Учет ближайших соседей приводит к

образованию преимущественно точечных дефектов замещения, последовательное введение более удаленных соседей (вплоть до 4-й координационной сферы) влечет за собой появление новых структурных образований – кластеров и сегрегаций, микро-

доменов, антифазных границ. Далее с увеличением глубины взаимодействия (5 и 6-я координационные сферы) наблюдается измельчение доменной структуры материала и увеличение плотности границ. Структура антифазных границ становится лабиринтной, и на них локализуются различные структурные образования – кластеры, сегрегации и микродомены. Рост числа координационных сфер (L), учитываемых во взаимодействии, приводит к увеличению числа и размеров структурных особенностей на антифазных границах. Границы «размываются» с понижением степени порядка вблизи них, что хорошо согласуется с [7–9]. И во всем объеме образца и на границах формируются значительные области фазы с ближним порядком в расположении

атомов по узлам кристаллической решетки. Полученные результаты дают неплохое согласие с данными [6], где показано, что в сплавах системы Cu–Au взаимодействие носит дальнодействующий характер, и вклады в энергию упорядочения дальних сфер, по крайней мере до пятой, существенны.

Понимание природы атомного упорядочения невозможно без детального описания характера поведения параметра дальнего порядка во всем температурном интервале фазового превращения «порядок–беспорядок». Зависимости параметра дальнего порядка среднего по объему и в упорядоченной фазе при различном числе координационных сфер L , учитываемых во взаимодействии, представлены на рисунке 2 в координатах $\eta_L(T)$.

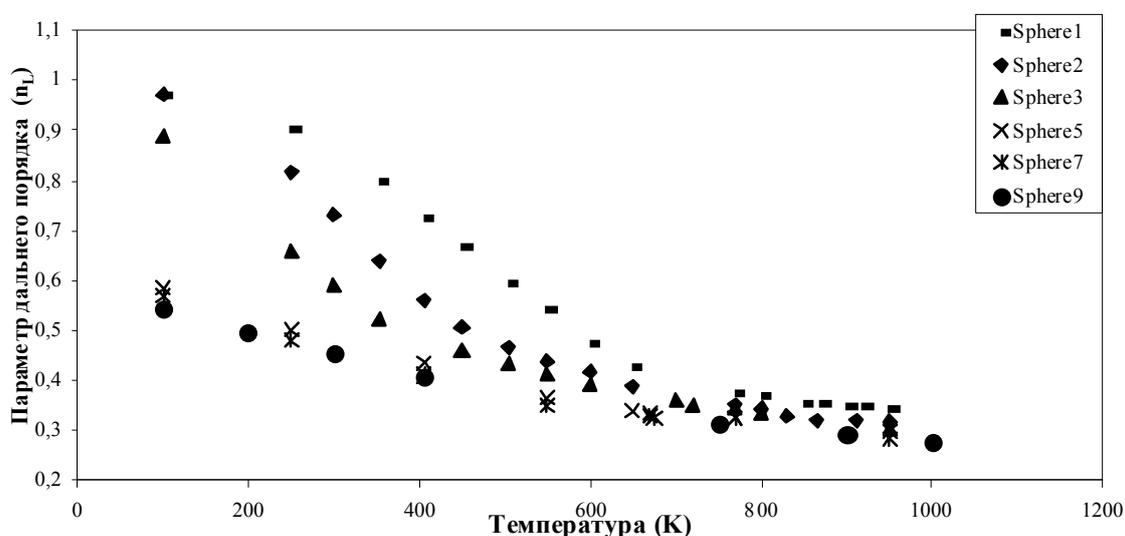


Рис. 2. Зависимость параметра дальнего порядка от температуры при разных значениях числа координационных сфер, учитываемых во взаимодействии

Рисунок 3 иллюстрирует изменение температуры превращения «порядок–беспорядок» с увеличением протяженности межатомного взаимодействия. Очевидно, что для данного модельного сплава превращение проходит через двухфазную область, причем температурный интервал существования в материале двух фаз – упорядоченной фазы с дальним порядком (антифазные домены) и фазы с ближним порядком (микродомены, кластеры и сегрегации) – смещается в область более низких температур. По классификации Майера и Стриттера, развитой Роловым [10], модельный сплав обнаруживает черты размытого фазового перехода первого рода.

С возрастанием числа сфер L увеличивается скачок $\Delta\eta_L$ в T_k , т.е. понижается устойчивость упорядоченной фазы по отношению к фазе с ближним порядком. Наряду с наименьшей степенью порядка, еще сохраняющейся в сплаве при T_k (конец двухфазной области), имеет смысл и наибольшая величина η_L , при которой начинается разупорядочение (начало двухфазной области). Эта величина также

характеризует устойчивость упорядоченного состояния. Сопоставление этих двух характеристик показало, что с увеличением числа координационных сфер, учитываемых во взаимодействии, устойчивость упорядоченной фазы уменьшается, возникновение фазы с ближним порядком становится более вероятным. Потеря устойчивости упорядоченной фазы вплоть до шестой координационной сферы наступает при разных значениях T .

С точки зрения статистической теории атомного упорядочения это свидетельствует о том, что с ростом L появляются эффекты, обусловленные влиянием трех и четырех частичных корреляций и их различным вкладом в парную энергию упорядочения [6, 9].

Во всех случаях для данного модельного сплава при температурах выше T_k обнаруживается значительный ближний порядок, который в микродоменной модели может быть пересчитан в дальний. Средняя степень дальнего порядка в микродоменах

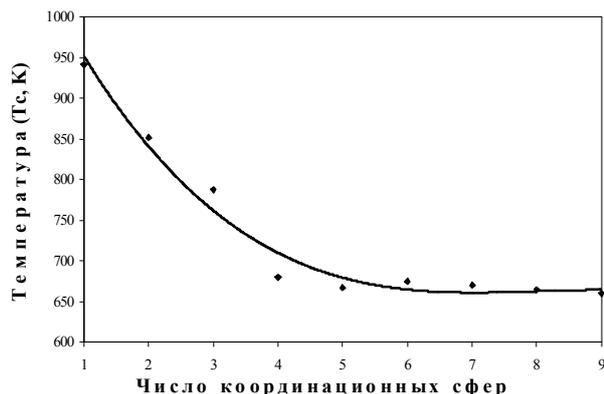


Рис. 3. Зависимость температуры фазового перехода от протяженности межатомного потенциала

увеличивается с измельчением доменной структуры материала. В случае реализации микродоменной структуры степень порядка высока (микродомены практически совершенны) $\sim 0,94$. Отметим, что фаза с ближним порядком в расположении атомов при температурах выше T_c чувствительна к повышению температуры (вне зависимости от дальнедействующих вкладов), о чем свидетельствует поведение параметров порядка среднего по объему материала

и в антифазных доменах и микродоменах вместе. При сохранении высокого внутримономенного порядка средний по объему порядок продолжает убывать. Это обусловлено, по-видимому, дальнейшим измельчением микродоменов с сохранением высокой степени порядка в них и увеличением плотности кластеров и сегрегаций.

Выводы. Включение дальнедействующих вкладов вносит эффект разупорядочения. При этом увеличение протяженности потенциала межатомного взаимодействия приводит к тому, что различные механизмы разупорядочения: точечные дефекты замещения, микродомены и антифазные границы, — начинают включаться в процесс уже при более низких температурах, чем в случае учета взаимодействия только ближайших соседей. Для модельного сплава вклад во взаимодействие более удаленных соседей существенен до самой 6-й координационной сферы. В доменах и микродоменах вплоть до T_c сохраняется высокая степень порядка, наблюдаются лишь измельчение структуры и переход к микродоменному состоянию. Температура фазового перехода «порядок–беспорядок» зависит от протяженности межатомного потенциала. Происходит уменьшение T_c с ростом числа координационных сфер, учитываемых во взаимодействии.

Библиографический список

1. Martin P.L., Williams J.C. // *Acta metall.* – 1984. – Vol. 32.
2. Murch G.E., Heng Zhang // *Phil. Mag.* – 1995. – Vol. A72.
3. Athenes M., Bellon P., Martin G., Haider F. // *Acta mater.* – 1996. – Vol. 44.
4. Kulkarni U.D., Banerjee S. // *Acta metall.* – 1988. – Vol. 36.
5. Richman R.H., Davies R.G. // *Metallurgical Transactions.* – 1973. – Vol. 4.
6. Матвеева Н.М., Козлов Э.В. Упорядоченные фазы в металлических системах. – М., 1989.
7. Starostenkov M.D., Evstigneev V.V., Andruhova O.V., Lomskikh N.V., Borissov A.V. Research of the binary alloy AB atomic structure reconstruction micromechanims // *Mater. Res. Soc. – J. Proc.* 20. – Tokyo, 1996.
8. Starostenkov M.D., Kozlov E.V., Andruhova O.V., Gurova N.M., Lomskikh N.V., Borissov A.V. The investigation of kinetics of high-temperature structure transformation of homophases and heterophases materials // *Acta metallurgica Sinica (English Letters).* – 2000. – Vol. 13, №2.
9. Cahn R.W. In *Phase Transition in Condensed Systems.* – MRS SymP. Proc., 1987.
10. Ролов Б.Н. Размытые фазовые переходы. – Рига, 1972.