

© 1993

ВЛИЯНИЕ ОДИНОЧНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ НА МИКРОСТРУКТУРУ АМОРФНЫХ МЕТАЛЛОВ

О. В. Вольф, Г. М. Калибаева, В. С. Степанюк, А. А. Кацнельсон

Методом молекулярной динамики исследовано влияние одиночных возмущений массы атома чистого Al на микроструктуру расплава. Установлено, что при этом происходит заметное увеличение икосаэдрических микрокластеров. Наиболее отчетливо это проявляется при увеличении массы атома.

Хорошо известно, что для образования аморфных металлических систем в чистые металлы при быстром охлаждении добавляются различные атомы металлоида *P*, *B* и др. Эти атомы способствуют образованию икосаэдрических микрокластеров и появлению аморфной фазы. В квазикристаллах роль второй компоненты сводится к тому, что она способствует образованию микрокластеров типа икосаэдра, которые ориентационно упорядочиваются и образуют структуру с симметрией пятого порядка. Причем, изменяя концентрацию сплава, можно добиться более четкого проявления квазикристаллической фазы. Например, в сплаве Al—Mn это имеет место при концентрации Mn—22.5% [1, 2]. Можно сказать, что, как и в случае аморфных систем и квазикристаллов, роль второй, третьей и т. д. компонент сводится к созданию определенных возмущений матрицы, которые в свою очередь приводят к появлению достаточного количества микрокластеров с симметрией икосаэдра. Как правило, вторая компонента вносит существенно отличный от матрицы вклад в межатомное взаимодействие и имеет атомный радиус, отличный от атомного радиуса матрицы. Кроме того, обычно концентрация второй компоненты достаточно велика (более 10%), в противном случае аморфизация не происходит (во всяком случае при современных экспериментальных методиках). Если принять в качестве необходимого условия для предрасположенности какого-либо сплава к образованию аморфной системы или квазикристаллической фазы условие существования достаточного количества икосаэдрических микрокластеров, то возникает следующий вопрос: возможно ли получить заметное увеличение количества икосаэдрических микрокластеров в быстроохлажденном расплаве чистого металла без добавления заметного количества атомов второй компоненты и без изменения (во всяком случае сильного) характера межатомного взаимодействия?

Для выяснения ответа на этот вопрос была поставлена следующая задача: исследовать в компьютерном эксперименте влияние одиночных возмущений массы атома чистого металла на микроструктуру расплава. Тем самым мы исключили из рассмотрения как размерный эффект, так и искажение межатомного взаимодействия.

В исследованиях мы использовали метод молекулярной динамики (NVE-ансамбль) и выполняли анализ многогранников Вороного [3]. В качестве модельной системы был взят относительно небольшой ансамбль атомов Al, взаимодействующих посредством потенциала Морзе. Параметры потенциала e_0 , r_0 были взяты из работы [4]. Подробно методика излагалась в более ранних наших работах [2]. Масса одного из атомов в ансамбле последовательно заменялась на значения,

Количество микрокластеров основных типов, полученных в результате анализа многогранников Вороного, выраженное в % от общего числа многогранников

Масса m	Икосаэдро-подобные	Призмы	Структуры типа ГЦК	Структуры типа ОЦК
1	35	21	22	—
3	29	20	22	0.5
10	29	22	28	1.5
27 (Al)	27	20	25	1
55	32	17	20	2
300	40	15	26	1
1000	41	22	17	1

существенно большие и существенно меньшие, чем у Al. Затем для всех случаев производилось быстрое охлаждение расплава с последующей выдержкой при $T = 300$ К.

В таблице представлены основные типы микрокластеров, обнаруженных посредством анализа многогранников Вороного.

Можно видеть, что наиболее отчетливо влияние одиночных возмущений массы сказывается на количестве икосаэдрических микрокластеров (в таблицу включены не только идеальные многогранники Вороного, но и близкие к ним искаженные тепловыми флуктуациями, например для икосаэдра-0 0 12 0-идеальный, 0 1 10 2-искаженный). Причем отмечается в целом тенденция к увеличению этих кластеров. Но наиболее четко она проявляется при увеличении массы атома.

Для более ясной картины обнаруженных закономерностей рассмотрим полученные функции радиального распределения ФРР — полные (f_{00}) и парциальные (f_{01}). (Парциальная ФРР определяет вероятность встретить атом j -го сорта на расстоянии r от атома i -го сорта; полная ФРР является средневзвешенной суммой парциальных функций [5]). Рис. 1 иллюстрирует ФРР чистого Al, рис. 2 иллюстрирует ФРР Al с одним атомом уменьшенной массы $m = 10$, рис. 3 иллюстрирует ФРР Al с одним атомом увеличенной массы $m = 55$.

На рис. 1—3 по оси абсцисс отложено расстояние в ангстремах, по оси ординат — функция радиального распределения, зависящая от расстояния.

Первое, что можно сразу же увидеть, — это заметное изменение структуры второго пика полной ФРР при изменении массы атома, а именно происходит его расщепление, существенно большее, нежели в чистом Al (где есть только тенденция к расщеплению). Как известно, многие авторы именно такие особенности связывают с образованием аморфной фазы, хотя, на наш взгляд, это лишь тенденция к аморфизации.

Однако сравнение парциальных ФРР указывает, что, по-видимому, механизм образования икосаэдрических кластеров различен для легкого и тяжелого атома. Действительно, из рис. 2, 3 можно видеть, что в случае тяжелого атома происходит сильное расщепление второго пика парциальной ФРР (f_{01}) алюминия, чего нет для более легкого атома. Анализ многогранников Вороного вокруг возмущения показал, что действительно вокруг тяжелого атома образуется икосаэдрическая (или

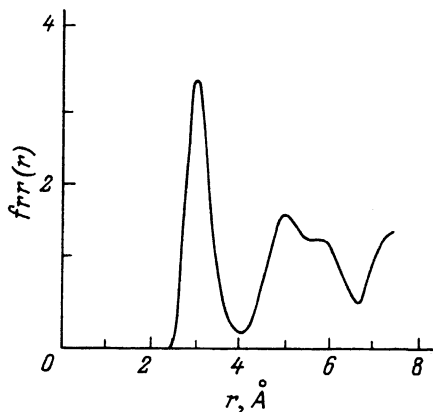


Рис. 1. Функция радиального распределения чистого Al.

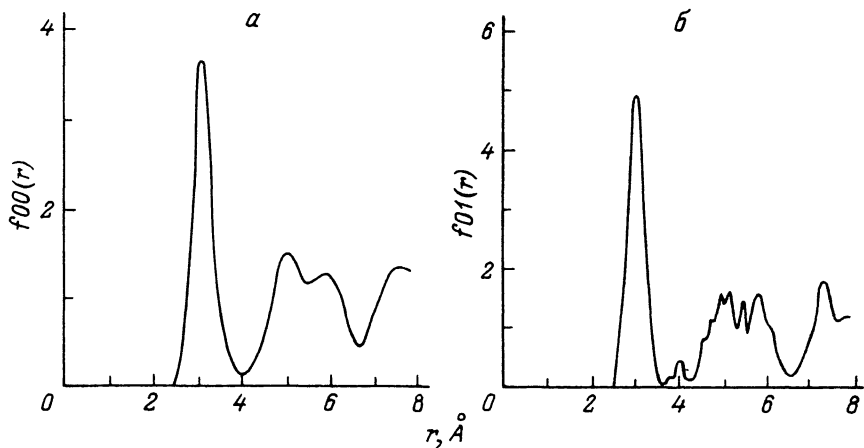


Рис. 2. Функция радиального распределения Al с одним атомом уменьшенной массы $m = 10$. а — полная ФРР, б — парциальная ФРР.

близкая к ней) микроструктура. Возле легкого атома этого не происходит. Таким образом, при общей подобности (схожести) явлений икосаэдрического кластерообразования в металле с наличием примеси механизм для тяжелого и легкого атома различный. Легкий атом ввиду большей подвижности легко перемещается по всей области металла, что приводит к увеличению икосаэдров в области его появления. Тяжелый атом создает вокруг себя икосаэдрическую структуру и тем самым вызывает перераспределение атомов матрицы в других частях системы.

Таким образом, в настоящей работе показано, что введение тяжелого или легкого одиночного атома в молекулярно-динамический ансамбль может заметно увеличить количество икосаэдрических микрокластеров и тем самым способствовать аморфизации системы. Экспериментальная проверка этого эффекта представляется нам возможной: введение в быстроохлажденный расплав металла малого количества тяжелых или легких атомов (возможно, малых кластеров) со сходной с матрицей электронной структурой.

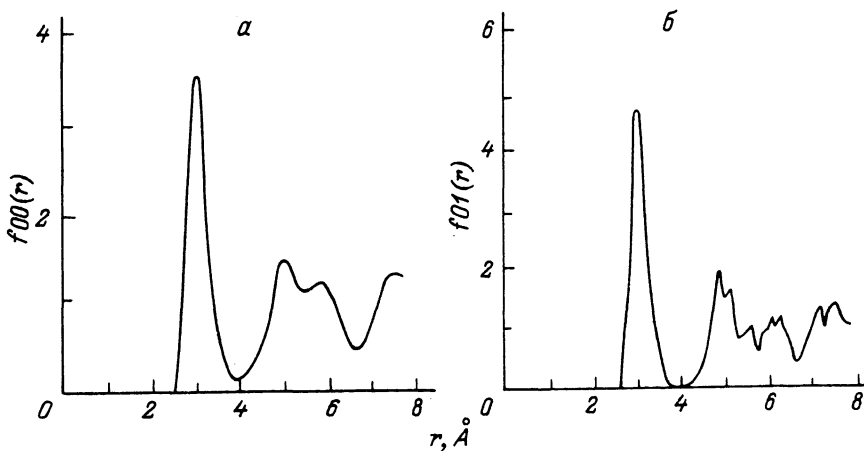


Рис. 3. Функция радиального распределения Al с одним атомом увеличенной массы $m = 55$. а — полная ФРР, б — парциальная ФРР.

Не исключено, что это может уменьшить необходимые для аморфизации скорости охлаждения.

Список литературы

- [1] Anlage S. // Mater. Sci. Forum (Swiz.). 1987. V. 22—24. P. 269—282.
- [2] Степанюк В. С., Калибаева Г. М., Кацнельсон А. А. // Вестник МГУ. Сер. 3. 1992. Т. 33. № 2. С. 99—102.
- [3] Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985. 325 с.
- [4] Zhen S., Davies G. J. // Phys. Stat. Sol. (A). 1983. V. 78. P. 595.
- [5] Сб. «Металлические стекла». В. 2 / Под ред. Г. Бека, Г. Гюнтеродта. М.: Мир, 1986.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
13 августа 1992 г.
