T. 56, № 6

ФИЗИКА

2013

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 548.4

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

ГУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАТ

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СПЛАВЕ Си₃Pt₅ ПРИ АТОМНОМ УПОРЯДОЧЕНИИ

В результате исследований методом Монте-Карло установлено, что в сплаве Cu₃Pt₅ при переходе порядок – беспорядок наблюдается сложное структурно-фазовое превращение, которое совмещает атомное упорядочение и структурное превращение. При охлаждении сплава на кривой зависимости конфигурационной энергии от температуры наблюдаются горизонтальные участки, которые соответствуют разным структурным состояниям системы, причем разница между их энергиями очень мала. Это свидетельствует о слабой устойчивости этих состояний системы относительно структурно-фазовых взаимопревращений. Дефекты структуры, например антифазные границы, в этом случае оказывают существенное влияние на структурно-фазовое состояние всей системы. Структурные дефекты, таким образом, задают в таком слабоустойчивом состоянии системы канал перехода. При термоциклировании на зависимости конфигурационной энергии на атом системы от температуры в районе перехода порядок – беспорядок в слабоустойчивом состоянии системы наблюдаются петли гистерезиса: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. При низких и высоких температурах атомная и фазовая структуры достаточно хорошо определены, а при промежуточных температурах ситуация принципиально неопределенная. При термоциклировании выделяются особенности фазовой структуры в области слабоустойчивых состояний: принципиальная разница структурнофазовых состояний в процессах нагрева и охлаждения.

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

Введение

Система Си-Рt [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 CuPt₃ при упорядочении трансформируется в упорядоченное состояние со сверхструктурой L12. В сплаве CuPt3 также установлено наличие сверхструктуры (рис. 1, в) L1₃, которая также наблюдается только в системе Си-Рt [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 Cu₃Pt упорядочивается в соответствии со сверхструктурой $L1_2$ (рис. 1, δ). Была обнаружена возможность существования упорядоченной фазы с 20 ат. % Pt [2], которая соответствует составу Cu₄Pt (тип сверхструктуры сплава не определен). Было предсказано существование упорядоченного соединения Cu₇Pt с концентрацией ~ 12,5 ат. % Pt [3]. Сверхструктурный порядок наблюдается у сплавов СиР t_7 (рис. 1, *г*) и Си₃Р t_5 (рис. 1, *д*) [3]. Все это свидетельствует о том, что сплавы системы Си–Рtреализуются 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 L1₂, L1₁, L1₃, L1₀. 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 структурнофазовые превращения, в которых совмещены переход порядок – беспорядок и структурное превращение. При атомном упорядочении в сплаве Cu₃Pt₅ 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 Cu₃Pt₅ при их совмещении с фазовым переходом порядок – беспорядок.

Модель и методика моделирования

При кристаллизации в системе Cu–Pt образуется непрерывный ряд твердых растворов [1, 2]. Сверхструктурный порядок наблюдается у сплавов CuPt₇ и Cu₃Pt₅ [3]. Выберем сплав Cu₃Pt₅ с соответствующей сверхструктурой (рис. 1, ∂) в упорядоченном состоянии в качестве модельного объекта исследования. Исследование проведем с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло [5], аналогично выполненным ранее [6–26].



Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктур типа: $a - L1_1$; $\delta - L1_2$; $e - L1_3$; $z - CuPt_7$; $\partial - Cu_3Pt_5$

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 ~ $1,81 \cdot 10^{-5}$. 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 $p_i = A^{-1}e^{-\frac{E_{\max} - (E_{\mu}^i - E_{\kappa}^i)}{kT}}$, где E_{μ}^i – энергия атома в начальном положении; E_{κ}^i – энергия того же атома после перескока на место вакансии; $E_{\max} = \max_i \left(E_{\mu}^i - E_{\kappa}^i\right)$; k – постоянная Больцмана; T – температура; A – нормирующий множитель; $1 \le i \le M$, M – количество соседей на двух координационных сферах. Конфигурационную энергию кристалла будем рассчитывать в соответствии с выражением

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 кри-

сталле; 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:

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

В этом выражении 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:

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

где D_{AA} характеризует энергию диссоциации пары атомов A; α_{AA} – «жесткость» связи; R – расстояние между атомами; R^0_{AA} – 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 распределения атомов Cu и Pt по узлам гранецентрированной кубической решетки в соответствии с заданными концентрациями компонент и особенностями сверхструктуры сплава. Параметры потенциалов межатомного взаимодействия были взяты из [27, 28]. Температура сплава изменялась в интервале значений от 2000 до 200 К с шагом 100 К. При каждой температуре проводилось 5·10⁶ итераций.

Исследование состояло из двух этапов: на первом рассматривались структурно-фазовые превращения только при охлаждении от 2000 до 200 К с шагом 100 К, которое предположительно должно сопровождаться атомным упорядочением в системе. На втором этапе рассматривался один цикл процесса «термоциклирования», который включал процесс «нагрев и последующее охлаждение до начальной температуры» в интервале от 200 до 1400 К.

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 37,5 % атомов Си и 62,5 % атомов Pt. По значениям средней конфигурационной энергии был построен график зависимости энергии от температуры в процессе охлаждения (рис. 2). Отметим, что в сплаве Cu₃Pt₅ перестройка кубической решетки в ромбоэдрическую не происходит.



Рис. 2. Температурная зависимость средней конфигурационной энергии в объеме кристалла на атом в сплаве Cu₃Pt₅

Рассмотрим процесс охлаждения. Как видно из рис. 3, при $T \cong 2000$ К сплав полностью разупорядочен. Понижение температуры приводит к уменьшению значения энергии, что говорит о структурно-фазовых перестройках системы в более выгодные структурные состояния. В температурном диапазоне примерно от 1200 до 1000 К (рис. 2) происходит перестройка атомной структуры в соответствии со сверхструктурным типом Cu₃Pt₅. При понижении температуры наблюдается последовательность структурных состояний (рис. 3). Темным цветом на рис. 3 обозначены атомы Pt, светлым – Cu. При температурах ~ 2000 К сплав полностью разупорядочен, а при $T \cong 1200$ К заметны области, упорядоченные по типу сверхструктуры Cu₃Pt₅ при $T \cong 900$ К, сверхструктура сохраняется для более низких температур.



Рис. 3. Атомная структура сплава Cu₃Pt₅ в зависимости от температуры при охлаждении

В процессе нагрева видимых изменений в атомной структуре сплава до температуры ~ 600 К не наблюдается. Незначительные нарушения сверхструктурного порядка становятся заметными при $T \cong 700$ К. Повышение температуры примерно до 900 К приводит к нарушению структуры по всей области кристалла (рис. 4). Для температур выше ~ 1200 К сплав переходит в полностью разупорядоченное состояние.



Рис. 4. Атомная структура сплава Cu₃Pt₅ в зависимости от температуры при нагреве

С целью выяснения структурно-фазовых особенностей системы в области слабоустойчивых состояний на втором этапе исследования была предпринята попытка «термоциклирования» системы. Исследовалось изменение конфигурационной энергии в двух циклах: ступенчатого нагрева сплава от 200 до 1400 К и последующего ступенчатого охлаждения до начальной температуры. Шаг изменения температуры $\Delta T = 100$ К.

На рис. 5 приведены результаты расчетов конфигурационной энергии (а) и ближнего порядка [3] в ближайшем соседстве (δ) в циклах нагрев – охлаждение: кривая l – ступенчатый нагрев, а кривая 2 – охлаждение. Несложно видеть, что при температурах ниже ~ 1300 К термодинамически более выгодно частично упорядоченное состояние, а в процессе фазовых переходов порядок – беспорядок – порядок в слабоустойчивых состояниях системы при термоциклировании наблюдаются петли гистерезиса. Эти петли характеризуют скорость протекания фазовых переходов порядок – беспорядок и беспорядок – порядок в сплаве Cu₃Pt₅. Отсюда можно заключить, что при нагреве (кривая 1) и охлаждении (кривая 2) система проходит различные состояния, то есть процесс структурно-фазового превращения не обладает свойствами обратимости. По графикам видно, что существенные различия в структурно-энергетических характеристиках сплава при фазовых переходах порядок – беспорядок и беспорядок – порядок наблюдаются в температурном диапазоне примерно от 600 до 1400 К. Для температур ниже 600 К энергия стабильна и одинакова для начальной конфигурации сплава и конфигурации сплава после фазового перехода беспорядок – порядок. В процессе фазового перехода порядок – беспорядок резкое повышение значения конфигурационной энергии наблюдается в диапазоне примерно от 1000 до 1300 К. При охлаждении резкое понижение значения конфигурационной энергии наблюдается в диапазоне примерно от 1000 до 700 К. Температурный диапазон изменения параметра ближнего порядка согласуется с температурным диапазоном изменения конфигурационной энергии.



Рис. 5. Петля гистерезиса в изменении конфигурационной энергии (*a*) и ближнего порядка в ближайшем соседстве (δ) в циклах нагрев – охлаждение: кр. 1 – нагрев, кр. 2 – охлаждение

Зависимость параметра дальнего порядка при термоциклировании представлена на рис. 6, из которого видно, что при нагревании в процессе фазового перехода порядок – беспорядок не наблюдается понижения дальнего порядка до $T \cong 600$ К. При дальнейшем нагреве дальний порядок плавно понижается до температуры ~ 1100 К, резкий скачок происходит при $T \cong 1200$ К, в даль-



Рис. 6. Температурная зависимость параметра дальнего порядка в сплаве Cu₃Pt₅ в циклах нагрев – охлаждение: кр. *1* – нагрев, кр. *2* – охлаждение

нейшем дальний порядок стремится к нулю. При охлаждении во время фазового перехода беспорядок – порядок дальний порядок отсутствует до $T \cong 1000$ К. Резкое повышение значения параметра дальнего порядка наблюдается при повышении температуры примерно до 900 К, а при температурах ниже ~ 700 К значение дальнего порядка в сплаве стремится к единице.

На рис. 7 и 8 представлено изменение доменной структуры сплава Cu₃Pt₅ в процессе фазовых переходов порядок – беспорядок и беспорядок – порядок соответственно. В процессе фазового перехода порядок – беспорядок до $T \cong$ $\cong 500$ К сплав полностью упорядочен (рис. 7). Первые неупорядоченные области начинают появляться в температурном диапазоне примерно от 600 до 900 К. Повышение температуры примерно до 1000 К приводит к увеличению

количества и размера неупорядоченных областей. Неупорядоченные области равномерно распределены уже по всему кристаллу после нагрева примерно до 1100 К. При дальнейшем повышении температуры практически весь кристалл разупорядочен, наблюдаются мелкоразмерные домены и кластеры сверхструктурного типа Cu₃Pt₅. Для температур выше ~ 1300 К в сплаве остаются только зародыши доменов. При охлаждении (рис. 8) в процессе фазового перехода беспорядок – порядок для температур выше ~ 1100 К в сплаве наблюдаются только зародыши доменов. При понижении температуры примерно до 1000 К размеры доменов сверхструктурного типа Cu₃Pt₅ увеличиваются. Ступенчатое охлаждение примерно до 700 К приводит к постепенному уменьшению размеров и количества неупорядоченных областей. Примерно при 600 К практически весь кристалл перешел в упорядоченное состояние. Дальнейшее понижение температуры способствует исчезновению последних неупорядоченных областей.



Рис. 7. Картина распределения атомов по упорядоченным и неупорядоченным фазам в сплаве Cu_3Pt_5 в процессе фазового перехода порядок – беспорядок



Рис. 8. Картина распределения атомов по упорядоченным и неупорядоченным фазам в сплаве Cu₃Pt₅ в процессе фазового перехода беспорядок – порядок

Следовательно, фазовый переход порядок – беспорядок происходит при более высокой температуре, чем фазовый переход беспорядок – порядок.

Из приведенных на рис. 5 зависимостей можно ожидать наиболее ярко выраженных особенностей в атомной и доменной структурах в интервале температур ~ 600–1400 К. Особый интерес вызывают структурно-фазовые особенности системы в области слабоустойчивых ее состояний. На рис. 5 и 6 несложно видеть петли гистерезиса при термоциклировании: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния.

На рис. 7 и 8 приведены доменные структуры в зависимости от температуры в процессах нагрева и охлаждения. Отметим, что при низких (например, при $T \approx 200$ K) и высоких (например, при $T \approx 1400$ K) температурах атомная и доменная структуры достаточно хорошо определены, а при промежуточных температурах (в интервале температур ~ 700–1300 К) ситуация принципиально неопределенная. Особо следует выделить фазовый состав сплава Cu₃Pt₅ в зависимости от температуры в процессах нагрева и охлаждения в области слабоустойчивых состояний. На рис. 7 и 8 несложно видеть принципиальную разницу структурно-фазовых состояний в процессах нагрева и охлаждения.

При нагреве неупорядоченная фаза очень интенсивно появляется при температурах выше ~ 700 К и полностью заполняет всю систему при $T \approx 1300$ К, в то время как при охлаждении ситуация существенно иная. При охлаждении первые предвестники упорядоченной фазы появляются уже при $T \approx 900$ К, нарастая по объему в процессе охлаждения до $T \approx 600$ К. Для интервала слабоустойчивых состояний характерна сложная фазовая структура, которая свидетельствует об отсутствии термодинамических предпочтений тех или иных фаз или доменов. Эта сложная 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 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.

Таким образом, при термоциклировании для интервала слабоустойчивых состояний характерны не только петли гистерезиса: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. Происходит не только совмещение упорядочения и структурного превращения, но реализуются качественно различные пути превращения.

С целью выяснения влияния дефектов структуры на структурно-фазовые особенности системы в области слабоустойчивых состояний на втором этапе исследования была предпринята попытка исследовать влияние антифазных границ (АФГ) на структурно-энергетические характеристики системы. Отметим, что в сплаве Cu₃Pt₅ в направлении <100> возможно существование термической и сдвиговой антифазных границ (ТАФГ и САФГ). На рис. 9 представлено изменение средней конфигурационной энергии кристалла на атом в сплаве Cu₃Pt₅ в зависимости от начальной конфигурации кристалла в процессе ступенчатого нагрева примерно от 200 до 1400 К. Несложно видеть, что начальные значения конфигурационной энергии кристалла на атом зависят от наличия структурного дефекта и его типа. Естественно, что бездефектная система имеет наименьшую энергию, а со сдвиговой антифазной границей – наибольшую. Повышение температуры примерно до 900 К приводит к увеличению значения конфигурационной энергии. Температура ~ 1000 К является критической температурой сплава Cu₃Pt₅. При 1300 К для всех начальных конфигураций значения энергии системы на атом сплава одинаковы, т.е. система перешла в полностью разупорядоченное состояние.



Рис. 9. Зависимости от температуры изменения средней конфигурационной энергии кристалла на атом в сплаве Cu₃Pt₅: кр. 1 – без дефектов; кр. 2 – при наличии ТАФГ, кр. 3 – при наличии САФГ

Особо отметим интервал температур примерно от 1000 до 1300 К, в котором на основе наблюдаемых термодинамических особенностях сплава можно ожидать сосуществование спектра различных структурно-фазовых состояний с набором взаимодействующих в этом состоянии системы структурных дефектов (дефектов в традиционном понимании структуры сплава). В этом интервале термодинамически предпочтительна система с антифазными границами сдвигового типа. Это не удивительно, так как термическая АФГ имеет более высокую энергию образования. В то же время структурные состояния (в интервале температур 1000–1300 К) являются, как легко видеть из рис. 9, слабоустойчивыми относительно взаимопревращений либо возможно их сосуществования в одной системе в условиях конечных температур за счет энтропийного фактора. Эти состояния термодинамически близки, но симметрийно различны.

На рис. 10 представлено изменение в зависимости от температуры доменной структуры сплава Cu₃Pt₅ с парой сдвиговых АФГ в направлении <100> в процессе нагрева. Для системы со сдвиговой антифазной границей первые изменения начинаются примерно при 200 К. Небольшие области, упорядоченные в соответствии с изображенным на рис. 11 сверхструктурным типом, начинают появляться примерно при 400 К. С повышением температуры размеры этих областей увеличиваются. Повышение температуры до $T \cong 800$ К приводит к более выраженным изменениям структуры кристалла, неупорядоченные области равномерно распределены по всей системе. С ростом размеров неупорядоченных областей антифазные границы исчезают, остаются только небольшие домены. После повышения температуры примерно до 1200 К практически весь кристалл разупорядочен, остаются только мелкоразмерные домены.







Рис. 11. Сверхструктурный тип, наблюдающийся вблизи антифазных границ в сплаве Cu₃Pt₅

Рассмотрим изменение доменной структуры сплава с термическими АФГ (рис. 12). В системе с ТАФГ примерно при 200 К никаких структурных изменений не происходит. Небольшие неупо-



Рис. 12. Картины изменения доменной структуры сплава Cu₃Pt₅ с термическими АФГ в направлении <100> в процессе разупорядочения

рядоченные области вблизи границ начинают появляться примерно при 500 К. При температуре ~ 600 К появляются небольшие неупорядоченные области по всей системе, изменяется форма границ. Примерно при 800 К форма границ претерпевает существенные изменения, повышение температуры до $T \cong 900$ К приводит к более выраженным изменениям структуры (неупорядоченные

области равномерно распределены по всему кристаллу). С ростом размеров неупорядоченных областей антифазные границы исчезают, остаются только небольшие домены. После повышения температуры примерно до 1100 К практически весь кристалл разупорядочен, остаются только мелкоразмерные домены.

Методом Монте-Карло получена необратимость процессов структурно-фазовых превращений при термоциклировании на фоне совмещения в системе атомного упорядочения и структурных перестроек. Существенно, что эти особенности наиболее ярко проявляются в области слабоустойчивых состояний системы. Дефекты структуры, например антифазные границы, в этом случае оказывают существенное влияние на структурно-фазовое состояние всей системы. Структурные дефекты, таким образом, задают в таком слабоустойчивом состоянии системы канал перехода.

Заключение

В сплаве Cu₃Pt₅ при переходе порядок – беспорядок наблюдается сложное структурно-фазовое превращение, которое совмещает атомное упорядочение и структурное превращение.

При охлаждении сплава на кривой зависимости конфигурационной энергии от температуры наблюдаются горизонтальные участки, которые соответствуют разным структурным состояниям системы, причем разница между их энергиями очень мала. Это свидетельствует о слабой устойчивости этих состояний системы относительно структурно-фазовых взаимопревращений. Дефекты структуры, например антифазные границы, в этом случае оказывают существенное влияние на структурно-фазовое состояние всей системы. Структурные дефекты, таким образом, задают в таком слабоустойчивом состоянии системы канал перехода.

При термоциклировании на зависимости конфигурационной энергии на атом системы от температуры в районе перехода порядок – беспорядок в слабоустойчивом состоянии системы наблюдаются петли гистерезиса. Отсюда можно заключить, что при нагреве и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния, то есть процесс структурнофазового превращения не обладает свойствами обратимости.

При низких и высоких температурах атомная и фазовая структуры достаточно хорошо определены, а при промежуточных температурах ситуация принципиально неопределенная. При термоциклировании выделяются особенности фазовой структуры в области слабоустойчивых состояний: принципиальная разница структурно-фазовых состояний в процессах нагрева и охлаждения. При нагреве неупорядоченная фаза очень интенсивно появляется вблизи температур фазового превращения порядок – беспорядок и при дальнейшем нагреве происходит увеличение доли неупорядоченной фазы. При охлаждении ситуация существенно усложняется: первые предвестники упорядоченной фазы появляются уже при высоких температурах, нарастая по объему в процессе охлаждения.

Для интервала слабоустойчивых состояний характерна сложная фазовая структура, которая свидетельствует об отсутствии термодинамических предпочтений тех или иных фаз или доменов. Эта сложная структура свидетельствует именно о термодинамически слабо определенном структурном состоянии системы, при котором разные структурные составляющие системы могут отличаться в смысле симметрии. Таким образом, при термоциклировании для интервала слабоустойчивых состояний характерны не только петли гистерезиса: при нагревании и охлаждении система проходит различающиеся между собой структурно-фазовые состояния. Происходит не только совмещение упорядочения и структурного превращения, но реализуются качественно различные пути превращения.

Таким образом, методом Монте-Карло получена необратимость процессов структурнофазовых 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. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: пер. с англ. / под ред. С.А. Ахманова. М.: Наука, 1990. 176 с.
- 5. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38. № 6. С. 3–21.

- 6. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. 1996. Т. 39. № 6. С. 22–40.
- 7. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. – № 4. – С. 11–18.
- 8. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55. – № 7. – С. 78–87.
- 9. Потекаев А.И., Кулагина В.В., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55. – № 11. – С. 7–16.
- 10. 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.
- 11. 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.
- 12. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. Слабоустойчивые предпереходные структуры в никелиде титана / под ред. А.И. Потекаева. Томск: Изд-во НТЛ, 2004. 296 с.
- 13. ПотекаевА.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. 2008. Т. 51. № 11/3. С. 148–150.
- 14. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. 2009. Т. 52. № 8/2. С. 456–459.
- 15. Кулагина В.В., Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Еремеев С.В. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т. 8. № 3. –С. 20–28.
- 16. Горлов Н.В. Моделирование на ЭВМ плоских дефектов в упорядоченных сплавах типа A_3B : дис. ... к.ф.-м.н. Томск: ТГУ, 1987. 214 с.
- 17. Бакалдин А.В. Планарные дефекты в сверхструктуре L1₁: дис. ... к.ф.-м.н. Барнаул: АлтГТУ им. И.И. Ползунова, 1994. 177 с.
- Клопотов А.А., Потекаев А.И., Козлов Э.В., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. 2011. – Т. 54. – № 9. – С. 53–59.
- 19. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Кулагина В.В., Гюнтер В.Э. // Изв. вузов. Черная металлургия. 2010. № 10. С. 61–67.
- 20. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика.. 2013. Т. 56. № 1/2. С. 202–212.
- 21. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. № 8. С. 5–23.
- 22. Клопотов А.А., Потекаев А.И., Козлов Э.В., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 1/2. С. 213–223.
- 23. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. 2010. Т. 53. – № 8. – С. 38–47.
- 24. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Маркидонов А.В. и др. // Изв. вузов. Физика. 2009. Т. 52. № 9/2. С. 139–144.
- 25. Клопотов В.Д., Клопотов А.А., Потекаев А.И. и др. // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 1/2. С. 224–228.
- 26. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. – № 2. – С. 41–48.
- 27. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Синица Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. – № 3. – С. 42–47.
- 28. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др.// Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 8. № 3. С. 367–374.
- 29. Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Потекаев А.И. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т. 8. № 4.– С. 503–509.

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

Поступила в редакцию 21.03.13.

**Национальный исследовательский Томский государственный университет,

г. Томск, Россия

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

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

*****Томский государственный архитектурно-строительный университет,

г. Томск, Россия

E-mail: potekaev@spti.tsu.ru

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

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

Чаплыгина Александра Александровна, аспирантка;

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

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