

ОСОБЕННОСТИ ИКОСАЭДРИЧЕСКОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ В СПЛАВЕ Al77.5Mn22.5

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

Методом молекулярной динамики установлено, что для сплава Al77.5Mn22.5 при быстром охлаждении происходит значительное увеличение количества икосаэдрических микрокластеров, которое при длительной выдержке растет. Также продемонстрирована сильная зависимость микроструктуры сплава от способа его получения.

Интерес к сплавам Al—Mn значительно возрос после получения в 1984 г. квазикристаллической икосаэдрической фазы [1]. Эта фаза была обнаружена после быстрого охлаждения из расплава. В ней присутствует дальний ориентационный порядок с точечной группой симметрии, свойственной икосаэдру. По-видимому, термин «квазикристалл» для новой фазы был введен в работе [2]. В ряде исследований [3–6], выполненных в рамках феноменологического подхода теории фазовых переходов Ландау, было показано, что при определенных условиях структура с точечной группой икосаэдра может быть энергетически более выгодной, чем структура с трансляционной инвариантностью. Структурные особенности в сплавах Al—Mn определяются спецификой межатомных взаимодействий и, естественно, зависят от концентрации компонентов. Так, в работах [7, 8] было отмечено, что при 22.5% Mn икосаэдрическая фаза в Al—Mn выражена наиболее ярко. Вместе с тем при получении квазикристаллической фазы в этих сплавах возможны серии переходов между квазикристаллическим, кристаллическим и аморфным состояниями.

Поэтому при экспериментальных исследованиях требуется тщательная идентификация полученных фаз. При этом важно иметь в виду, что система может находиться в метастабильном состоянии и релаксировать к устойчивому состоянию. Однако нельзя исключить, что свободная энергия системы в своем стремлении к глобальному минимуму может проходить через систему локальных минимумов, каждый из которых отвечает какому-либо метастабильному состоянию. Если при этом положения данных минимумов на гиперповерхности потенциальной энергии различаются между собой не слишком сильно, то в зависимости от пути, по которому система шла к равновесию, достигнутые состояния могут оказаться различными. Ранее это было продемонстрировано нами методом молекулярной динамики для сплава Ni—P [9]. В настоящей работе поставлена цель выяснить следующие вопросы, относящиеся к сплаву Al77.5Mn22.5. 1) Происходит ли действительно при этой концентрации заметное увеличение икосаэдрических микрокластеров при быстром охлаждении из расплава? 2) Как изменяется количество икосаэдров при термостабилизации быстроохлажденного сплава, т. е. происходит ли при этом «размножение» икосаэдров или же появляются «кристаллические зародыши»? 3) Как сильно и каким образом микроструктура в сплаве Al—Mn зависит при данных условиях от способа

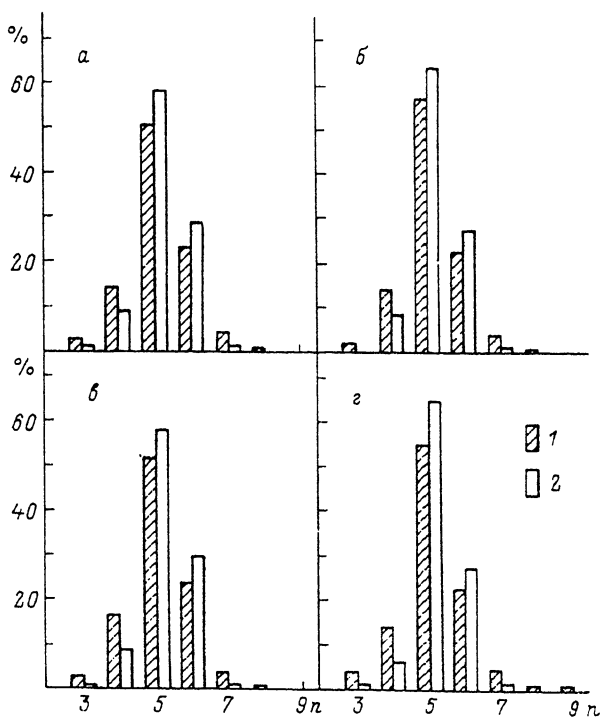


Рис. 1. Количество граней многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Al (1) и Mn (2) и имеющих n сторон.

«получения» или, другими словами, можно ли, изменяя способ «получения» сплава, добиться увеличения икосаэдрических микрокластеров?

Основные результаты, излагаемые ниже, получены методом молекулярной динамики в рамках микроканонического ансамбля (NVE) [10]. Система представляла собой ансамбль из 256 частиц Al и Mn, взаимодействие между которыми описывалось следующим образом. Для сплава Al77.5Mn22.5 методом псевдопотенциала с формфактором Хейне—Абаренкова—Анималу и экранированием Вашиста—Сингви определялись потенциалы межатомного взаимодействия [10, 11]. Найденные значения для положения первого минимума и глубины потенциала использовались далее для нахождения потенциала Морзе для взаимодействий Al—Al, Al—Mn и Mn—Mn, использовавшихся в дальнейших расчетах.

Было смоделировано быстрое охлаждение термостабилизированного при температуре 2000 К расплава Al77.5Mn22.5 до температуры 300 К с шагом $E=15$ с в течение 1700 шагов. Далее проводилась термостабилизация модели в течение 10 000 шагов. Назовем эту модель состоянием 1.

Для исследования влияния способа получения сплава Al—Mn на его микроструктуру было смоделировано быстрое охлаждение расплава с 2000 до 4 К (с той же скоростью, как и в первом случае) с последующим нагреванием до 300 К и термостабилизацией модели при этой температуре в течение 10 000 шагов. Эту модель назовем состоянием 2.

Проводился анализ многогранников Вороного для обеих полученных моделей при температуре 300 К в начале и в конце термостабилизации.

Результаты анализа многогранников Вороного представлены на рис. 1, 2 и в таблице.

На рис. 1 представлено количество многоугольников, имеющих n сторон ($n=3, 4, \dots, 9$) и составляющих грани многогранников Вороного, описанных вокруг

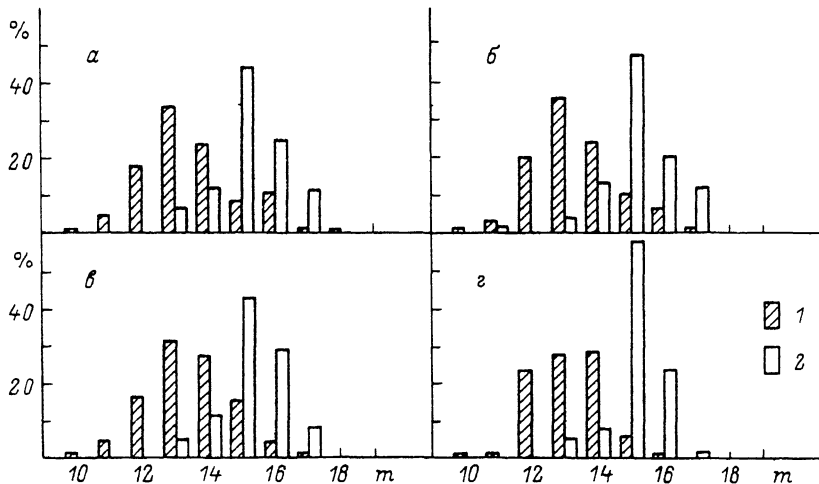


Рис. 2. Количество многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Al (1) и Mn (2) и имеющих m граней.

атомов Al и Mn (в процентах от общего числа граней многогранников вокруг Al и Mn). Рис. 1, а, б соответствуют состоянию 1 соответственно в начале и в конце термостабилизации, рис. 1, в, г — состоянию 2.

На всех рисунках наблюдается явно выраженный максимум при $n = 5$. В общем случае это соответствует не только икосаэдрам, но и, например, антипризме Архимеда, но в данном случае их процентное содержание существенно меньше, чем процентное содержание икосаэдров, которое при термостабилизации заметно увеличивается, что также видно из таблицы.

В таблице представлены характерные конфигурации многогранников Вороного, окружающих атомы Al и Mn (в процентах от общего числа многогранников вокруг данного типа атомов и от числа многогранников в целом) при температуре 2000 К (расплав) и 300 К для обоих состояний. Нужно отметить значительное

Результаты анализа многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Al и Mn (в % от общего числа многогранников Вороного, описанных вокруг данного типа атомов и от числа многогранников в целом) для расплава и для обоих состояний

Температура и состояние	Окружение	Икосаэдроподобные	Призмы	Структуры типа ГЦК
2000 К	Al	4.5	7	18
	Mn	23	10.6	16
	Всего	8.6	7.8	17.9
300 К, состояние 1, начало	Al	21	20	13
	Mn	56.2	22.8	3.6
	Всего	29.3	20.7	9
300 К, состояние 1, термостаб.	Al	31.7	13.5	15.6
	Mn	69	12.3	3.6
	Всего	39.8	13.3	12.9
300 К, состояние 2, начало	Al	22	17	21
	Mn	50.9	17.6	12.4
	Всего	28.9	17.2	19.1
300 К, состояние 2, термостаб.	Al	26.6	18	10
	Mn	66.7	12.3	7.1
	Всего	35.6	16.8	9.4

увеличение количества икосаэдрических микроструктур при быстром охлаждении и существенные различия в проценте икосаэдроподобных структур, призм и структур типа ГЦК для состояний 1 и 2 как в начале, так и в конце термостабилизации.

На рис. 2 представлено количество многогранников Вороного, имеющих m граней ($m = 10, 11, \dots, 19$) вокруг атомов Al и Mn (в процентах от общего числа многогранников вокруг этих атомов). Рис. 2, а, б соответствуют состоянию 1 соответственно в начале и в конце термостабилизации, рис. 2, в, г — состоянию 2.

Из рис. 2 и таблицы видно, что микроструктура данного сплава при разных способах его получения существенно отличается, причем в начале термостабилизации эти отличия не так сильно выражены, как после термостабилизации (сравнивая рис. 2, б, г, соответствующие окончанию термостабилизации, можно заметить существенные отличия в величине пика, соответствующего окружению Mn при $m = 15$, и значительные различия в диаграммах, соответствующих окружению Al), из чего можно сделать вывод о полученных нами различных метастабильных состояниях.

Список литературы

- [1] Shechtman D., Blech I., Gratias D.; Cahn J. W. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 1951.
- [2] Levine D., Steinhardt P. J. // Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2477.
- [3] Nelson D. R., Widom M. // Nucl. Phys. B. 1984. V. 240. P. 113.
- [4] Bak P. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1517.
- [5] Levine D., Lubensky T. C., Ostlund S., Ramaswamy S., Steinhardt P. J., Toner J. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1520.
- [6] Mermin N. D., Trolan S. M. // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 1524.
- [7] Anlage S. // Mater. Sci. Forum (Swiz.). 1987. V. 22—24. P. 269—282.
- [8] Inoue A., Arnbeid L., Lehtinen B., Oguchi M., Masumoto T. // Metall. Trans. A. 1986. V. 17. P. 1657.
- [9] Stepanyuk V. S., Szasz A., Katsnelson A. A., Trushin O. S. // J. of Non-Cryst. Solids. 1990. V. 125. P. 139—142.
- [10] Хеерман Д. Компьютерное моделирование в теоретической физике. М.: Наука, 1989. 190 с.
- [11] Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985. 325 с.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
5 ноября 1991 г.