

05.1;05.3

© 1991

ИЗМЕНЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПОЯВЛЕНИЯ ФЛУКТУАЦИЙ  
ЭНЕРГИИ АТОМОВ ПРИ АМОРФИЗАЦИИ

А.И. Михайлин, И.А. Слуккер

Многочисленные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что диффузия в аморфных телах может протекать интенсивнее, чем в кристаллических [1-3]. Этот эффект обычно связывается с изменением величины потенциальных барьеров миграции, которая оценивается как разность потенциальных энергий системы в основном состоянии и седловой точке на пути миграции.

В разупорядоченной структуре вместо одного значения энергии барьера, характерного для кристалла, имеется спектр таких значений. Их величина определяется локальной атомной структурой. В [4] показано, что гауссово распределение барьеров миграции по их энергии приводит к ускорению диффузии по сравнению с  $\delta$ -распределением. Ускорение тем больше, чем шире распределение.

В настоящей работе предлагается другое объяснение ускорения диффузии в аморфных телах, основанное на изменении частоты образования мощных флуктуаций энергии, приводящих к диффузионному скачку.

Модельная разупорядоченная структура была получена методом молекулярной динамики с помощью алгоритма Андерсена-Нозе путем быстрой закалки из расплава [5]. Расчетная ячейка содержала 500 атомов. Использовали потенциал межатомного взаимодействия Стиллинджера-Вебера [6] с константами, подогнанными по температуре плавления никеля при постоянном давлении. Удельная теплота плавления составила 80 кал/г, что близко к экспериментальному значению 73 кал/г [7]. Скорость охлаждения в машинном эксперименте составила  $8 \cdot 10^{12}$  К/с. Значения экспериментальных и полученных в расчете параметров аморфного никеля приведены в таблице.

	$Q_{пл}$	$T_g/T_{пл}$	Максимум функции рад. распределения
Эксперимент	73	0.25	$r_1 = 2.4 \text{ \AA}$ , $r_2 = 4.2 \text{ \AA}$ , $r_3 = 4.8 \text{ \AA}$
Расчет	80	0.4	$r_1 = 2.4 \text{ \AA}$ , $r_2 = 4.2 \text{ \AA}$ , $r_3 = 4.8 \text{ \AA}$

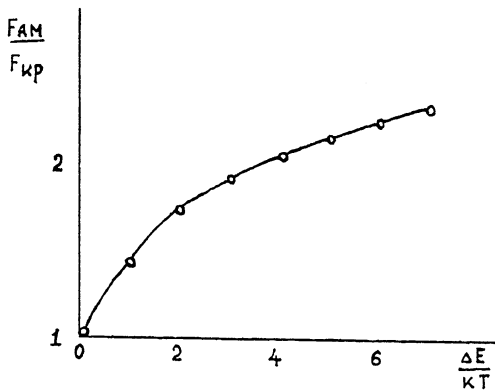


Рис. 1. Отношение вероятности появления флуктуаций энергии в аморфном теле к вероятности в кристаллическом при комнатной температуре  $T/T_{пл} = 0.175$ .

В полученной модели аморфного никеля рассчитана вероятность появления мощных флуктуаций энергии  $E$  атомов при температурах ниже температуры стеклования. С этой целью определяли среднюю энергию атомов  $\langle E_i \rangle$  при температурах  $T = 0.175 T_{пл}$  и  $0.35 T_{пл}$ . Затем, рассматривая зависимость энергии каждого атома от времени, детектировали моменты достижения атомами максимумов энергии и определяли величины флуктуаций  $\Delta E_i = E_{i\max} - \langle E_i \rangle$ . Аналогичную процедуру проводили для кристаллической структуры при тех же температурах. В этом случае  $\langle E_i \rangle$  для всех атомов одно и то же, а в аморфном теле имеет распределение, близкое к гауссовому. Во всех случаях выборка включала не менее 3000 флуктуаций.

Как видно из рис. 1, частота образования флуктуаций энергии в аморфной структуре выше, чем в кристаллической. Это отличие тем заметнее, чем больше энергия флуктуаций и ниже температура. При  $T = 0.175 T_{пл}$  зависимость  $\nu_a/\nu_{кр} = f\left(\frac{\Delta E}{\langle E \rangle}\right)$  достигает величины 2.2. Экстраполяция к значению  $\Delta E = E_M$ , где  $E_M = 1.2$  эВ – энергия активации миграции вакансии в никеле [8], дает значение  $\nu_a/\nu_{кр} = 2.5$ .

Таким образом, вероятность образования мощных флуктуаций энергии в разупорядоченной структуре выше, чем в кристаллической. Этот эффект должен приводить к ускорению диффузии в неупорядоченной структуре даже в том случае, когда высота потенциальных барьеров миграции не отличается от характерных для кристалла. Можно было бы назвать такое ускорение диффузии динамическим, в отличие от статического, связанного с изменением высоты потенциальных барьеров.

Динамический эффект усиливается при понижении температуры и росте величины флуктуаций. Это означает, что его вклад будет максимален при низких по сравнению с  $T_g$  температурах, где коэффициент диффузии мал.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Бокштейн Б.С., Карпов И.В., Клиггер Л.М. // Изв. вузов. Черная металлургия. 1985. № 11. С. 87-99.
- [2] Кантор Б., Кан Р.В. Диффузия атомов в аморфных сплавах. В кн.: Аморфные металлические сплавы / Под ред. Ф.Е. Любарского. М.: Металлургия, 1987.
- [3] Mehrer H., Dörner W. // Defects and Diffusion Forum. 1989. V. 66-69. P. 189-206.
- [4] Ахизер И.А., Давыдов Л.Н. Диффузия в неупорядоченных металлах. Припринт ХФТИ. Харьков, 1989. 16 с.
- [5] Nose S., Yonesawa F. // Solid St. Commun. 1985. V. 56. N 12. P. 1005-1008.
- [6] Weber T.A., Stillinger F.H. // Phys. Rev. B. 1989. V. 31. N 4. P. 1954-1963.
- [7] Кей Дж., Лэби Т. Таблицы физических и химических постоянных. М.: Физматгиз, 1962. 247 с.
- [8] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. 1981.

Ленинградский институт  
точной механики и оптики

Поступило в Редакцию  
5 июня 1991 г.