

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК В РАЗБАВЛЕННЫХ СПЛАВАХ Ni—P, Ni—B

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

Ранее нами были исследованы структурные особенности аморфных сплавов «металл—металлоид» [1].

Были установлены основные структурные единицы сплавов Ni—P, Ni—B, Fe—P, Fe—B при концентрациях компонент, соответствующих аморфной фазе. В частности, было установлено заметное различие в распределении по координационным числам вокруг фосфора и бора.

Так, распределение по координационным числам вокруг P и Ni очень похоже, а вокруг B и Ni сильно различаются. Это, как было нами предположено, является возможной причиной того, что автокаталитический процесс в Ni—P является более контролируемым, чем в Ni—B. Для удобства дальнейшего изложения на рис. 1, а и 2, а приведены результаты анализа многогранников Вороного, полученные нами ранее [1]. Однако за пределами наших предыдущих исследований остался вопрос: как происходит образование и формирование микроструктур в Ni—P и Ni—B на самой начальной стадии, т. е. в случае сильно разбавленного сплава?

Настоящее сообщение ставит своей целью дать ответ на этот вопрос.

С самого начала можно было предположить, что поведение малых концентраций P и B в Ni будет различным. На это указывали и наши расчеты электронной структуры P и B в Ni [2].

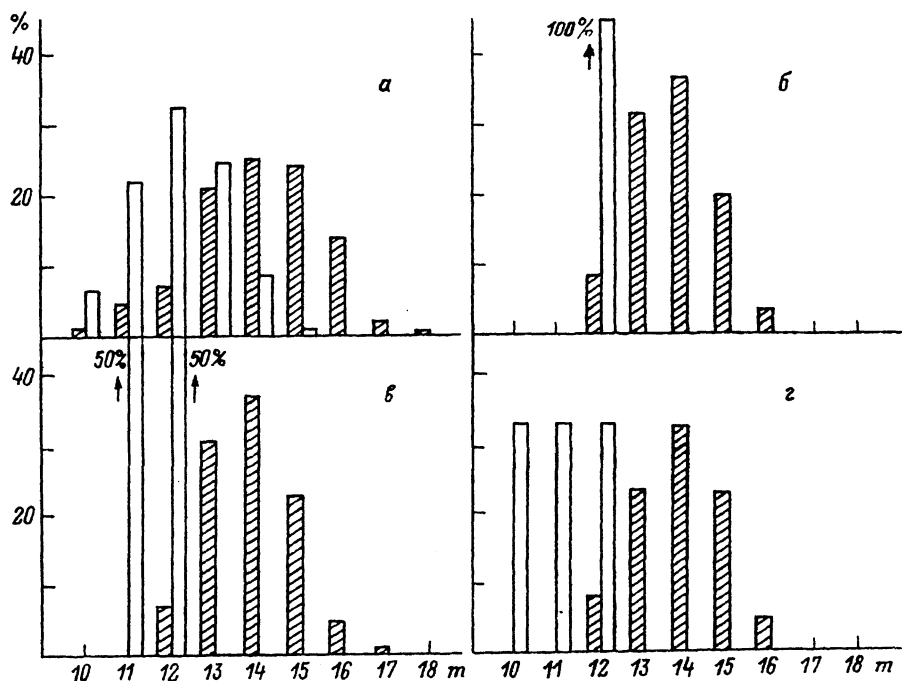


Рис. 1. Количество многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Ni и P и имеющих m граней (в % от общего числа многогранников Вороного, описанных вокруг данного типа атомов).

Ni₈₅P₁₅ (а), Ni—P (б—г) при 1, 2 и 3 атомах P, —Ni, —P.

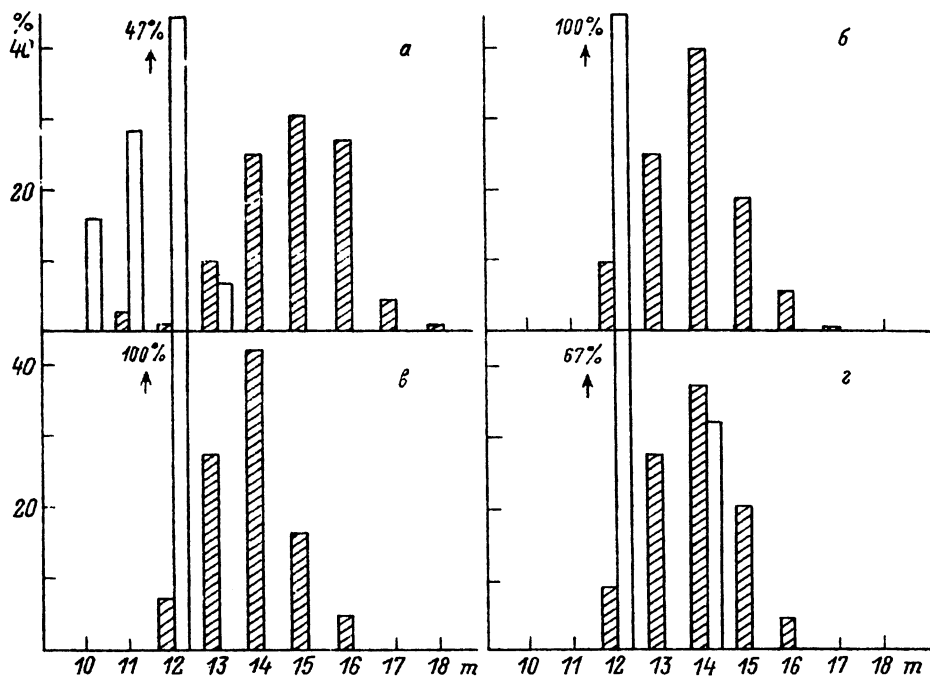


Рис. 2. Количество многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Ni и B и имеющих m граней (в % от общего числа многогранников Вороного, описанных вокруг данного типа атомов).

$Ni_{64}B_{36}$ (а), Ni—B (б—г) при 1, 2 и 3 атомах B, —Ni, —B.

В частности, было установлено, что перетекание заряда (хотя и слабое) имеет противоположное направление: заряд от фосфора перетекает к Ni и от Ni к бору. Кроме того, плотность электронных состояний возле уровня Ферми имеет различное поведение в Ni—P и Ni—B [2]. Также несомненное значение на формирование микроструктур имеет заметное отличие энергии взаимодействия атомов P и атомов B (у бора взаимодействие существенно меньше).

Для ответа на поставленный вопрос было проведено молекулярно-динамическое моделирование структуры разбавленных сплавов Ni—P и Ni—B. Использовались потенциалы [3, 4] для систем Ni—B (B—B) и Ni—P (P—P) соответственно. Для Ni—Ni взаимодействия использовался потенциал из [5]. Ансамбль состоял из 256 частиц и имел форму куба (увеличение ансамбля до 500 частиц не приводит к существенным изменениям результатов). Моделировалась структура из 1, 2 и 3 атомов металлоида.

Типы многогранников Вороного
вокруг атомов металлоидов

Число атомов	P	B
1 атом	0 2 8 2	0 2 8 2
2 атомв	0 2 8 1 0 3 6 3	0 2 8 2 0 0 1 2 0
3 атома	0 2 8 1 0 3 6 1 0 0 1 2 0	0 2 8 2 0 3 6 5

Сначала сплав был нагрет до 2000 К, а затем охлажден до 300 К и длительное время выдержан. Детали можно найти в наших предыдущих работах [1, 6, 7].

После термостабилизации системы был сделан анализ многогранников Вороного. На рис. 1, 2 представлено распределение по координационным числам В таблице показаны типы многогранников Вороного вокруг Р и В.

Главные выводы, которые можно сделать из полученных результатов.

1. В обеих системах на начальной стадии образуется микрокластер вокруг фосфора и бора с координационным числом 12.

2. Увеличение концентрации атомов Р приводит на начальной стадии к образованию микрокластеров с меньшим (чем 12) координационным числом. Это, вероятно, связано, как видно из таблицы, с появлением более упорядоченных микроструктур.

3. Увеличение концентрации атомов В приводит на начальной стадии к более вероятному созданию микрокластеров с координационным числом 12 и больше. Таким образом, микрокластеры в этом случае более разупорядочены.

4. При случайном размещении нескольких атомов В в Ni и дальнейшей термостабилизации системы прямой контакт атомов В не наблюдается, хотя в аморфном сплаве Ni₆₄B₃₆ он обнаружен как теоретически [7], так и экспериментально [8, 9].

5. Сравнение рис. 1, а и 2, а показывает, что дальнейший рост концентрации атомов металлоида приведет в системе Ni—Р к появлению заметного количества микрокластеров с координационным числом больше 12, а в системе Ni—В к появлению заметного количества микрокластеров с координационным числом меньше 12. Поскольку процесс аморфизации в рассматриваемых системах возможен только при достаточно больших концентрациях атомов металлоида (15—20%), то можно предположить, что в Ni—Р и Ni—В имеют место существенно разные механизмы возникновения аморфной структуры.

Список литературы

- [1] Stepanyuk V. S., Szasz A., Katsnelson A. A., Trushin O. S. // J. Non-Cryst. Solids. 1991. V. 130. P. 311.
- [2] Stepanyuk V. S., Szasz A., Katsnelson A. A., Kozlov A. V., Farberovich O. V. // Physica B. 1990. V. 164. P. 300.
- [3] Ji Chen Li, Cowlam W. // Phys. Chem. Liquids. 1987. V. 17. P. 29.
- [4] Братковский А. М., Смирнов А. В. // Тез. докл. на VII Всероссийской конф. «Структура и свойства жидких металлов и аморфных сплавов».
- [5] Zhen S., Davies G. // Phys. Stat. Sol. (a). 1983. V. 78. P. 598.
- [6] Stepanyuk V. S., Katsnelson A. A., Trushin O. S., Nayak P., Szasz A. // Phys. Stat. Sol. (b). 1990. V. 160. P. K117a.
- [7] Stepanyuk V. S., Katsnelson A. A., Szasz A., Trushin O. S. // Phys. Stat. Sol. (b). 1990. V. 161. P. K77.
- [8] Cowlam N. // J. Non-Cryst. Solids. 1984. V. 161—162. P. 337.
- [9] Ishmaev S. N., Isakov S. L., Sadikov I. P., Svab E., Koszegi L., Lovas A., Meszaros Gy. // J. Non-Cryst. Solids. 1987. V. 94. P. 11.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило в Редакцию
30 марта 1992 г.

ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ФИАНИТОВ ZrO₂:Y₂O₃

С. Н. Иванов, Г. В. Егоров, П. А. Попов

Фианиты, представляющие собой кубические кристаллы ZrO₂(H₂O)₂, стабилизированные путем добавки Y₂O₃, интересны для ряда отраслей науки и