

звезды в 2,5 раза позволит включить в программу наблюдений дополнительные звезды. Тем самым можно компенсировать потери, связанные с уменьшением угловых размеров наблюдаемой области неба.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Подобед В. В., Нестеров В. В. Общая астрометрия. М., 1982. [2] Носов Ю. Р., Шилин В. А. Основы физики приборов с зарядовой связью. М., 1986.

Поступила в редакцию
29.01.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1990. Т. 31, № 5

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 548.5:539.12

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО СПЛАВА $Fe_{78}Si_9B_{11}C_2$

Н. А. Хатанова, В. Н. Прудников, Ф. Мартинес (Куба)

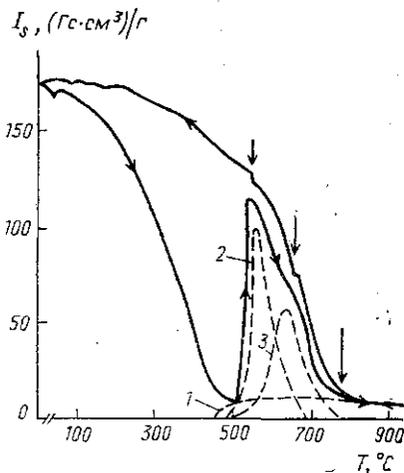
(кафедра физики твердого тела; кафедра магнетизма)

Проведено изучение температурной зависимости намагниченности насыщения при нагреве до 900°C аморфных фольг сплава $Fe_{78}Si_9B_{11}C_2$. Показано, что магнитный фазовый переход в аморфной фазе не происходит из-за начинающейся при 450°C кристаллизации фаз: $\alpha\text{-Fe}$, $(\text{Fe}, \text{Si})_2(\text{B}, \text{C})$, $\gamma\text{-Fe}$ и $(\text{Fe}, \text{B}, \text{C})_3\text{Si}$.

Аморфный сплав $Fe_{78}Si_9B_{11}C_2$ относится к магнитно-мягким сплавам, которые используются для изготовления микропроводов. Цель данной работы — исследование температурной зависимости магнитных свойств этого сплава, которая связана с температурными пределами применения таких микропроводов, и установление корреляции между изменениями магнитных свойств и структурными состояниями сплава при различных температурах. В работе [1] были проведены аналогичные исследования аморфных сплавов на основе кобальта и показано, что для выявления структурных и магнитных переходов оптимальным является сочетание методов рентгеновского анализа с измерением намагниченности насыщения I_s , так как позволяет качественно определять составы кристаллизующихся фаз, отличные от стехиометрических.

В данной статье приводятся результаты исследования этими же методами металлического стекла $Fe_{78}Si_9B_{11}C_2$. Величина I_s измерялась в атмосфере аргона в магнитном поле 10 кЭ при нагреве со скоростью $5,3\text{ град./мин}$ в интервале от 20 до 900°C и охлаждении со скоростью 20 град./мин . Рентгеновскому анализу подвергались образцы после термомангнитной обработки в этой же установке. Малые размеры образцов ($2 \times 2\text{ мм}$) не позволяли использовать дифрактометрию. Рентгеновский анализ проводился фотометодом на монохроматизированном излучении Mo . По данным электронной микроскопии при комнатной температуре в исходном состоянии сплав был полностью аморфным.

На рисунке показаны температурные зависимости I_s при нагреве и охлаждении. Как в аморфном, так и в кристаллическом состояниях при комнатной температуре сплав имеет примерно равные значения $I_s = 175\text{ Гс}\cdot\text{см}^3/\text{г}$. С ростом температуры в интервале $100\text{—}450^\circ\text{C}$ кривая снижается, но не доходит до нуля, т. е. магнитный фазовый переход не



Температурная зависимость намагниченности насыщения I_s сплава $Fe_{78}Si_9B_{11}C_2$. Штриховые кривые соответствуют фазам: $\alpha\text{-Fe}$ (1); $(\text{Fe}, \text{Si})_2(\text{B}, \text{C})$ (2); $\gamma\text{-Fe}$ (3)

происходит, так как при 450°С начинается кристаллизация ферромагнитных фаз, приводящая к дальнейшему увеличению I_s до значения 115 Гс·см³/г при 550°, после чего происходит резкое падение намагниченности, однако даже при 900°С она не доходит до нуля, ограничиваясь значением $I_s \approx 5$ Гс·см³/г. Таким образом, сплав Fe₇₈Si₉B₁₁C₂ ни в аморфном, ни в кристаллическом состоянии при нагреве до 900°С не бывает парамагнитным. Объяснение хода кривой I_s при нагреве до 900°С может быть сделано по результатам рентгеновского анализа образцов после термомангнитной обработки до температур 550 и 900°С.

d_{exp} Å	d_{tabl} , Å			d_{exp} Å	d_{tabl} , Å			
	α -Fe	Fe ₂ B	γ -Fe		α -Fe	γ -Fe	Fe ₂ B	Fe ₃ Si
$T=550^\circ \text{C}$								
2,12	—	2,12	—	3,15	—	—	3,61	3,25
2,01	2,01	2,01	2,07	2,46	—	—	2,56	2,83
1,86	—	1,83	—	2,10	—	—	2,12	—
1,74	—	—	1,80	2,01	2,01	2,07	2,01	1,99
1,64	—	1,63	—	1,81	—	1,80	1,83	1,70
1,43	1,43	—	—	1,59	—	—	1,63	1,62
1,29	—	—	1,26	1,41	1,43	—	—	1,41
1,23	—	1,20	—	1,26	—	1,26	—	—
1,17	1,17	1,19	—	1,18	1,17	—	1,20 1,19	—
1,06	—	—	1,08	1,14	—	1,08	—	1,14
1,02	—	—	1,01	0,99	—	1,01	—	0,99
0,906	0,91	—	—	0,89	0,91	—	—	—
$T=900^\circ \text{C}$								

В таблице приведены значения межплоскостных расстояний d_{exp} , полученные после соответствующих нагревов, которые сопоставлены с табличными значениями d_{tabl} [2] для железа в двух модификациях и кристаллохимических соединений Fe₂B и Fe₃Si, имеющих наборы d_{tabl} , наиболее близкие к экспериментальным.

Как видно из таблицы, при 550°С образуются фазы, близкие по значениям d к α -Fe, γ -Fe и Fe₂B, а при 900°С дополнительно к ним выявляется фаза, близкая к Fe₃Si. Разница в некоторых значениях между d_{exp} и d_{tabl} связана с нестехиометричностью кристаллизующихся фаз, которые фактически представляют собой твердые растворы на основе указанных соединений. В этом случае на кривой охлаждения I_s от 900°С до комнатной температуры должны выявляться точки перегибов, соответствующие точкам Кюри образовавшихся фаз, причем вхождение немагнитных атомов в решетку фазы должно привести к понижению T_c по сравнению с табличными данными. На рисунке такие точки обнаруживаются при 770, 660 и 550°С (указаны стрелками) и соответствуют фазам γ -Fe ($T_c=770^\circ\text{C}$), (Fe, Si)₂(B, C) ($T_c=742^\circ\text{C}$ для Fe₂B) и (Fe, B, C)₃Si ($T_c=554^\circ\text{C}$ для Fe₃Si) [3]. Несмотря на то что разница в температурах Кюри для Fe₃Si и (Fe, B, C)₃Si мала и можно было бы считать ее в пределах ошибки измерения, тем не менее различия в значениях d_{exp} и d_{tabl} (см. таблицу) показывают, что мы имеем дело именно с твердым раствором. Фаза (Fe, B, C)₃Si не выявляется при нагреве, так как для нее T_c меньше, чем температура кристаллизации, и она кристаллизуется в парамагнитном состоянии. Так как α -фаза всегда только ферромагнитна, то кривая I_s выше 800°С не достигает нуля. Учитывая эти данные, интегральную кривую I_s при нагреве выше температуры кристаллизации можно рассматривать как суперпозицию ряда парциальных кривых от соответствующих ферромагнитных фаз. Такие кривые указаны на рисунке пунктиром.

Рисунок показывает, что намагниченность насыщения кристаллического сплава Fe₇₈Si₉B₁₁C₂ в области температур 20—500°С выше, чем у аналогичного аморфного сплава, но в пределах рабочей температур 100—200°С, где различия в свойствах малы, преимущество имеют аморфные сплавы из-за более высоких механических и антикоррозийных свойств.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Роде В. Е., Прудников В. Н., Хатанова Н. А., Мартинес Ф. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. 30, № 5. С. 63. [2] Inorganic Index to the

УДК 539.213.001

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В Ni—P ПРИ ГЛУБОКОМ ОХЛАЖДЕНИИ И ПОСЛЕДУЮЩЕМ НАГРЕВЕ

В. С. Степанюк, О. С. Трушин, А. А. Кацнельсон, А. Сас (Венгрия)

(кафедра физики твердого тела)

Методом молекулярной динамики исследуется зависимость структуры сплава $Ni_{75}P_{25}$ от способа его приготовления. Показано, что структура обладает свойством «теплового гистерезиса». Обсуждается возможность прогнозирования структурной релаксации в рамках молекулярно-динамического моделирования.

Проблема устойчивости состояний, достигаемых при аморфизации путем быстрой закалки, является одной из важнейших как для физики аморфных веществ, так и для их практического использования. Молекулярно-динамическое моделирование позволяет воспроизводить структуру аморфных веществ при различных способах их получения. При этом возможно проследить зависимость структуры аморфной фазы от способа приготовления образца.

С этой целью был поставлен численный эксперимент, состоящий в следующем. Для сплава $Ni_{75}P_{25}$ проведено молекулярно-динамическое моделирование, в ходе которого система выдерживалась длительное время (более 3000 шагов) при температуре 2000 К. Затем началось ступенчатое охлаждение системы до 4 К. Далее, система от 4 К была нагрета до 300 К.

Методика молекулярно-динамического расчета состояла в следующем. Прослеживалось движение 192 атомов никеля и 64 атомов фосфора путем численного интегрирования их уравнений движения. Усреднение физических величин проводилось в рамках микроканонического ансамбля, в котором число частиц, энергия и объем системы остаются постоянными.

Система находилась в ящике, имеющем форму куба, с периодическими граничными условиями. Атомы взаимодействовали с парными потенциалами типа Морзе, параметры которых получены в работе [2] подгонкой к эксперименту. Расчет проводился по стандартной схеме, описанной нами ранее [1].

Полученные функции радиального распределения $g(r)$ при $T=300$ К непосредственно после охлаждения (кривая 1), а затем после глубокого охлаждения и отогрева до $T=300$ К (кривая 2) представлены на рисунке. Хорошо видно, что кривые весьма близки между собой и различаются только величинами первого и второго максимумов $g(r)$: оба эти максимума выше для «отогретого» состояния.

Дополнительную информацию о геометрии атомных конфигураций, ответственных за характерный ближний порядок в сплаве, дает анализ структуры молекулярно-динамической модели на языке статистики многогранников Вороного. Такие многогранники представляют собой обобщение ячейки Вигнера—Зейтца на случай неупорядоченных структур. Плоскости, образующие грани многогранника, делят отрезки,

