

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 548.4

ПОТЕКАЕВ А.И. *, КУЛАГИНА В.В. **, ***, ЧАПЛЫГИНА А.А. **, ПОПОВА Л.А. ****,
СТАРОСТЕНКОВ М.Д. **, КЛОПОТОВ А.А. *****

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ Cu_3Pt
ПРИ АТОМНОМ УПОРЯДОЧЕНИИ

В результате исследований методом Монте-Карло установлено, что в сплаве Cu_3Pt при переходе порядок – беспорядок наблюдается сложное структурно-фазовое превращение, которое совмещает атомное упорядочение и структурное превращение. При термоциклировании на зависимости разницы свободных энергий неупорядоченного и частично упорядоченного состояний на атом системы от температуры в районе перехода порядок – беспорядок в слабоустойчивом состоянии системы наблюдается петля. Из анализа зависимостей от температуры разности конфигурационных энергий и комбинаторных энтропий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний системы следует, что определяющую роль играет именно внутренняя энергия, а не энтропия системы. При термоциклировании в области слабоустойчивых состояний системы наблюдается петля гистерезиса, причем петли наблюдаются как на зависимостях конфигурационной энергии, так и комбинаторной энтропии: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. Выделяются особенности доменной структуры в области слабоустойчивых состояний: характерна «путанная» доменная структура, которая свидетельствует об отсутствии термодинамических предпочтений тех или иных фаз или доменов. «Путанная» доменная структура свидетельствует именно о термодинамически слабо определенном структурном состоянии системы, при котором разные структурные составляющие системы могут отличаться в смысле симметрии. Термодинамические стимулы превращения очень малы, поэтому в системе может наблюдаться целый спектр возможных структурных состояний.

Ключевые слова: слабоустойчивые состояния, структурно-фазовые превращения, роль структурных дефектов.

Введение

Система Cu-Pt [1] интересна тем, прежде всего, что в сплавах этой системы при переходе порядок – беспорядок из неупорядоченного состояния регулярного раствора на основе ГЦК-решетки обнаруживается целый ряд кристаллографических структур. Сплав Cu_3Pt при упорядочении трансформируется в упорядоченное состояние со сверхструктурой $L1_2$. Сплав эквиатомного состава CuPt трансформируется из ГЦК-решетки в орторомбическую (состояние со сверхструктурой $L1_1$, в которой углы α , β , γ отличаются от $\pi/2$). Сплав CuPt_3 в упорядоченном состоянии имеет сверхструктуру $L1_2$. Была обнаружена возможность существования упорядоченной фазы с 20 ат. % Pt [2], которая соответствует составу Cu_4Pt (тип сверхструктуры сплава не определен). Было предсказано существование упорядоченного соединения Cu_7Pt с концентрацией $\sim 12,5$ ат. % Pt [3]. Все это свидетельствует о том, что сплавы системы Cu-Pt реализуются в состояниях с множеством сверхструктур в широком интервале концентраций компонентов бинарного сплава и температур. Следует особо отметить в этой системе разнообразие структурных превращений, которые сопутствуют фазовому переходу порядок – беспорядок, таких, как ГЦК–ГЦК, ГЦТ–орторомбическая структура. При этом реализуется целый набор сверхструктур, например таких, как $L1_2$, $L1_1$, $L1_3$, $L1_0$. Совмещение фазового перехода порядок – беспорядок со структурно-фазовыми превращениями открывает новые возможности управления структурой и механическими свойствами металлических сплавов.

При исследовании структурно-фазовых превращений в системе Cu-Pt методом Монте-Карло [4] было установлено, что в системе Cu-Pt при охлаждении наблюдаются сложные структурно-фазовые превращения, в которых совмещены переход порядок – беспорядок и структурное превращение. При атомном упорядочении в сплаве Cu_3Pt на кривой зависимости конфигурационной энергии от температуры наблюдаются близкорасположенные горизонтальные участки (в некотором интервале температур). Указанные участки соответствуют разным структурно-фазовым состояниям системы, разница между энергиями которых очень мала. Это свидетельствует о слабой устойчивости этих состояний сплава относительно структурно-фазовых взаимопревращений. Цель

данного исследования – изучить детально особенности структурно-фазовых превращений в сплаве Cu_3Pt при их совмещении с фазовым переходом порядок – беспорядок.

Модель и методика моделирования

При кристаллизации в системе Cu-Pt образуется непрерывный ряд твердых растворов [1]. В твердом состоянии при низких температурах формируются упорядоченные структуры в широком интервале концентраций. Наивысшая степень упорядочения достигается в сплавах при 22,5; 50,0; 72,5 и 86,0 ат. % Pt, что соответствует составам соединений Cu_3Pt , CuPt , CuPt_3 и CuPt_7 [1]. Система Cu-Pt является единственной двойной системой, в которой при эквиатомном составе реализуется упорядоченная фаза CuPt со сверхструктурой $L1_1$. Сплав Cu_3Pt в упорядоченном состоянии имеет сверхструктуру $L1_2$. В сплаве CuPt_3 установлено наличие сверхструктуры $L1_3$, которая также наблюдается только в системе Cu-Pt [2]. Сверхструктурный порядок наблюдается у сплавов CuPt_7 и Cu_3Pt_5 [3].

Выберем сплав Cu_3Pt со сверхструктурой $L1_2$ в упорядоченном состоянии в качестве модельного объекта исследования. Исследование проведем с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло [5], аналогично выполненным ранее [6–26].

Размеры модельного кристалла составляют $24 \times 24 \times 24$ атомных слоёв (55296 атомов). На границах модельного кристалла будем использовать периодические граничные условия, что эффективно соответствует бесконечной системе. Для активизации процесса диффузии будем вводить в кристалл случайным образом одну вакансию, что соответствует концентрации вакансий $\sim 1,81 \cdot 10^{-5}$. Предположим, что диффузия атомов будет происходить по вакансионному механизму аналогично применяемому ранее [7–9]. Состояние сплава будет изменяться в дискретные моменты времени, за одну итерацию примем один акт самодиффузии, соответствующий перескоку атома в вакантный узел. При каждой итерации будем рассчитывать вероятность перескока на место вакансии ближайшего или находящегося во втором соседстве к вакантному узлу атома i . Вероятность перескока атома на

место вакансии будем определять как $p_i = A^{-1} e^{-\frac{E_{\max} - (E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i)}{kT}}$, где $E_{\text{н}}^i$ – энергия атома в начальном положении; $E_{\text{к}}^i$ – энергия того же атома после перескока на место вакансии; $E_{\max} = \max_i (E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i)$; k – постоянная Больцмана; T – температура; A – нормирующий множитель $1 \leq i \leq M$, M – количество соседей на двух координационных сферах.

Конфигурационную энергию кристалла будем рассчитывать в соответствии с выражением $E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \phi(r_i - r_j)$, где $r_i - r_j$ – расстояние между атомами i и j ; N – количество атомов в кристалле; M – количество соседей на двух координационных сферах; $\phi(r_i - r_j)$ – межатомное парное взаимодействие. Межатомное взаимодействие [5, 6] будем задавать с помощью парных потенциалов:

$$\begin{aligned} \phi(r_i - r_j) = & P_i P_j V_{AA}(r_i - r_j) + (1 - P_i)(1 - P_j) V_{BB}(r_i - r_j) + \\ & + [P_i(1 - P_j) + (1 - P_i)P_j] V_{AB}(r_i - r_j). \end{aligned}$$

Здесь P_i, P_j – вероятность нахождения атома A в узлах i и j соответственно; $V_{AA}(r_i - r_j)$ – потенциал межатомного парного взаимодействия, например, пары атомов A на расстоянии $R = |r_i - r_j|$. При рассмотрении ограничимся взаимодействием ближайших и вторых соседей, при этом для аппроксимации потенциала центрального парного взаимодействия атомов, например $V_{AA}(R)$, будем использовать потенциальную функцию Морза:

$$V_{AA}(R) = D_{AA} \left\{ \exp[-2\alpha_{AA}(R - R_{AA}^0)] - 2 \exp[-\alpha_{AA}(R - R_{AA}^0)] \right\},$$

где D_{AA} характеризует энергию диссоциации пары атомов A ; α_{AA} – «жесткость» связи; R – расстояние между атомами; R_{AA}^0 – равновесное значение R для пары $A-A$.

Результаты и их обсуждение

Для начального состояния были рассчитаны средняя конфигурационная энергия и значения параметров решетки в зависимости от концентрации атомов меди в системе Cu-Pt . Расчетный блок системы задавался путем случайного распределения атомов Cu и Pt по узлам гранцентрированной кубической решетки в соответствии с заданными концентрациями компонент. Параметры потенциалов межатомного взаимодействия были взяты из [27, 28]. Температура сплава изменялась в интервале значений от 2000 до 200 К с шагом 100 К.

Исследование состояло из двух этапов: на первом изучались структурно-фазовые превращения только при охлаждении, которое предположительно должно сопровождаться атомным упорядочением в системе. На втором этапе рассматривался процесс термоциклирования, который включал процесс нагрева и последующего охлаждения в том же температурном интервале.

Рассмотрим результаты исследований на первом этапе. Стартовая конфигурация представляет собой разупорядоченный ГЦК-твердый раствор. Следует отметить, что при рассмотрении модельного сплава система вначале находится в разупорядоченном состоянии. В начальном состоянии по узлам кристаллической решетки случайным образом распределялись 75 % атомов Cu и 25 % атомов Pt . По значениям средней конфигурационной энергии был построен график зависимости энергии от температуры в процессе охлаждения (рис. 1). Отметим, что перестройка кубической решетки в ромбоэдрическую не происходит. Как видно из рис. 1, при температуре выше 1800 К сплав разупорядочен. При понижении температуры значение энергии уменьшается, что говорит о структурно-фазовых перестройках системы в более выгодные структурные состояния. При понижении температуры наблюдается определенная последовательность структурных состояний (рис. 2). Темным цветом на рис. 2 обозначены атомы Pt , светлым – Cu . При температурах ~ 2000 К сплав полностью разупорядочен, а при $T = 1600$ К заметны области, упорядоченные по типу сверхструктуры $L1_2$. При температуре $T = 1000$ К практически весь кристалл упорядочен по типу сверхструктуры $L1_2$, при дальнейшем понижении температуры сверхструктура сохраняется.

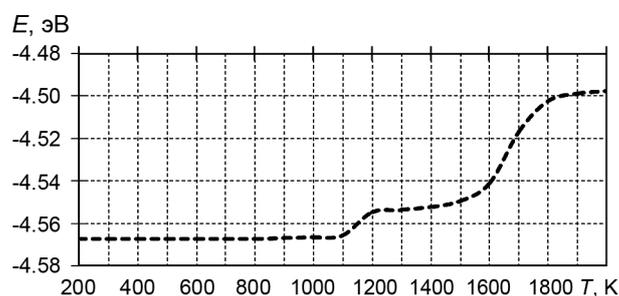


Рис. 1. Зависимость от температуры конфигурационной энергии на атом сплава Cu_3Pt

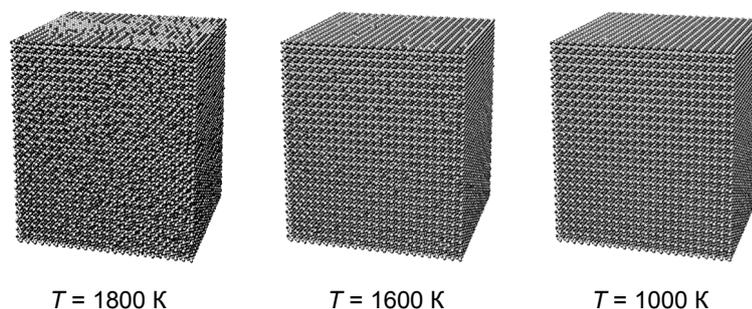


Рис. 2. Атомная структура сплава Cu_3Pt в зависимости от температуры

Следует отметить два горизонтальных участка на кривой зависимости средней конфигурационной энергии системы на атом от температуры (в интервале 1200–1500 К и ниже 1100 К). Указанные участки соответствуют разным структурным состояниям системы, разница между энергиями которых очень мала. Это свидетельствует о слабой устойчивости этих структурно-фазовых состояний системы относительно структурно-фазовых превращений. Полностью упорядоченное состояние и частично упорядоченное состояние, реализующееся в интервале температур, разли-

чаются по энергии очень мало, поэтому являются слабоустойчивыми структурными состояниями относительно взаимопревращений. В приближении термодинамической вероятности реализации этих состояний в случае конечных температур можно ожидать их сосуществование в одной системе или взаимопревращений при минимальном термосиловом воздействии.

На рис. 3 представлено изменение доменной структуры (упорядоченных и неупорядоченных фаз) сплава в зависимости от температуры. При $T = 2000$ К сплав разупорядочен, наблюдаются зародыши антифазных доменов со сверхструктурой $L1_2$. При понижении температуры примерно до 1600 К формируется один домен со сверхструктурой $L1_2$, а при дальнейшем понижении температуры этот домен сохраняется.

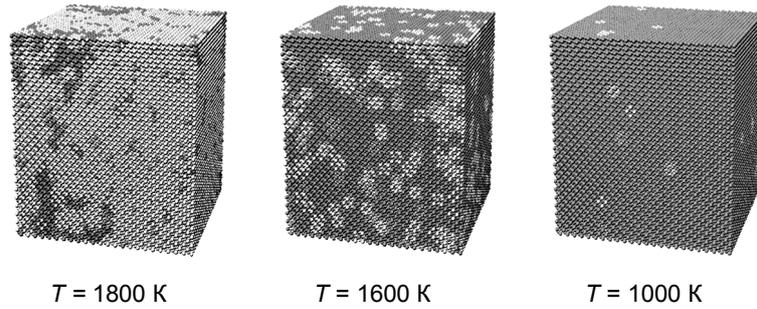


Рис. 3. Распределения атомов по упорядоченным и неупорядоченным фазам в сплаве Cu_3Pt в процессе охлаждения

С целью выяснения структурно-фазовых особенностей состояния системы в области слабоустойчивых состояний на втором этапе исследования была предпринята попытка «термоциклирования» системы. Исследовалось изменение свободной энергии в двух циклах: ступенчатого нагрева сплава от 200 до 2000 К и последующего ступенчатого охлаждения до начальной температуры. Шаг изменения температуры $\Delta T = 100$ К. Время счета составляло $5 \cdot 10^6$ итераций. Расчеты проводились для сплава Cu_3Pt без дефектов (сверхструктура $L1_2$). На рис. 4 в качестве примера приведена атомная (а) и доменная (б) структуры сплава Cu_3Pt с термической АФГ в направлении $\langle 100 \rangle$.

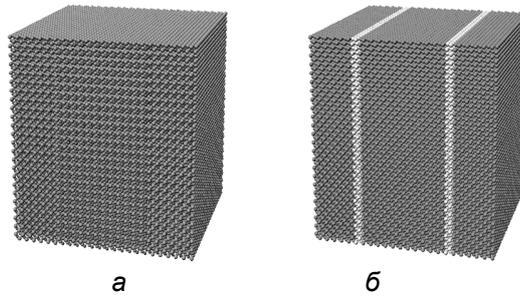


Рис. 4. Атомная (а) и доменная (б) структуры сплава Cu_3Pt с термической АФГ в направлении $\langle 100 \rangle$

При расчете свободной энергии $F = E - TS$ комбинаторная энтропия рассчитывалась соответствующим образом [18]:

$$S = -\frac{Nk}{4} \left[\left(C_A + \frac{3}{4}\eta \right) \ln \left(C_A + \frac{3}{4}\eta \right) + \left(C_B - \frac{3}{4}\eta \right) \ln \left(C_B - \frac{3}{4}\eta \right) + 3 \left(C_A - \frac{\eta}{4} \right) \ln \left(C_A - \frac{\eta}{4} \right) + 3 \left(C_B + \frac{\eta}{4} \right) \ln \left(C_B + \frac{\eta}{4} \right) \right].$$

Результаты расчетов приведены на рис. 5, сплошной линией нанесены полученные при ступенчатом нагреве результаты, а пунктирной – при ступенчатом охлаждении. На рис. 5, а представлены зависимости разницы свободных энергий неупорядоченного и частично упорядоченного состояний $F(0) - F(\eta)$ на атом системы от температуры. Несложно видеть, прежде всего, что при температурах ниже ~ 1800 К термодинамически более выгодно частично упорядоченное состояние, а в районе перехода порядок – беспорядок в слабоустойчивом состоянии системы наблюдается при

термоциклировании петля. При нагреве (сплошная линия) и охлаждении (пунктирная линия) система проходит различные состояния.

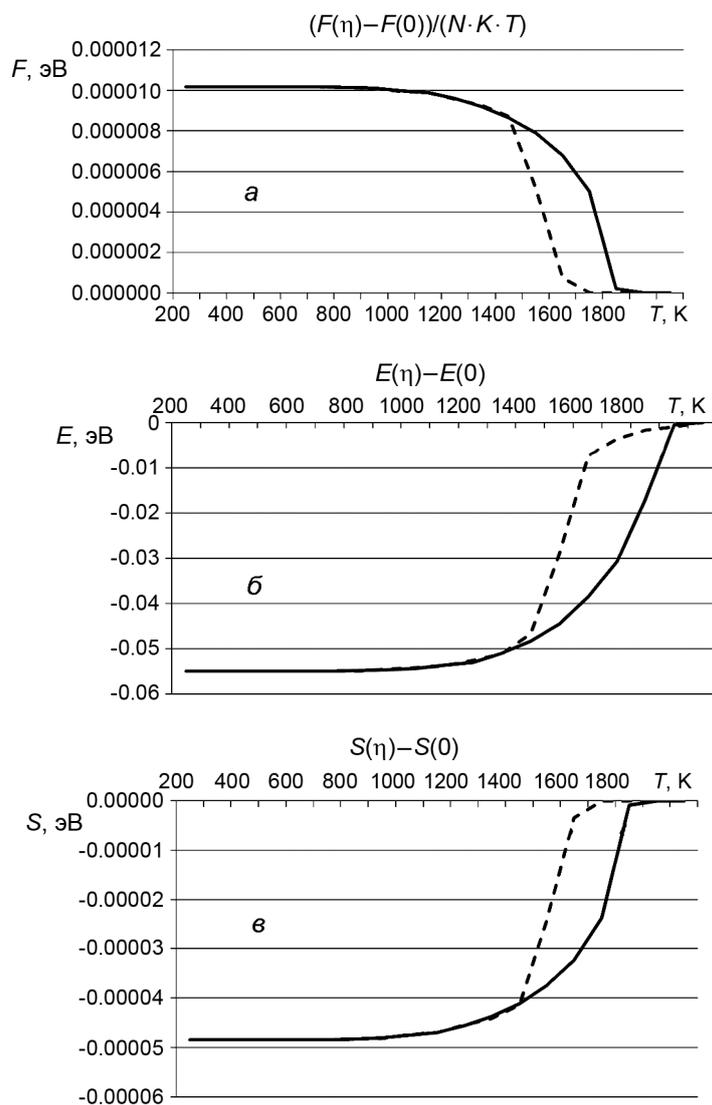


Рис. 5. Зависимости от температуры при нагреве (сплошная линия) и охлаждении (пунктирная линия) разницы: *a* – свободных энергий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний на атом системы; *б* – конфигурационных энергий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний систем; *в* – комбинаторных энтропий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний систем

Таким образом, методом Монте-Карло получена необратимость процессов структурно-фазовых превращений при термоциклировании на фоне совмещения в системе атомного упорядочения и структурных перестроек.

Для анализа доминирующих факторов в данном процессе была исследована зависимость от температуры разности конфигурационных энергий и комбинаторных энтропий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний систем. Зависимость от температуры разности конфигурационных энергий $E(\eta) - E(0)$ представлена на рис. 5, *б*, зависимость от температуры разности энтропий $S(\eta) - S(0)$ – на рис. 5, *в*. Из анализа рис. 5, *б* и 5, *в* следует, что определяющую роль играет именно внутренняя энергия, а не энтропия системы.

Проследим зависимости параметров ближнего и дальнего порядка от температуры. Расчеты проведем для сплава Cu_3Pt как без дефектов (сверхструктура $L1_2$), так и с термической антифазной границей (ТАФГ) в направлении $\langle 100 \rangle$. Термическая граница будет состоять из двух видов взаи-

модополняющих сплав до стехиометрии моноатомной и биатомной границ. Параметр ближнего порядка на i -й сфере определим в приближении Каули [29]: $\sigma_i^{AB} = 1 - \frac{P_i^{AB}}{C_B}$, где C_B – концентрация атомов компоненты B ; P_i^{AB} – вероятность образования для атома сорта A связи $A-B$ на i -й координационной сфере. Параметр дальнего порядка рассчитывается в приближении Горского – Брэгга – Вильямса [29]: $\eta = \frac{P_A^{(1)} - C_A}{1 - v}$, где $P_A^{(1)}$ – вероятность заполнения атомами компоненты A узлов первого типа; C_A – концентрация атомов компоненты A ; v – концентрация узлов первого типа.

Значение параметров ближнего и дальнего порядка фиксировалось после $5 \cdot 10^6$ итераций при изменении температуры от 200 до 2000 К с $\Delta T = 200$ К. На рис. 6, а представлена зависимость параметра ближнего порядка от температуры в процессе разупорядочения. Как видно из рис. 6, а, в процессе разупорядочения при росте температуры значение параметра ближнего порядка на первой сфере возрастает, но остается отрицательным. Это свидетельствует о предрасположенности сплава к упорядочению. Значение параметра практически не изменяется до температуры ~ 1000 К, при повышении температуры примерно до 1200 К начинается процесс разупорядочения, о чем свидетельствует уменьшение предрасположенности к упорядочению через некоторый рост значения параметра ближнего порядка.

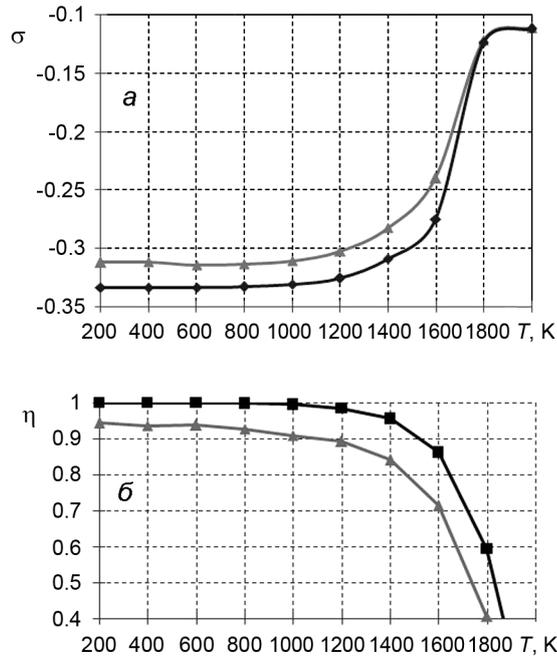


Рис. 6. Температурная зависимость параметров: а – ближнего порядка на первой координационной сфере в сплаве Cu_3Pt без дефектов (треугольный маркер) и с термической антифазной границей в направлении $\langle 100 \rangle$ (круглый маркер); б – дальнего порядка на первой координационной сфере в сплаве Cu_3Pt без дефектов (квадратный маркер) и с термической антифазной границей в направлении $\langle 100 \rangle$ (треугольный маркер)

В интервале температур от 1600 до 1800 К происходит резкое нарушение ближнего порядка, причем это нарушение ближнего порядка больше в сплаве с ТАФГ, что свидетельствует, естественно, о более значительных нарушениях в структуре сплава с дефектом при тех же значениях температуры. Следует отметить, что температурные диапазоны изменения параметра ближнего порядка согласуются с температурными диапазонами изменения конфигурационной энергии кристалла.

Как видно из рис. 6, б, значение параметра дальнего порядка либо сохраняется, либо изменяется слабо до температуры ~ 1000 К, наблюдаются незначительные изменения при повышении температуры примерно до 1200 К, резкое снижение наблюдается в интервале температур пример-

но от 1600 до 1800 К. При более высоких температурах параметр дальнего порядка η стремится к нулю, что свидетельствует об исчезновении дальнего порядка в сплаве. Температурные диапазоны изменения параметра дальнего порядка также согласуются с температурными диапазонами изменения конфигурационной энергии кристалла.

Для сплава с ТАФГ были построены зависимости параметра ближнего порядка по атомным плоскостям в направлении, перпендикулярном плоскости ТАФГ (рис. 7). Как видно из рисунка, при $T = 200$ К график имеет два пика, один положительный (моноатомная граница), другой отрицательный (биатомная граница). Моноатомная граница уже при $T = 200$ К нарушает ближний порядок в шести плоскостях. Биатомная граница при $T = 200$ К нарушает порядок только в двух плоскостях. При повышении температуры до 400 К значение параметра ближнего порядка для моноатомной границы уменьшается, ближний порядок нарушается в четырех плоскостях. Уменьшение количества плоскостей с нарушенным порядком связано с тем, что моноатомная граница перестраивается в специфический структурный дефект. Значение параметра порядка для биатомной границы увеличивается, порядок значительно нарушен только в двух плоскостях. При $T = 600$ К значение параметра ближнего порядка для моноатомной границы уменьшается, ближний порядок нарушается в восьми плоскостях. Это объясняется размытием границы и изменением возникшего структурного дефекта. Биатомная граница также размывается и ближний порядок нарушается в шести плоскостях. При $T = 800$ К моноатомная граница нарушает порядок в шести плоскостях, а биатомная в четырех. При дальнейшем повышении температуры границы становятся более размытыми, нарушение порядка наблюдается по всем плоскостям, значение параметра ближнего порядка увеличивается. При $T = 1600$ К влияние границ ещё заметно, а при $T = 1800$ К значение параметра для всех плоскостей выходит на некоторое среднее значение.

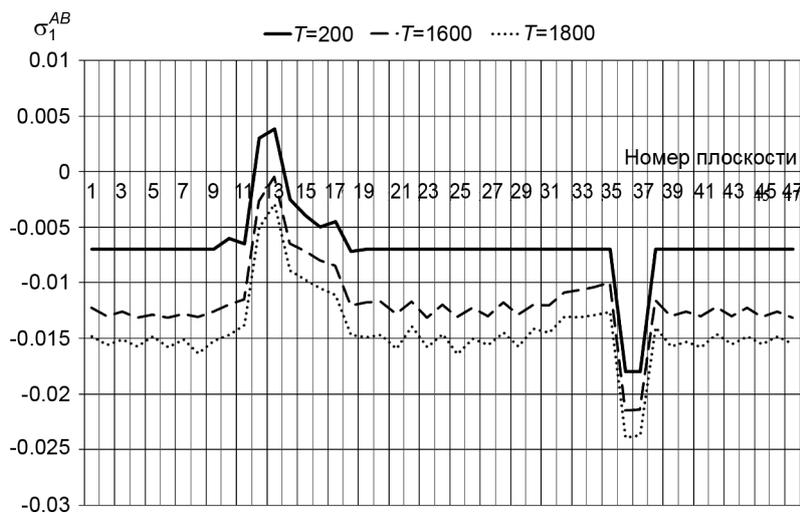


Рис. 7. Температурная зависимость ближнего порядка по первой координатной сфере на атомных плоскостях, параллельных термическим антифазным границам. Скачки на кривых соответствуют положениям ТАФГ

Из приведенных на рис. 5 зависимостей можно ожидать наиболее ярко выраженные особенности в атомной и доменной структурах в интервале температур 1400–1800 К. Большой интерес вызывают структурно-фазовые особенности системы в области слабоустойчивых ее состояний. На рис. 5, а несложно видеть петлю гистерезиса при термоциклировании: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. Следует отметить, что петли наблюдаются как на зависимостях конфигурационной энергии (рис. 5, б), так и комбинаторной энтропии (рис. 5, в).

На рис. 8 приведены атомная и доменная структуры сплава Cu_3Pt с термической АФГ в направлении $\langle 100 \rangle$ в зависимости от температуры. Отметим, что при низких температурах (например, при $T = 200$ К) атомная и доменная структуры достаточно хорошо определены, а при высоких температурах ситуация принципиально другая. Особо следует выделить доменную структуру в области слабоустойчивых состояний, например, при температурах ~ 1400 и 1600 К на рис. 8, б. Для интервала слабоустойчивых состояний характерна «путанная» доменная структура,

которая свидетельствует об отсутствии термодинамических предпочтений тех или иных фаз или доменов. «Путанная» доменная структура (рис. 8, б) свидетельствует именно о термодинамически слабо определенном структурном состоянии системы, при котором разные структурные составляющие системы могут отличаться в смысле симметрии. Из вида слабоустойчивых состояний

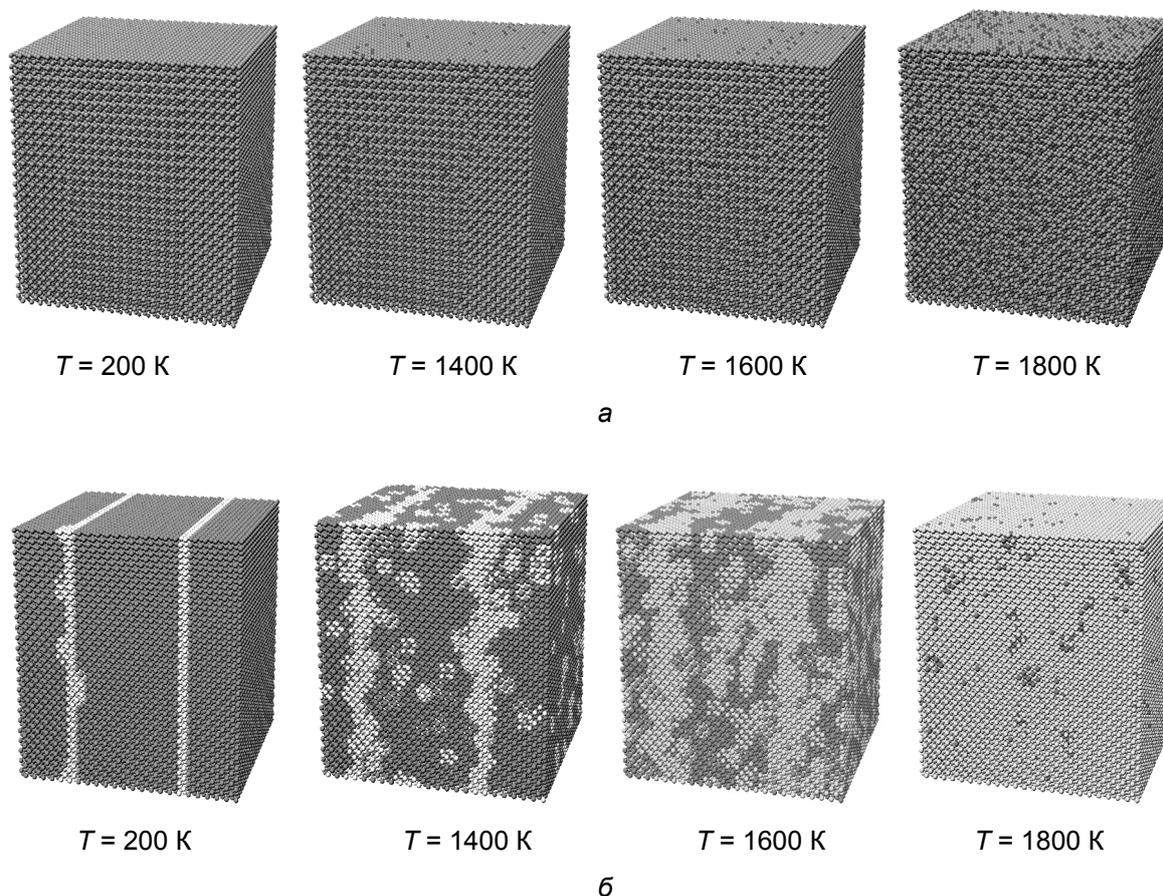


Рис. 8. Атомная (а) и доменная (б) структуры сплава Cu_3Pt с термической АФГ в направлении $\langle 100 \rangle$ в зависимости от температуры

(рис. 8, б) несложно заключить о сосуществовании при переходе порядок – беспорядок в этих слабоустойчивых состояниях как материнских, так и дочерних структур. Термодинамические стимулы превращения очень малы, поэтому в системе может наблюдаться целый спектр возможных структурных состояний. К настоящему времени авторам не известны сообщения в литературе о подобном поведении конденсированных систем при моделировании.

Заключение

В сплаве Cu_3Pt при переходе порядок – беспорядок наблюдается сложное структурно-фазовое превращение, которое совмещает атомное упорядочение и структурное превращение. При понижении температуры высокотемпературная неупорядоченная ГЦК-фаза претерпевает дополнительно к атомному упорядочению и структурное превращение.

При охлаждении сплава на кривой зависимости конфигурационной энергии от температуры наблюдаются горизонтальные участки (в некотором интервале температур). Указанные участки соответствуют разным структурным состояниям системы, разница между энергиями которых очень мала. Это свидетельствует о слабой устойчивости этих состояний системы относительно структурно-фазовых взаимопревращений. В приближении термодинамической вероятности реализации этих состояний в случае конечных температур можно ожидать их сосуществование в одной системе или взаимопревращений при минимальном термосиловом воздействии.

При термоциклировании на зависимости разницы свободных энергий неупорядоченного и частично упорядоченного состояний на атом системы от температуры в районе перехода порядок

– беспорядок в слабоустойчивом состоянии системы наблюдается петля. Для анализа доминирующих факторов в данном процессе были исследованы зависимости от температуры разности конфигурационных энергий и комбинаторных энтропий частично упорядоченного и неупорядоченного состояний систем. Из анализа зависимостей следует, что определяющую роль играет именно внутренняя энергия, а не энтропия системы.

При термоциклировании в области слабоустойчивых состояний системы наблюдается петля гистерезиса: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. Следует отметить, что петли наблюдаются как на зависимостях конфигурационной энергии, так и комбинаторной энтропии: при нагреве и охлаждении система проходит различные состояния. Особо следует выделить доменную структуру в области слабоустойчивых состояний: для интервала слабоустойчивых состояний характерна «путанная» доменная структура, которая свидетельствует об отсутствии термодинамических предпочтений тех или иных фаз или доменов. «Путанная» доменная структура свидетельствует именно о термодинамически слабо определенном структурном состоянии системы, при котором разные структурные составляющие системы могут отличаться в смысле симметрии. Из вида слабоустойчивых состояний несложно заключить об одновременном сосуществовании при переходе порядок – беспорядок в этих слабоустойчивых состояниях как материнских, так и дочерних структур. Термодинамические стимулы превращения очень малы, поэтому в системе может наблюдаться целый спектр возможных структурных состояний.

Таким образом, методом Монте-Карло получена необратимость процессов структурно-фазовых превращений при термоциклировании на фоне совмещения в системе атомного упорядочения и структурных перестроек.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Диаграммы состояния двойных металлических систем: справочник: в 3 т. Т. 1 / под общ. ред. Н.П. Лякишева. – М.: Машиностроение, 1996. – 992 с.
2. Козлов Э.В., Дементьев В.М., Кормин Н.М., Штерн Д.М. Структуры и стабильность упорядоченных фаз. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 1994. – 248 с.
3. Гейченко В.В., Канюка А.К. // УФЖ. – 1976. – Т. 21. – № 10. – С. 1648–1653.
4. Кулагина В.В., Чаплыгина А.А., Попова Л.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 7. – С. 78–87.
5. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: пер. с англ. / под ред. С.А. Ахманова. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
6. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 1995. – Т. 38. – № 6. – С. 3–21.
7. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 1996. – Т. 39. – № 6. – С. 22–40.
8. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – Т. 51. – № 10. – С. 53–62.
9. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 3. – С. 3–13.
10. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 5. – С. 26–39.
11. Потекаев А.И., Дмитриев С.В., Кулагина В.В. и др. Слабоустойчивые длиннопериодические структуры в металлических системах / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2010. – 308 с.
12. Потекаев А.И., Наумов И.И., Кулагина В.В. и др. Естественные длиннопериодические наноструктуры / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2002. – 260 с.
13. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. Слабоустойчивые предпериодические структуры в никелиде титана / под ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 296 с.
14. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – Т. 51. – № 11/3. – С. 148–150.
15. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – Т. 52. – № 8/2. – С. 456–459.
16. Кулагина В.В., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Еремеев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2011. – Т. 8. – № 3. – С. 20–28.
17. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B : дис. ... к.ф.-м.н. – Томск: ТГУ, 1987. – 214 с.
18. Бакалдин А.В. Планарные дефекты в сверхструктуре $L1_1$: дис. ... к.ф.-м.н. – Барнаул: АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1994. – 177 с.
19. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Козлов Э.В., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 9. – С. 59–69.
20. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Кулагина В.В., Гюнтер В.Э. // Изв. вузов. Черная металлургия. – 2010. – № 10. – С. 61–67.
21. Савостиков В.М., Потекаев А.И., Табаченко А.Н. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 11. – С. 52–60.
22. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 8. – С. 5–22.

23. Макаров С.В., Плотников В.А., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 3. – С. 47–54.
24. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Сеница Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – Т. 53. – № 8. – С. 38–46.
25. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Маркидонов А.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – Т. 52. – № 9/2. – С. 139–144.
26. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Потекаев А.И. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 11. – С. 61–67.
27. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Сеница Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 2. – С. 48–55.
28. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 3. – С. 42–46.
29. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теории упорядочивающихся сплавов. – М.: Физматгиз, 1958. – 388 с.

*Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова
Национального исследовательского Томского государственного университета,
г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 01.08.12.

**Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова,
г. Барнаул, Россия

***Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия

****Рубцовский индустриальный институт-филиал АлтГТУ им. И.И. Ползунова,
г. Рубцовск, Россия

*****Томский государственный архитектурно-строительный университет,
г. Томск, Россия

E-mail: kanc@spti.tsu.ru

Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, директор;

Кулагина Валентина Васильевна, к.ф.-м.н., доцент;

Чаплыгина Александра Александровна, аспирантка;

Попова Людмила Анатольевна, к.ф.-м.н., доцент;

Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой;

Клопотов Анатолий Анатольевич, д.ф.-м.н., профессор.