

ВЛИЯНИЕ ГРАДИЕНТА ВНЕШНЕГО НАПРЯЖЕНИЯ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛИТИПНЫХ СТРУКТУР В МОДЕЛИ ИЗИНГА

В.С. Байдышев, Е.А. Молчанова, В.Н. Удодов

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан, Россия

Исследованы политипные превращения при наличии градиента внешнего напряжения в рамках обобщенной модели Изинга конечного размера.

Исследование политипов и политипных превращений представляет как научный, так и практический интерес. Интерес представляют широко распространенные в природе плотноупакованные кристаллы на основе ГЦК-, ГПУ- структур. Благодаря высокой пластичности таких кристаллов, а также изменению их упругих, электрических, магнитных свойств при политипных превращениях эти материалы могут быть широко использованы в различных технологических приложениях [1,2].

Стабильность кристаллических структур, в том числе многослойных – одна из центральных проблем физики твердого тела. Непосредственно с проблемой устойчивости политипных структур связана проблема политипных превращений [1,2].

В последнее время широкое развитие получила аксиальная модель Изинга [3]. Она и ее модификации могут быть применены к слоистым плотноупакованным кристаллам, в которых имеет место анизотропия межатомных взаимодействий.

В реальных материалах напряжения являются неоднородными. Поэтому представляет интерес исследование политипных превращений при наличии градиента внешнего напряжения в рамках обобщенной модели Изинга конечных размеров.

В рамках обобщенной модели Изинга рассмотрим модельный кристалл, состоящий из плотноупакованных атомных слоев, в каждом из которых атомы образуют правильную треугольную решетку. В таком кристалле каждый слой может находиться только в одной из трех позиций А, В и С. Укладка слоев однозначно задается последовательностью символов А, В, С; например, последовательность символов АВСАВС...соответствует ГЦК(3С) - решетке, АВАВАВ...- ГПУ(2Н) - решетке и т.д.[3]. Справедливым считается принцип плотной упаковки, тогда трёхмерный кристалл можно описать в рамках одномерной модели решёточного газа с числами заполнения $n_i=1$ (сдвиг соседних слоёв в поло-

жительном направлении - укладки АВ, ВС, СА) и $n_i=0$ (сдвиг соседних слоёв в отрицательном направлении - укладки ВА, СВ, АС). Например, конфигурации 111111... и 000000... соответствуют решетке 3С, последовательность 101010...- 2Н, 11001100...- 4Н и т.д. Блок из N+1 плоскостей соответствует решеточному газу на N узлах. Система имеет 2^N конфигураций. Каждая конфигурация соответствует некоторому типу укладки плоскостей в реальном кристалле с периодом λ , измеренном в междолевых расстояниях. Учитывается внешнее сдвиговое напряжение и взаимодействие атомов реального кристалла до шестой координационной сферы. Энергия политипных модификаций для граничного условия "оборванные концы" рассчитывается по формуле [3]:

$$E = \frac{E_0}{\omega_1} - \sigma \sum_i n_i - \sum_i n_i n_{i+1} - A_2 \sum_i n_i n_{i+2} - A_3 \sum_i n_i n_{i+3} - V n_{4H},$$

при наличии градиента внешнего напряжения

$$E = - \sum_i \sigma (n_i + a \cdot i) n_i - \sum_i n_i n_{i+1} - A_2 \sum_i n_i n_{i+2} - A_3 \sum_i n_i n_{i+3} - V n_{4H}$$

где E_0 - энергия политипа; ω_k - энергетический параметр взаимодействия модельных атомов решеточного газа в k-м соседстве; σ - характеристика поля внешних напряжений; $n_i=0$ (1) - числа заполнения i-го узла; a - параметр градиента внешнего напряжения, $A_k = \omega_k / \omega_1$ - относительный энергетический параметр взаимодействия k-х соседей (из кристаллогеометрии ГЦК-решетки можно установить, что энергетический параметр A_2 характеризует взаимодействие атомов реального кристалла в шести координационных сферах, A_3 - в десяти [3]).

Проведён анализ стабильности структур в модели для граничного условия "оборванные концы" при наличии градиента внешнего напряжения (рассмотрен случай низких температур; $N=5,6,7,8,9,10$, где N-число узлов в одномерном решеточном газе, $a = \pm 0.05$, $\omega_1 > 0$). Показано, что при наличии градиента внешнего напряжения происходит общее увеличение числа возможных политипов по сравнению со случаем, где он отсут-

вует. Больше всего наблюдается политипов с ромбоэдрической симметрией при граничных условиях обоих типов (рис. 1, 2). Происходит стабилизация таких структур как $6H_1$, $18R_1$, $18R_3$, $21R_3$, $21R_1$, $7T_2$, $24R_1$, $9T_1$, $27R_2$, $30R_4$, $10T_{x1}$, $10T_{x2}$.

Отметим, что при $a=-0.05$ вид диаграмм почти аналогичен случаю положительности

этого параметра (рис. 3). При наличии градиента внешнего напряжения области стабильности некоторых структур имеют очень маленькую площадь. Например, на рис. 3 черным цветом выделена область стабильностей таких политипов: $10T_{x1}'$, $10T_{x2}$, $10H_{x1}$, $30R_1'$, $30R_2'$, $30R_3$, $30R_3'$.

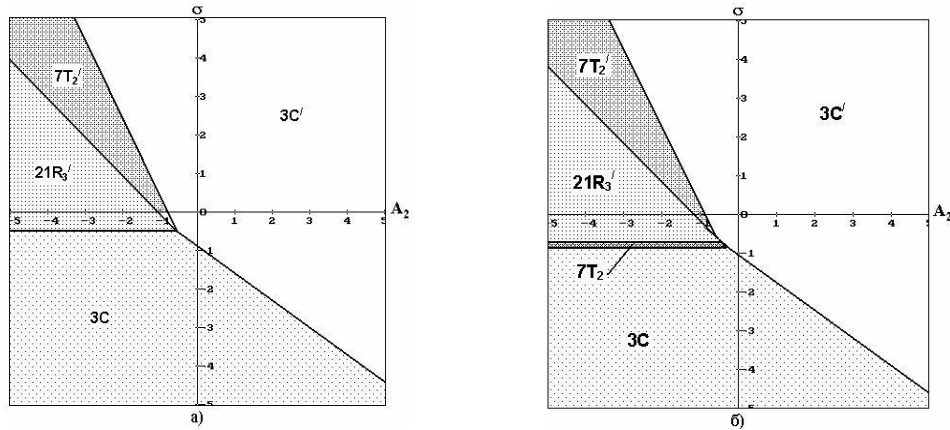


Рисунок 1 – Диаграммы основных состояний. $N=7$, $A_3=V=0$, $\omega_1>0$. а) $a=0$; б) $a=0.05$

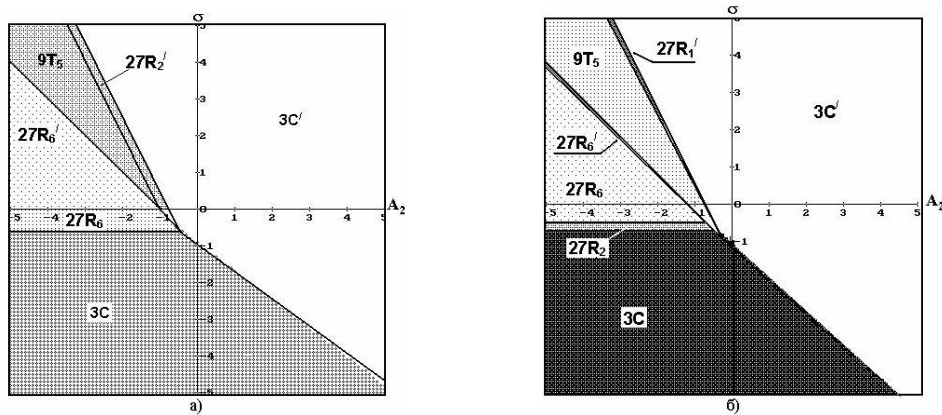


Рисунок 2 – Диаграммы основных состояний. $N=9$, $A_3=V=0$, $\omega_1>0$. а) $a=0$; б) $a=0.05$

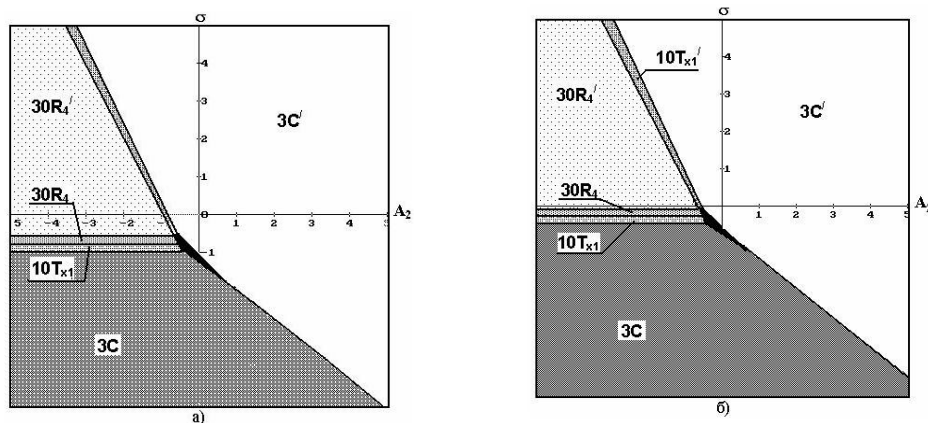


Рисунок 3 – Диаграммы основных состояний. $N=10$, $A_3=V=0$, $\omega_1>0$. а) $a=0.05$; б) $a=-0.05$

ВЛИЯНИЕ ГРАДИЕНТА ВНЕШНЕГО НАПРЯЖЕНИЯ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛИТИПНЫХ СТРУКТУР В МОДЕЛИ ИЗИНГА

Структуры со штрихами обозначают двойниковые модификации политипов.

Таким образом, присутствие градиента внешнего напряжения при моделировании политипных превращений может привести к стабилизации или исчезновению некоторых многослойных политипных структур.

Авторы выражают благодарность профессору Старостенкову М.Д. за предложенную задачу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Верма А., Кришна П. Полиморфизм и политипизм в кристаллах. – М.: Мир, 1969. – 274 с.
2. Николин Б.И. Многослойные структуры и политипизм в металлических сплавах. – Киев: Наукова думка, 1984. – 240 с.
3. Канзычакова Е.Н., Удодов В.Н., Паскаль Ю.И. и др. Модель полиморфных превращений в плотноупакованных структурах при произвольных температурах // Изв. вузов. Физика. – 1992. – №12. – С. 42-45.