ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
Т. 60, № 9 ФИЗИКА 2017

УДК 539.12

А.И. ПОТЕКАЕВ[1,2], А.А. ЧАПЛЫГИНА[3], П.А. ЧАПЛЫГИН[3], М.Д. СТАРОСТЕНКОВ[3], В.В. КУЛАГИНА[2,4], И.Д. ТАЗИН[4]

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ СЛАБОУСТОЙЧИВЫЕ СОСТОЯНИЯ ОЦК-СПЛАВОВ С КОМПЛЕКСАМИ АФГ В ПРОЦЕССЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПОРЯДОК – БЕСПОРЯДОК

С помощью метода Монте-Карло на примере сплава CuZn рассмотрено влияние комплексов АФГ (пары сдвиговых АФГ в направлении <110> и пары термических АФГ в направлении <100>) на слабоустойчивые состояния β-латуни в процессе фазового перехода порядок – беспорядок. Показано, что энергия образования комплекса термических АФГ выше, чем энергия образования комплекса сдвиговых АФГ. Вклад АФГ в процесс разупорядочения существен до температуры фазового перехода порядок – беспорядок. Наиболее значимым для дальнего порядка в системе является само появление дефекта в виде АФГ, различие в типе АФГ и плоскости их залегания не столь существенно сказывается на поведении дальнего порядка с изменением температуры. Тип антифазных границ оказывает значительное влияние на структурно-энергетические характеристики системы при температурах ниже температуры фазового перехода. Естественно, что система со структурными дефектами менее упорядочена по сравнению с бездефектной. Наличие дефекта в виде АФГ способствует началу разупорядочения системы при более низких температурах: понижение порядка в сплаве начинается в случае ТАФГ при более низкой температуре по сравнению со случаем сдвиговых АФГ. В сплаве с комплексом термических АФГ в направлении <100> первые нарушения структурного порядка в сплаве CuZn всегда появляются вблизи границы Zn–Zn. В сплаве с комплексом сдвиговых АФГ в направлении <110> нарушения структурного порядка при низких температурах наблюдаются только в областях пересечения границ. Наличие антифазных границ влияет на стабильность сплава при нагревании. Сплав CuZn без нарушений структурных дефектов более стабилен, чем сплав с АФГ. Показано, что процесс разупорядочения сопровождается размытием границ и их фасетированием.

Ключевые слова: *сплав, фазовый переход порядок – беспорядок, β-латунь, структурные дефекты, CuZn.*

Введение

Медь и ее сплавы традиционно широко используются благодаря сочетанию высоких механических и технологических свойств. Латуни обладают по сравнению с медью более высокой прочностью, коррозионной стойкостью, лучшими литейными свойствами, имеют более высокую температуру рекристаллизации. Медь с цинком образуют как α-твердые растворы на основе меди, так и ряд промежуточных фаз β, γ и др. Фаза β – это твердый раствор с ОЦК-решеткой на основе соединения CuZn (фаза Юм – Розери). При охлаждении β-фаза при температуре ~ 450 °С переходит в упорядоченное состояние (β→β′), причем β′-фаза является более твердой и хрупкой по сравнению с β-фазой. Фаза γ – твердый раствор с решеткой ОЦК на основе соединения Cu_5Zn_8, которая отличается очень высокой хрупкостью, поэтому ее присутствие в промышленных сплавах не желательно. Естественно, что механические свойства латуни определяются свойствами фаз, причем по мере увеличения содержания цинка их прочность возрастает. Максимум прочности достигается в двухфазной области (α + β) при содержании цинка около 45 %, поэтому применяют преимущественно α- и (α+β)-латуни.

Свойства сплавов связано со структурно-фазовым состоянием материалов, в конечном счете свойствами и структурой фаз, составляющих сплав. Исследование свойств и структурно-фазового состояния материалов экспериментальными методами не только трудоемко, но часто и механизмы происходящих физико-химических процессов вскрыть бывает очень непросто. Ситуация усложняется при термосиловом нагружении. Поэтому систематические исследования структурно-фазовых состояний металлических систем методами компьютерного моделирования привлекают пристальное внимание, так как удается вскрывать происходящие в системе физико-химические процессы и явления [1–3]. Например, ранее были рассмотрены особенности слабоустойчивых структурно-фазовых состояний в ГЦК-системах Cu–Pt, в ОЦК-системе на примере системы Ni–Al [4–16].

Цель данной работы – исследовать с помощью метода Монте-Карло влияние комплексов антифазных границ в направлениях <100> (пара термических АФГ) и <110> (пара сдвиговых АФГ) на особенности слабоустойчивых структурно-фазовых состояний и энергетические характеристики β-латуни (на примере сплава CuZn) в процессе фазового перехода порядок – беспорядок.

Применяемые приближения и используемая модель

Исследуем особенности слабоустойчивых структурно-фазовых состояний и энергетические характеристики сплава CuZn в процессе структурно-фазового превращения порядок – беспорядок в зависимости от типа антифазных границ: термических (ТАФГ) в направлениях <100> и сдвиговых (САФГ) в направлениях <110>.

Рассмотрим упорядоченную ОЦК-структуру со сверхструктурой $B2$ (сплав CuZn) (рис. 1). Пусть модель (расчетный блок) включает 32×32×32 элементарных ячеек (65536 атомов), при этом применяются периодические граничные условия, что эффективно соответствует бесконечной системе с длинным периодом.

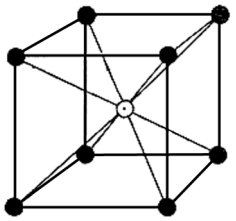


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхструктуры $B2$

Взаимодействие между парами атомов компонент сплава зададим с помощью полуэмпирического парного потенциала Морзе в виде

$$\varphi(r_{ij}) = D_{KL}\beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r_{ij}}\left(\beta_{KL}e^{-\alpha_{KL}r_{ij}} - 2\right),$$

где $\alpha_{KL}, \beta_{KL}, D_{KL}$ – параметры потенциалов, описывающих связи пар атомов сортов K–L; r_{ij} – расстояние между атомами. Конфигурационную энергию системы рассчитаем как $E = 1/2\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M}\varphi\left(r_i - r_j\right)$, где $r_i - r_j$ – радиус-векторы атомов i и j; N – количество атомов в системе; M – количество соседей, в которое включены атомы трех координационных сфер взаимодействия.

Энергию образования антифазной границы будем находить как

$$E^* = \frac{E_{\text{АФГ}} - E}{S},$$

где E – конфигурационная энергия идеального бездефектного сплава; $E_{\text{АФГ}}$ – конфигурационная энергия системы с АФГ; S – площадь АФГ.

Исследуем изменение слабоустойчивых структурно-фазовых состояний и конфигурационных энергий β-латуни в процессе фазового перехода порядок – беспорядок, параметров ближнего и дальнего порядка для трех модельных конфигураций сплава CuZn: без АФГ, с комплексом сдвиговых АФГ в направлении <110> и с комплексом термических АФГ в направлении <100>. Комплексы будем строить из пары антифазных границ соответствующего направления с учетом сохранения стехиометрии.

Вначале рассмотрим бездефектную систему (бездефектный модельный сплав CuZn) в процессе фазового перехода порядок – беспорядок. В дальнейшем эта бездефектная система будет выступать в качестве исходного состояния.

Рассматриваются термические антифазные границы (ТАФГ), нормальные к направлению <100>. В этом направлении в сверхструктуре $B2$ чередуются плоскости узлов, законных для атомов Cu и Zn (рис. 1). Термические антифазные границы задаются вычитанием плоскостей атомов Cu или Zn. Вычитая плоскость атомов Cu, получаем термическую антифазную границу и пары ближайших соседей Zn–Zn (в дальнейшем будем называть такую ТАФГ границей типа Zn–Zn). Вычитая плоскость атомов Zn, получаем термическую антифазную границу и пары ближайших соседей Cu–Cu (в дальнейшем будем называть такую ТАФГ границей типа Cu–Cu). Граница типа Zn–Zn и граница типа Cu–Cu составляют дуальный комплекс, в котором термические антифазные границы разнесены на некоторое расстояние. Заметим, что при введении такого дуального комплекса эквиатомный состав системы не изменяется. На приводимых изображениях структурно-фазового состояния системы граница типа Zn–Zn будет располагаться справа, а граница типа Cu–Cu – слева.

Обращаем внимание на изменения слабоустойчивого структурно-фазового состояния системы в результате действия вакансионного механизма диффузии в процессе фазового перехода порядок – беспорядок в системе с парой ТАФГ (дуальный комплекс), разделенных восемью элементарными ячейками в направлении <100>.

В направлении <110> в сверхструктуре $B2$ возможно существование только сдвиговых АФГ. Для сохранения стехиометрии состава границы вносятся под углом 90° в плоскостях, проходящих

через центр расчетного блока. Поэтому в центральной части и по границам расчетного блока имеем области пересечения сдвиговых границ. Пересечение границ – это моноатомный столбик размером в одну элементарную ячейку.

Для расчетов используем алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло. Для активизации процесса диффузии в систему случайным образом вводится одна вакансия, что соответствует концентрации $\sim 1.81 \cdot 10^{-5}$. Используем только вакансионный механизм диффузии. Динамическая или кинетическая составляющая присутствуют только в перескоках атомов в вакантные узлы. Будем полагать, что состояние системы может изменяться только в дискретные моменты времени с шагом Δt. В данной работе не осуществляется переход к реальному времени, поэтому продолжительность каждого эксперимента определяется в условных единицах времени, равных числу перескоков атомов на место вакантных узлов, т.е. $\Delta t = 1$ соответствовало одной итерации. На каждой итерации рассчитывается вероятность перескока ближайшего к вакантному узлу атома i, находящегося от него на расстоянии до трех координационных сфер, на место этой вакансии:

$$p_i = A^{-1} e^{-\frac{E_{\max} - \left(E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i\right)}{kT}},$$

где $E_{\text{н}}^i$ – энергия i-го атома в начальном положении; $E_{\text{к}}^i$ – энергия i-го атома после перескока на место вакансии; A – константа нормировки; $E_{\max}$ – максимальная разность начальной и конечной энергий атомов: $E_{\max} = \max\limits_{0 \le i \le M} \left(E_{\text{н}}^i - E_{\text{к}}^i\right)$. Для определения константы нормировки A строилось разбиение отрезка $[0;1]$: $0 = A_0 < A_1 < A_2 < A_3 < \ldots < A_{M-1} < A_M = 1$ так, чтобы $\left|A_i - A_{i-1}\right| = p_i$. Затем при помощи генератора случайных чисел выбиралось число $B \in [0;1]$ и определялся отрезок разбиения, которому это число принадлежало, т.е. находился атом с индексом j из условия $A_{j-1} \le B < A_j$.

Для каждой температуры выполнялось 10^6 итераций, причем шаг изменения температуры составлял 100 К.

При исследовании особое внимание уделяется изменениям конфигурационной энергии и параметров ближнего и дальнего порядка, а также структурно-фазовым слабоустойчивым состояниям в процессе превращения порядок – беспорядок.

Параметр ближнего порядка на i-й сфере определим в приближении Каули [17]:

$$\sigma_i^{AB} = 1 - \frac{P_i^{AB}}{C_B},$$

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 (усредненный по системе) рассчитаем в приближении Горского – Брэгга – Вильямса [18]:

$$\eta = \frac{P_A^{(1)} - C_A}{1 - \nu},$$

где $P_A^{(1)}$ – вероятность заполнения атомами компоненты A узлов первого типа; C_A – концентрация атомов компоненты A в сплаве; ν – концентрация узлов первого типа.

Для вычисления вероятности $P_A^{(1)}$ определим количество атомов сорта A, у которых соседи на первой сфере соответствуют первому и второму типу доменов (частей системы, находящихся по разные стороны от антифазной границы). Соответственно узлами первого типа считаются все узлы, законные для атомов сорта A, в зависимости от типа домена:

$$P_A^{(1)} = \frac{N' + N''}{N_1},$$

где N_1 – количество узлов первого типа; N' – количество атомов сорта A в узлах подрешетки первого типа; N'' – количество атомов сорта A, находящихся в узлах другой подрешетки и упорядоченных в соответствии с доменом второго типа на первой сфере.

Результаты и их обсуждение

При описании межатомного взаимодействия используем параметры потенциалов Морзе, приведенные в таблице. Значения потенциалов были протабулированы как изменения энергии в зависимости от межатомных расстояний.

Исследование проведем в следующей последовательности: рассмотрим структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики бездефектного сплава CuZn, сплава с комплексом антифазных границ в направлении <100> (пара термических АФГ) и с комплексом антифазных границ в направлении <110> (пара сдвиговых АФГ). Проведя сравнительный анализ, выявим структурно-фазовые и энергетические особенности слабоустойчивых состояний сплава CuZn (β-латуни) в процессе фазового перехода порядок – беспорядок.

Параметры потенциала Морзе сплава CuZn

Тип взаимодействия	α, Å^{-1}	β	*D*, эВ
Cu–Cu	1.495109	41.598	0.3736
Cu–Zn	1.447832	35.607	0.322
Zn–Zn	1.71223	81.104	0.2189

Рассмотрим сплав CuZn в бездефектном структурном состоянии и в состояниях с комплексами ТАФГ и САФГ. Зависимость средней конфигурационной энергии от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок приведена на рис. 2. Несложно видеть, что во всем интервале температур энергии состояний сплава с антифазными границами выше, чем бездефектного. Причем значения средней конфигурационной энергии сплава с комплексом термических АФГ в направлении <100> значительно выше соответствующих значений сплава со сдвиговыми АФГ в направлении <110>. Отметим, что система с ТАФГ в направлении <100> в интервале температур ~ 300–600 К испытывает понижение конфигурационной энергии, что свидетельствует об изменении структуры на энергетически более выгодную. Дальнейшее повышение температуры (выше ~ 600 К) во всех рассматриваемых случаях приводит к плавному повышению значения конфигурационной энергии системы. При ~ 1000 К все рассматриваемые конфигурационные варианты сплава имеют одинаковые значения энергии, так как система переходит в полностью разупорядоченное состояние. Следует подчеркнуть, что в области фазового перехода порядок – беспорядок система находится в слабоустойчивом состоянии, что легко видеть из температурных зависимостей энергии различных конфигурационных вариантов сплава (рис. 2). Различные структурно-фазовые состояния системы очень мало различаются по конфигурационной энергии, а малые внешние воздействия могут легко переводить систему из одного состояния в другое.

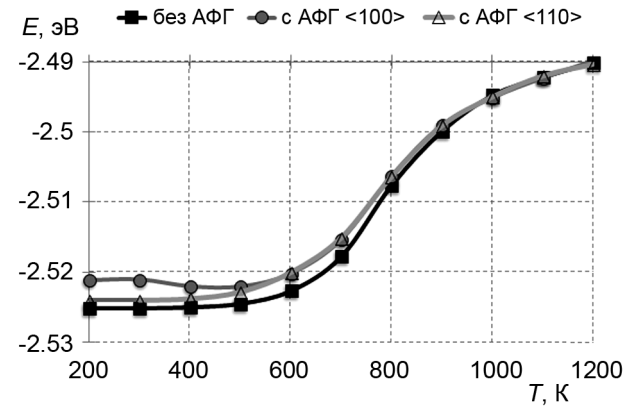


Рис. 2. Зависимости изменения средней конфигурационной энергии сплава CuZn от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок

Средняя конфигурационная энергия сплава с комплексом ТАФГ в направлении <100> при низких температурах (до 300 К) не изменяется, но наблюдается незначительное изменение разности энергий состояний сплава с комплексами ТАФГ и САФГ. В диапазоне от 400 до 500 К наблюдается уменьшение значения разности энергий, что говорит о влиянии АФГ на структурно-

энергетические характеристики сплава при нагреве. Средняя конфигурационная энергия сплава с комплексом САФГ в области низких температур также сохраняет свое значение. Однако в температурном диапазоне от 400 до 600 К наблюдается увеличение значения разности энергий. Это наглядно демонстрирует разницу влияния различных комплексов на среднюю конфигурационную энергию модельного сплава. В окрестности температуры 700 К наблюдается «ступенька» на графике зависимости средней конфигурационной энергии сплава от температуры. Для более высоких температур значение разности энергий постепенно уменьшается и стремится к нулю. После температуры 800 К, т.е. после фазового перехода порядок – беспорядок, значение разности энергий близко к нулю. Данная зависимость наглядно демонстрирует, что антифазные границы оказывают существенное влияние на значение конфигурационной энергии сплава CuZn вплоть до температуры фазового перехода.

В модельный сплав вносится пара ТАФГ в направлении <100> или пара САФГ в направлении <110>, причем с учетом сохранения стехиометрии. Энергии образования для каждого комплекса в полностью упорядоченном состоянии сплава составили: границы типа Cu–Cu – 0.0189 эВ/Å^2, а границы типа Zn–Zn – 0.0365 эВ/Å^2. Соответственно в полностью упорядоченном состоянии системы энергия комплекса ТАФГ в направлении <100> составляет 0.0176 эВ/Å^2. Энергия комплекса САФГ в направлении <110> соответственно 0.0036 эВ/Å^2. Знак связан с выражением введения энергии АФГ (E^*), но АФГ приводит, естественно, к повышению энергии сплава.

Температурные зависимости энергии комплекса ТАФГ в направлении <100> и энергия комплекса САФГ в направлении <110> приведены на рис. 3. Энергия комплекса ТАФГ в направлении <100> выше энергии комплекса САФГ в направлении <110>, что и естественно. Интерес представляет температурный интервал 600–900 К, в котором, как можно ожидать из температурных зависимостей конфигурационной энергии различных структурных состояний (рис. 2), и происходят структурно-фазовые превращения. Этот же температурный интервал представляет интерес из-за поведения зависимостей энергий комплексов АФГ (рис. 3), в котором происходит существенное

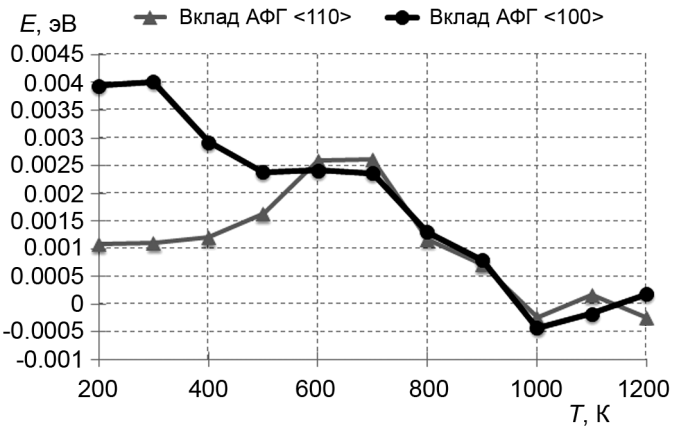


Рис. 3. Вклад комплексов АФГ в среднюю конфигурационную энергию сплава с ростом температуры

изменение: энергия комплекса ТАФГ в направлении <100> становится меньше энергии комплекса САФГ в направлении <110>. Эта особенность нетрадиционна, обычно энергия комплекса ТАФГ больше энергии комплекса САФГ. Как можно полагать, такая инверсия связана с тем, что размытие САФГ идет через упорядочение к сверхструктуре *B*2, что пусть и незначительно, но замедляет общий процесс разупорядочения при повышении температуры. Обратим внимание на состояние системы при T = 1000 К, при которой появление комплексов антифазных границ приводит к понижению энергии системы, что следует из отрицательных значений энергии как САФГ, так и ТАФГ (см. рис. 3). Объяснить это можно следующим. При 1000 К АФГ полностью исчезают, соответственно на разницу энергий уже влияет не исходное состояние системы, а случайные обусловленные работой алгоритма Метрополиса процессы. Понятно, что в области более высоких температур система находится в разупорядоченном состоянии, поэтому кривые зависимостей совпадают. В области высоких температур наблюдается очень маленькое расхождение кривых. Это

может быть связано с тем, что в области высоких температур возможно образование мелкоразмерных доменов разных фаз, что оказывает незначительный вклад в разницу энергий.

Поведение параметра ближнего порядка (рис. 4, *а*) свидетельствует о тенденции сплава к упорядочению, однако при повышении температуры ближний порядок понижается. Изменения параметра ближнего порядка для всех рассматриваемых конфигурационных вариантов сплава (рис. 4, *а*) согласуются с изменениями конфигурационной энергии (рис. 2).

Интерес представляет температурная зависимость параметра дальнего порядка в процессе фазового перехода порядок – беспорядок (рис. 4, *б*).

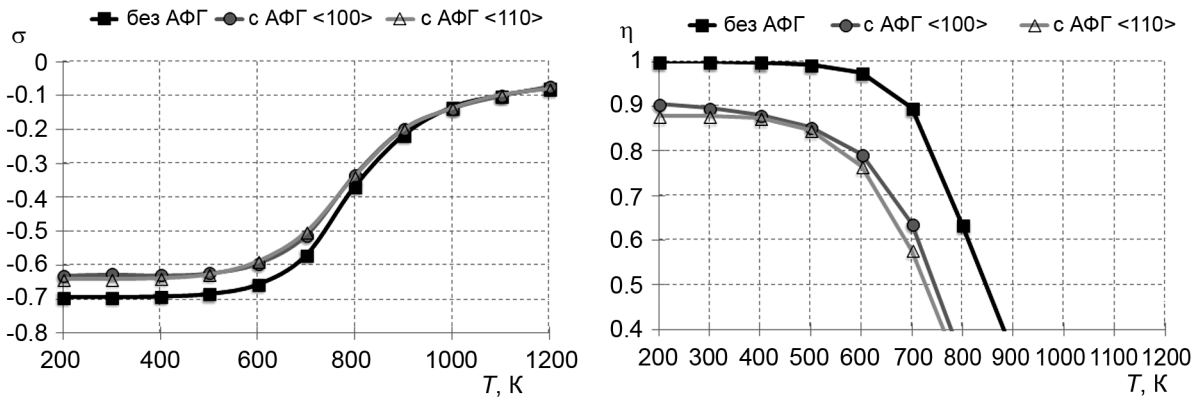


Рис. 4. Температурная зависимость параметров ближнего (*а*) и дальнего (*б*) порядка

Несложно видеть, что в бездефектной системе (бездефектный модельный сплав CuZn) до $T = 500$ К не наблюдается нарушений дальнего порядка (η), а в интервале температур ~ 500–700 К его значение плавно понижается. Резкое снижение наблюдается в интервале $T \approx 700$–900 К, при стремлении значения η к нулю, что свидетельствует о существенном разупорядочении в системе. Появление в сплаве АФГ приводит к естественному результату – понижению дальнего порядка в системе в процессе фазового перехода порядок – беспорядок при обоих типах АФГ (рис. 4, *б*). Обратим внимание на то, что положительные значения энергии комплекса термических АФГ в направлении <100> больше значений энергии комплекса сдвиговых АФГ в направлении <110>. Отклонения значений параметра ближнего порядка от идеального значения (отрицательное значение параметра ближнего порядка свидетельствует о стремлении к упорядочению) у сплава с комплексом термических АФГ тоже больше отклонений параметра ближнего порядка сдвиговых АФГ. В то же время отклонения значений параметра η системы с комплексом термических АФГ меньше отклонений значений η системы с комплексом сдвиговых АФГ. Фактически, наблюдается некоторая инверсия зависимости. Можно полагать, что это связано с тем, что уже при низких температурах области пересечения границ в сплаве с комплексом сдвиговых АФГ переходят в упорядоченное состояние, что, безусловно, сказывается на дальнем порядке. Наиболее значимым для дальнего порядка в системе является само появление структурного дефекта в виде АФГ, различие в плоскости их залегания не столь существенно сказывается на поведении η с изменением температуры. Естественно, что система со структурными дефектами менее упорядочена по сравнению с бездефектной, что и проявляется в поведении кривых зависимостей $\eta = f(T)$: кривая бездефектного сплава лежит выше кривых сплава с АФГ. Наличие дефекта в виде АФГ способствует началу процесса разупорядочения системы при более низких температурах: понижение порядка в сплаве начинается уже при $T = 300$ К в случае ТАФГ в направлении <100> и при 400 К в случае САФГ в направлении <110>. В температурном диапазоне от 400 до 700 К наблюдается стабильное уменьшение значения параметра дальнего порядка. При дальнейшем повышении температуры дальний порядок стремится к нулю, что говорит о переходе сплава в разупорядоченное состояние. Температурный диапазон изменения дальнего порядка в сплавах согласуется с диапазоном изменения конфигурационной энергии.

Большой интерес представляют изменения атомной и доменной структуры сплава с комплексом АФГ при повышении температуры системы. Вначале рассмотрим изменения атомной и доменной структуры сплава с комплексом термических АФГ в направлении <100> в зависимости от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок. Потом проведем точно такое же

рассмотрение изменения атомной и доменной структуры сплавов с комплексом сдвиговых АФГ в направлении <110> в зависимости от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок. Далее проанализируем влияние типа АФГ и плоскости залегания АФГ на структурно-фазовые особенности сплава в зависимости от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок.

Рассмотрим изменение атомной и доменной структуры сплава с комплексом термических АФГ в направлении <100> в зависимости от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок, которое представлено на рис. 5 и 6 соответственно. Нетрудно видеть, что уже при низких температурах (~ 200 К) на границе Zn–Zn происходят значительные нарушения структурного порядка, которые увеличиваются с ростом температуры. На границе Cu–Cu первые неупорядоченные области появляются при более высокой температуре (~ 300 К). В диапазоне температур 400–500 К наблюдается фасетирование и размытие границ. При 500–600 К начинают появляться неупорядоченные области по всей системе, форма и размер границ меняются. Дальнейшее повышение температуры приводит к изменению формы антифазных границ от плоской к объемной (размытой), т.е. граница становится более сглаженной в смысле изменения порядка в области антифазной границы ($T \approx 700$ К). Неупорядоченные области продолжают увеличиваться по всей системе при дальнейшем росте температуры, а антифазные границы исчезают ($T \approx 800$ К). При более высоких температурах практически весь сплав разупорядочен, остаются только мелкоразмерные домены. Следует отметить, что диапазон изменения атомной и доменной структуры системы и слабоустойчивых состояний сплава соответствует диапазонам изменения конфигурационной энергии сплава с ТАФГ (см. рис. 2) и вклада АФГ в энергию сплава (см. рис. 3).

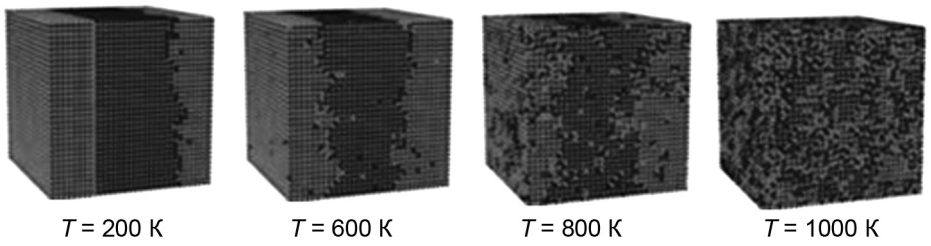


Рис. 5. Изменения атомной структуры сплава с термическими АФГ в процессе разупорядочения

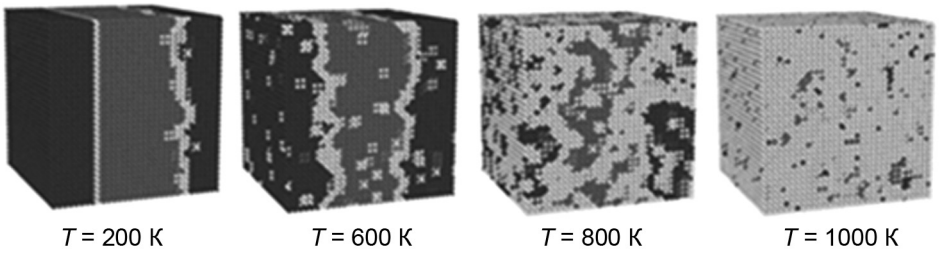


Рис. 6. Изменения доменной структуры сплава с термическими АФГ в процессе разупорядочения

Рассмотрим изменение атомной и доменной структуры сплава с комплексом сдвиговых АФГ в направлении <110> в зависимости от температуры в процессе фазового перехода порядок – беспорядок, которое представлено на рис. 7 и 8 соответственно. В этом случае нарушения структурного порядка при низких температурах (200–300 К) наблюдаются в областях пересечения антифазных границ. С повышением температуры (~ 400 К) первые неупорядоченные области появляются по всей системе, изменений в области антифазных границ не происходит. В диапазоне 500–600 К наблюдаются фасетирование и размытие границ, количество и размер неупорядоченных областей увеличивается с ростом температуры. Области пересечения границ стремятся к переходу в упорядоченное состояние. В области пересечения границ образуется дефект упаковки (моноатомный столбик одного из компонентов сплава размером в одну элементарную ячейку), который не соответствует простой сдвиговой границе, следовательно, и его поведение отличается от поведе-

ния самих САФГ. Эти отличия и провоцируют начальную перестройку в упорядоченное состояние, в то время как сами САФГ остаются стабильными.

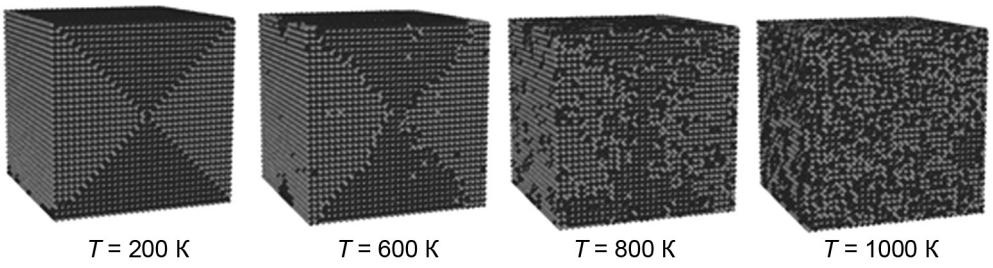


Рис. 7. Изменения атомной структуры сплава со сдвиговыми АФГ в процессе разупорядочения

При $T \approx 700$ К влияние АФГ ещё заметно, но оно становится менее выраженным. Естественно, что при температурах выше температуры фазового перехода порядок – беспорядок антифазные границы исчезают, система разупорядочена, наблюдаются только мелкоразмерные домены. Картина аналогична наблюдаемой в бездефектном сплаве и сплаве с комплексом термических АФГ в направлении <100>. Отметим, что диапазон изменения атомной и доменной структуры сплава соответствует диапазонам изменения конфигурационной энергии сплава (см. рис. 2) и вклада АФГ в энергию системы (см. рис. 3).

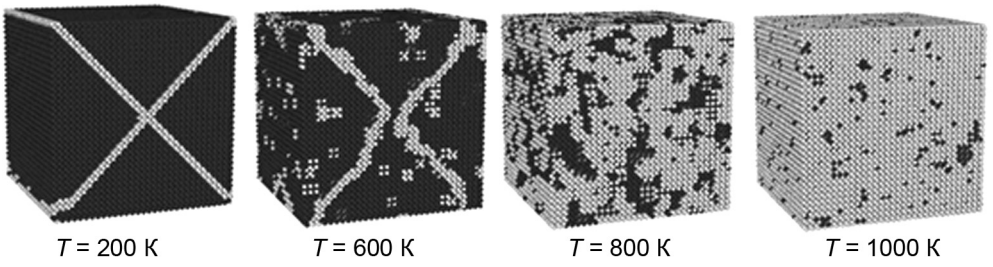


Рис. 8. Изменения доменной структуры сплава со сдвиговыми АФГ в процессе разупорядочения

Заключение

Анализ влияния комплексов антифазных границ в направлениях <100> (пара термических АФГ) и <110> (пара сдвиговых АФГ) на слабоустойчивые структурно-фазовые состояния β-латуни (на примере сплава CuZn) в процессе фазового перехода порядок – беспорядок показал, что тип антифазных границ оказывает существенное влияние на структурно-энергетическое состояние всей системы.

Наиболее значимым для дальнего порядка в системе является само появление структурного дефекта в виде АФГ, различие в плоскости их залегания не столь существенно сказывается на поведении дальнего порядка с изменением температуры. Естественно, что система со структурными дефектами менее упорядочена по сравнению с бездефектной, что и проявляется в поведении кривых зависимостей $\eta = f(T)$: кривая бездефектного сплава лежит выше кривых сплава с АФГ. Наличие дефекта в виде АФГ способствует началу процесса разупорядочения системы при более низких температурах: понижение порядка в сплаве начинается в случае ТАФГ в направлении <100> при более низкой температуре по сравнению со случаем САФГ в направлении <110>.

В сплаве с комплексом термических АФГ в направлении <100> первые нарушения структурного порядка в сплаве CuZn всегда появляются вблизи границы Zn–Zn. В сплаве с комплексом сдвиговых АФГ в направлении <110> нарушения структурного порядка при низких температурах наблюдаются только в областях пересечения границ. Наличие антифазных границ влияет на стабильность сплава при нагревании. Сплав CuZn без нарушений структурных дефектов более стабилен, чем сплав с АФГ. Показано, что процесс разупорядочения сопровождается размытием границ и их фасетированием. Вклад АФГ в процесс разупорядочения существен до температуры фазового перехода порядок – беспорядок, что согласуется с проведенными ранее исследованиями [1–16].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Кулагина В.В. Влияние точечных и планарных дефектов на структурно-фазовые превращения в предпереходной слабоустойчивой области металлических систем / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2014. – 488 с.
2. Конева Н.А., Тришкина Л.И., Потекаев А.И., Козлов Э.В. Структурно-фазовые превращения в слабоустойчивых состояниях металлических систем при термосиловом взаимодействии / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2015. – 344 с.
3. Кулагина В.В., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 11/3. – С. 369–376.
4. Чаплыгин П.А., Потекаев А.И., Чаплыгина А.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 4. – С. 52–57.
5. Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А., Старостенков М.Д. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13. – № 3. – С. 403–407.
6. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 5. – С. 3–8.
7. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 7. – С. 78–87.
8. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 11. – С. 7–16.
9. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – № 6. – С. 14–22.
10. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2011. – Т. 54. – № 9. – С. 59–69.
11. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Кулагина В.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2017. – Т. 60. – № 2. – С. 16–26.
12. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Тришкина Л.И. и др. // Изв. РАН. Сер. физич. – 2016. – Т. 80. – № 11. – С. 1576–1578.
13. Чаплыгина А.А., Потекаев А.И., Чаплыгин П.А. и др. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2016. – Т. 13. – № 2. – С. 155–161.
14. Чаплыгина А.А., Потекаев А.И., Чаплыгин П.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2016. – Т. 59. – № 10. – С. 13–22.
15. Полетаев Г.М., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2015. – Т. 58. – № 1. – С. 38–43.
16. Потекаев А.И., Морозов М.М., Клопотов А.А. и др. // Изв. вузов. Черная металлургия. – 2015. – Т. 58. – № 8. – С. 589–596.
17. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. – М.: Наука, 1977. – 253 с.
18. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теории упорядочивающихся сплавов. – М.: Физматгиз, 1958. – 388 с.

[1] Национальный исследовательский Томский государственный университет, г. Томск, Россия
[2] Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова Томского государственного университета, г. Томск, Россия
[3] Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, Россия
[4] Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 22.06.17.

Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, профессор НИ ТГУ, директор СФТИ ТГУ, e-mail: kanc@spti.tsu.ru;
Чаплыгина Александра Александровна, к.ф.-м.н., докторант, e-mail:genphys@mail.ru;
Чаплыгин Павел Александрович, аспирант, e-mail:genphys@mail.ru;
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой, e-mail:genphys@mail.ru.
Кулагина Валентина Васильевна, к.ф.-м.н., доцент, ст. науч. сотр. СФТИ ТГУ, доцент СГМУ, e-mail: kanc@spti.tsu.ru;
Тазин Иван Дмитриевич, д.м.н., профессор, профессор, e-mail: kanc@spti.tsu.ru.