

Нетрудно убедиться, что из соотношения

$$\frac{1}{3} \lg T_n = \frac{1}{3} \lg T_* + \lg n, \quad (8)$$

следующего из (2) и (5), можно оценить величину показателя ε :

$$\frac{1}{3} \lg T_n^{\text{Sun}} - \frac{1}{3} \lg T_n^{\text{Jup}} = \frac{s_1}{3} \lg \{M^{\text{Sun}}/M^{\text{Jup}}\}. \quad (9)$$

Из рисунка следует, что левая часть равенства имеет значение $\sim 1,3$. Принимая во внимание оценку $M^{\text{Sun}}/M^{\text{Jup}} \sim 10^3$ [1], получаем, что $s_1 \approx 1,3$ ($\varepsilon \approx 0,6-0,7$).

Теперь можно поставить вопрос о фундаментальной массе m . Используя $M^{\text{Sun}} \approx 2 \cdot 10^{33}$ г, $r_g = \gamma M^{\text{Sun}}/c^2 \approx 1,49 \cdot 10^5$ см, $t_g = 2\pi r_g/c \approx \pi \cdot 10^{-5}$ с, 1 год $\sim \pi \cdot 10^{12}$ с, из выражения (5) получаем оценку

$$\pi \cdot 10^{12} \approx \pi \cdot 10^{-5} \left(\frac{2 \cdot 10^{33}}{m} \right)^{s_1-1}, \quad (10)$$

т. е.

$$m \approx 2 \cdot 10^{33-34/\varepsilon} \text{ г}. \quad (11)$$

Если $\varepsilon \approx 0,6$, то $m \approx 2 \cdot 10^{-24}$ г по порядку величины сравнима с массой протона $m_p = 1,67 \cdot 10^{-24}$ г.

Полученный результат показывает, что отмеченная в данной работе закономерность порядка, возможно [10], имеет значительно более глубокий смысл, чем это представляется на первый взгляд.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Физика космоса: Маленькая энциклопедия / Гл. ред. Р. А. Сюняев. М., 1986. С. 50. [2] Гуди Р., Уолкер Дж. Солнечная система. М., 1978. [3] Convey B. A., Elsner T. J. // Long-Term Dynamical Behaviour of Natural and Artificial N-Body Systems. L., 1989. P. 3. [4] Convey B. A., Zelenka R. E. // Ibid. P. 13. [5] Rawal J. J. // J. Astrophys. Astron. 1989, 10, N 3. P. 257. [6] Чечельницкий А. М. // ДАН СССР. 1988. 303, № 5. С. 1082. [7] Голицын Г. С. Введение в динамику планетных атмосфер. Л., 1974. [8] Wells D. R. // IEEE Trans. Plasma Sci. 1990, 18, N. 1. P. 73. [9] Patton J. M. // Celest. Mech. 1989. 44, N 4. P. 365 [10] Окунь Л. Б. // УФН. 1991. 161, № 9. С. 177.

Поступила в редакцию
12.03.91

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 2

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.213

КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МИКРОСТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ Al—Mn

В. С. Степанюк, Г. М. Калибаева, А. А. Кацнельсон

(кафедра физики твердого тела)

Методом молекулярной динамики были смоделированы сплавы Al—Mn при концентрациях Mn 14%, 18, 22,5 и 25%. Установлено, что микроструктура данных сплавов при разных концентрациях Mn существенно отличается, причем в структуре всех сплавов присутствует большой процент икосаэдрических микрокластеров, а при концентрации 22,5% наблюдается максимум икосаэдроподобных структур.

Квазикристаллическое состояние характеризуется дальним ориентационным упорядочением икосаэдров [1, 2]. В ряде исследований [3—6], выполненных в рамках феноменологического подхода теории фазовых переходов Ландау, было показано, что

при определенных условиях структура с точечной группой симметрии икосаэдра может быть энергетически более выгодной, чем структура с трансляционной инвариантностью. Локальная структура сплава и возможность образования икосаэдрической структуры определяются как особенностями электронного строения, так и концентрацией компонент. Оба этих фактора определяют возможность существования икосаэдров в сплаве и их упорядочение.

Как правило, в сплавах Al—Mn наряду с квазикристаллической фазой обнаруживают остатки ГЦК-фазы Al. Причем в работе [7] отмечалось, что экспериментально икосаэдрическая фаза наиболее отчетливо выражена в сплаве $Al_{77,5}Mn_{22,5}$. В работе [8] исследовались фазовые переходы в пленках Al—Mn из аморфного состояния в квазикристаллическое и было установлено, что этот переход сопровождается упорядочением икосаэдров. Таким образом, необходимо определить, какова микроструктура в аморфных сплавах Al—Mn разных концентраций и при какой концентрации компонент наиболее ярко выражены микрогруппировки с симметрией икосаэдра? Ответ на второй вопрос позволит понять, при каком составе сплава более выгодно икосаэдрическое упорядочение.

Для решения поставленных вопросов нами использовался метод молекулярной динамики [9]. Взаимодействие между атомами описывалось потенциалом Морзе. Параметры этого потенциала (глубина и положение первого минимума) были определены подгонкой под парные потенциалы, рассчитанные методом псевдопотенциала с фактором Хейне—Абаренкова—Анималу с экранированием Вашиста—Сингви [10, 11].

Было смоделировано быстрое охлаждение расплавов до температуры 300 К с временным шагом 10^{-15} с (всего 1700 шагов). Далее проводилась термостабилизация модели в течение 10 000 шагов.

Основные результаты, приводимые ниже, получены для относительно небольших ансамблей, состоящих из 256 атомов.

Для всех сплавов проводился анализ многогранников Вороного [10]. Результаты анализа многогранников Вороного приведены на рис. 1 и 2 и в таблице.

Доли (в процентах) типов многогранников Вороного, полученные компьютерным моделированием для $Al_{86}Mn_{14}$, $Al_{82}Mn_{18}$, $Al_{77,5}Mn_{22,5}$ и $Al_{75}Mn_{25}$ при температуре 300 К

Концентрация Mn	Атом в центре многогранника	Многогранники		
		икосаэдроподобные	призмы	структуры типа ГЦК
14%	Al	22,3	17,2	14,2
	Mn	66	14,4	2,9
	Средневзвешенное значение	28	16,8	12,5
18%	Al	24,3	20,1	16,3
	Mn	60,8	13	6,5
	Средневзвешенное значение	30,9	18,8	14,5
22,5%	Al	31,7	13,5	15,6
	Mn	69	12,3	3,6
	Средневзвешенное значение	39,8	13,3	12,9
25%	Al	27,5	16,6	24,5
	Mn	58,1	14,4	12,5
	Средневзвешенное значение	35,1	16	21,5

На рис. 1 представлено количество многоугольников N_n , имеющих n сторон ($n=3, 4, \dots, 9$) и составляющих грани многогранников Вороного, описанных вокруг атомов Al и Mn (в процентах от общего числа граней многогранников вокруг Al и Mn). Светлые области соответствуют Al, заштрихованные — Mn. Концентрация Mn составляет 14% (а), 18% (б), 22,5% (в) и 25% (г).

На всех рисунках наблюдается явно выраженный максимум при $n=5$. В общем случае эта ситуация соответствует не только икосаэдрам, но и, например, антипризме Архимеда, но процентное содержание для последнего существенно меньше, чем для икосаэдров, что также видно из таблицы.

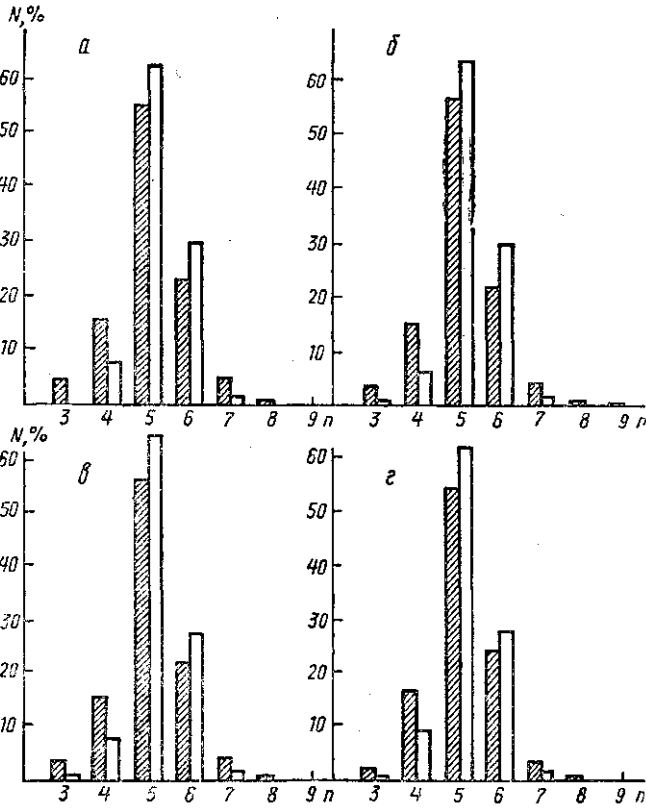


Рис. 1

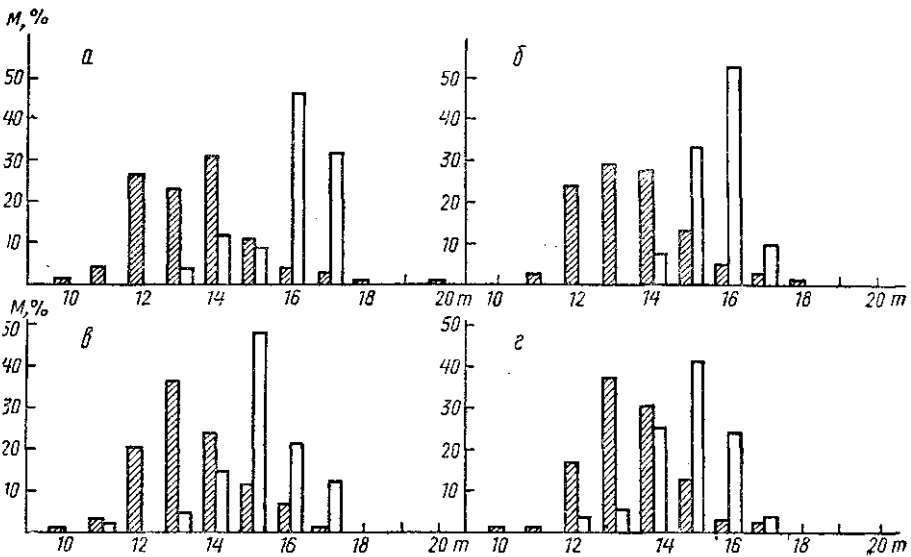


Рис. 2

В таблице представлены характерные типы многогранников Вороного, окружающих Al и Mn (в процентах от общего числа многогранников вокруг данного типа атомов и от числа многогранников в целом) для разных концентраций Mn при температуре 300 К.

На рис. 2 представлено количество многогранников Вороного M , имеющих m граней ($m=10, 11, \dots, 19$) и описанных вокруг атомов Al и Mn (в процентах от общего числа многогранников вокруг этих атомов). Концентрации Mn и условные обозначения те же, что на рис. 1.

Из рис. 2 и таблицы видно, что микроструктура данных сплавов при разных концентрациях Mn существенно отличается, причем при концентрации 22,5% наблюдается максимум икосаэдроподобных структур.

Эти результаты согласуются с экспериментальными данными и показывают, что концентрация микрокластеров икосаэдрического типа при увеличении концентрации Mn сначала растет, достигает максимума при 22,5% и далее начинает уменьшаться.

Более строгий количественный анализ требует применения более реалистичных потенциалов взаимодействия (возможно, эмпирических) и увеличения количества атомов в ансамбле во много раз. Применение суперкомпьютеров в этом случае, возможно, позволит наблюдать переход из аморфного состояния в квазикристаллическое при длительной выдержке системы. Изменяя концентрацию компонент, как следует из нашего анализа, можно регулировать такие переходы.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W. // Phys. Rev. Lett. 1984. 53. P. 1951. [2] Levine D., Steinhardt P. J. // Phys. Rev. Lett. 1984. 53. P. 2477. [3] Nelson D. R., Widom M. // Nucl. Phys. 1984. B240. P. 113. [4] Bak P. // Phys. Rev. Lett. 1985. 54. P. 1517. [5] Levine D., Lubensky T. C., Ostlund S. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. 54. P. 1520. [6] Mermin N. D., Troian S. M. // Phys. Rev. Lett. 1985. 54. P. 1524. [7] Anlage S. // Mater. Sci. Forum (Swiz.) 1987. 22—24. P. 269. [8] Lilienfeld D. A., Nastasi M., Jonnson H. H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1985. 55. P. 1587. [9] Adler B. J., Wainwright P. E. // J. Chem. Phys. 1960. 33. P. 1439. [10] Полухин В. А., Ватолин Н. А. Моделирование аморфных металлов. М., 1985. [11] Vashista P., Singwi K. S. // Phys. Rev. 1972. B6. P. 875.

Поступила в редакцию
22.10.91