

## ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

### Моделирование процессов диффузии и фазообразования при изотермических отжигах слоистых систем Fe–Zr

В. С. Русаков<sup>1,a</sup>, И. А. Сухоруков<sup>1,b</sup>, А. М. Жанкадамова<sup>2</sup>, К. К. Кадыржанов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра общей физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

<sup>2</sup>Институт ядерной физики, Национальный ядерный центр Республики Казахстан. Казахстан, 050032, Алма-Ата, ул. Ибрагимова, д. 1.

E-mail: <sup>a</sup>vrsrusakov@physics.msu.ru, <sup>b</sup>iasias@mail.ru

Статья поступила 22.09.2010, подписана в печать 03.11.2010

Представлены результаты моделирования процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах Fe–Zr, подвергнутых последовательным изотермическим отжигам. Моделирование проведено в рамках физической модели, в основе которой — феноменологическая теория Даркена и механизм взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы. Результаты моделирования хорошо согласуются с данными, полученными с помощью методов мёссбауэрской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии, указывая на то, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их взаимной диффузии и соответствует особенностям фазовой диаграммы равновесных состояний бинарной системы.

**Ключевые слова:** слоистая бинарная металлическая система, диффузия, фазообразование, моделирование, мёссбауэрская спектроскопия.

УДК: 539.216.2:543.429.3. PACS: 66.10.cg, 63.22.Np.

#### Введение

Для разработки физических основ ионных технологий получения стабильных многофункциональных поверхностно-модифицированных металлических материалов необходимы систематические исследования. На протяжении последних нескольких лет авторы проводят экспериментальные [1–5] и теоретические [6–8] исследования слоистых металлических систем, полученных методом ионно-плазменного осаждения. В настоящей работе в рамках физической модели, основанной на феноменологической теории Даркена и механизме взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы, проведено моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах Fe–Zr при последовательных изотермических отжигах и сравнительный анализ результатов численных расчетов с экспериментальными данными, полученными методами мёссбауэрской спектроскопии и рентгенофазового анализа.

#### 1. Физическая модель и ее программная реализация

##### 1.1. Модель диффузии и фазообразования

Для описания термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в сплавах бинарной слоистой металлической системы A–B использована физическая модель, подробно описанная нами в работах [6–8]. В эту модель заложены следующие основные принципы:

1) процессы диффузии и фазообразования являются квазистационарными;

2) результат фазообразования определяется локальной концентрацией компонентов и диаграммой равновесных состояний бинарной системы. Локальная концентрация компонентов  $C_{A,B}(x, t)$  на глубине образца с координатой  $x$  в произвольный момент времени  $t$  определяется процессом их взаимной диффузии;

3) в однофазных областях слоистой системы в соответствии с феноменологической теорией взаимной диффузии Даркена [9, 10] диффузия компонентов в бинарных сплавах описывается уравнением

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial D(x, t)}{\partial x} \cdot \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + D(x, t) \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1)$$

Согласно закону Даркена, коэффициент взаимной диффузии  $D(x, t)$  равен

$$D(C_A(x, t)) = D_A C_B(x, t) + D_B C_A(x, t) = D_A (1 - C_A(x, t)) + D_B C_A(x, t). \quad (2)$$

Здесь  $D_{A,B}$  — парциальные коэффициенты диффузии компонентов A и B друг в друге, которые в соответствии с используемой физической моделью одинаковы для всех однофазных областей, а следовательно, не зависят от координаты  $x$  и времени  $t$ ;

4) в двухфазных областях слоистой системы диффузия компонентов проходит в соответствии с предложенным нами в работах [6–8] механизмом взаимной диффузии по непрерывным каналам, образованным последовательно расположенным соприкасающимися частицами одной фазы. Если предположить, что в двухфазной области слоистой системы образуются частицы

обеих фаз одинакового линейного размера  $\lambda$ , то в  $j$ -м слое двухфазной области с координатой  $x_j = x^\alpha + j\lambda$  ( $x^\alpha$  — координата границы однофазной области, содержащей  $\alpha$ -фазу) эффективный коэффициент взаимной диффузии определяется следующим образом [6–8]:

$$D(x_j) = D^\alpha(x_j) + D^\beta(x_j) = (D_A(1 - C_A^\alpha) + D_B C_A^\alpha) W_j^\alpha + (D_A(1 - C_A^\beta) + D_B C_A^\beta) W_j^\beta. \quad (3)$$

Здесь  $D^\alpha(x_j)$  и  $D^\beta(x_j)$  — коэффициенты взаимной диффузии компонентов по каналам, образованным частицами  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазы соответственно, а  $W_j^\alpha$  и  $W_j^\beta$  — вероятности образования непрерывных каналов  $\alpha$ -фазы длиной, превышающей  $x_j - x^\alpha$ , и каналов  $\beta$ -фазы длиной, превышающей  $x^\beta - x_j$ , по которым происходит взаимная диффузия компонентов от однофазных областей вплоть до  $j$ -го слоя;

5) различие в объемах, приходящихся на атомы компонентов А и В, учитывается путем пересчета исходных толщин слоев в многослойных системах на некоторые эффективные толщины, соответствующие одноковому эффективному объему для атомов всех компонентов. Если исходить из того, что количество атомов компонентов и общая толщина слоистой системы при таком пересчете (как и в процессе диффузии) остаются неизменными, то эффективная толщина  $i$ -го слоя многослойной системы  $d_{\text{eff}}^i$  будет равна

$$d_{\text{eff}}^i = d \frac{d^i / \left( \frac{M_A}{\rho_A} C_A^i + \frac{M_B}{\rho_B} C_B^i \right)}{\sum_i \left( d^i / \left( \frac{M_A}{\rho_A} C_A^i + \frac{M_B}{\rho_B} C_B^i \right) \right)},$$

где  $d^i$  — толщина  $i$ -го слоя многослойной системы,  $d = \sum_i d^i$  — толщина всей слоистой системы,  $C_{A,B}^i$  — концентрации компонентов А и В в  $i$ -м слое,  $\rho_{A,B}$  и  $M_{A,B}$  — плотности и молярные массы элементов А и В.

Таким образом, для описания процессов диффузии и фазообразования в бинарной слоистой металлической системе необходимо решить линейное дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка (1) с учетом выражений (2) и (3) для коэффициента взаимной диффузии  $D(x, t)$  в различных фазовых областях. При этом начальные и граничные условия, необходимые для решения уравнения, задаются в соответствии с условиями проведения эксперимента.

Если двухслойная система получена путем магнетронного напыления бинарного покрытия определенного состава на поверхность бинарной подложки другого состава, начальные условия выбираются в виде ступеньки:

$$C(x)_{t=0} = \begin{cases} C_{\text{coat}}, & 0 \leq x < d_{\text{coat}}, \\ C_{\text{sub}}, & d_{\text{coat}} \leq x \leq d_{\text{coat}} + d_{\text{sub}}, \end{cases}$$

где  $d_{\text{coat}}$  — толщина наносимого покрытия,  $d_{\text{sub}}$  — толщина подложки, а  $C_{\text{coat}}$  и  $C_{\text{sub}}$  — концентрации компонентов в покрытии и подложке соответственно.

Если считать, что в процессе термических отжигов с обеих поверхностей слоистой системы не происходит заметной потери компонентов, то граничные условия

будут

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=d} = 0,$$

где  $d$  — толщина всей слоистой системы.

## 1.2. Программная реализация и ее функциональные возможности

Представленная выше физическая модель для описания процессов диффузии и фазообразования в слоистой бинарной металлической системе была реализована в виде компьютерной программы DIFFUSION. Основные функциональные возможности программы: использование произвольной диаграммы равновесных состояний бинарной системы; задание любого начального концентрационного профиля компонентов; реализация произвольных температурно-временных режимов термических отжигов; расчет на всех этапах процесса относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров, полученных регистрацией  $\gamma$ -квантов в геометрии на прохождение и регистрацией конверсионных электронов в геометрии обратного рассеяния, а также относительного содержания фаз в атомных единицах компонентов в области проникновения в слоистую систему рентгеновского излучения.

Вариация задаваемых параметров, определяющих свойства слоистой бинарной системы и условия последовательных термических отжигов, позволяет моделировать термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования как в модельных слоистых системах, так и в слоистых системах, которые специально созданы и экспериментально исследованы.

## 2. Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования

В настоящей работе проведено моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в бинарных двухслойных системах  $\alpha$ -Fe (10 мкм)–Zr (2 мкм) и  $\alpha$ -Fe (5 мкм)–Zr (2 мкм), подвергнутых изотермическим отжигам. Для сравнения с результатами моделирования использовались экспериментальные данные мессбауэровских исследований и рентгенофазового анализа [4, 5].

### 2.1. Параметры, использованные при моделировании

Для моделирования процессов диффузии и фазообразования использовалась фазовая диаграмма равновесных состояний бинарной системы Fe–Zr, обобщенная на основе диаграмм, приведенных в работах [11, 12]. Диаграмма состояний бинарной системы Fe–Zr характеризуется наличием нескольких интерметаллических соединений:  $\text{Fe}_3\text{Zr}$ ,  $\text{Fe}_2\text{Zr}$ ,  $\text{FeZr}_2$  и  $\text{FeZr}_3$ , а также твердых растворов Zr(Fe) и Fe(Zr). Соединение  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  имеет область гомогенности протяженностью 22.3–25% (ат.) Zr [12]. При температуре 900°C интерметаллид  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  имеет концентрационную область существования от 29 до 36% (ат.) Zr [12], а интерметаллид  $\text{FeZr}_2$  — от 66 до 68% (ат.) Zr [11]. Граница области гомогенности фазы  $\text{FeZr}_3$  расположена при 73.2% (ат.) Zr, со стороны Zr граница области надежно не установлена. Растворимость Zr в  $\alpha$ -Fe незначительна, ~0.16% (ат.) при 900°C [11]. Растворимость Fe в  $\beta$ -Zr при 900°C имеет значение около 6% (ат.) [12].

Для описания экспериментальных данных, полученных при проведении термических отжигов, необходимы парциальные коэффициенты диффузии железа в цирконии  $D_{\text{FeZr}}$  и циркония в железе  $D_{\text{ZrFe}}$  (2), (3), которые рассчитывались для данной температуры отжига по закону Аррениуса:  $D(T) = D^0 \exp(-Q/kT)$ . Здесь  $D^0$  и  $Q$  — частотные факторы и энергии активации для соответствующих компонентов,  $k$  — постоянная Больцмана. В соответствии с литературными данными для массивных образцов [13] необходимые для расчетов значения частотного фактора и энергии активации для циркония в железе были взяты равными  $D_{\text{ZrFe}}^0 = 1.0 \cdot 10^4 \text{ мкм}^2/\text{с}$  и  $Q_{\text{ZrFe}} = 2.0 \cdot 10^5 \text{ Дж/моль}$ . Поскольку в процессе получения слоистых систем методом магнетронного распыления циркония на подложку железа, как правило, возникает столбчатая структура покрытия, то коэффициенты диффузии железа в цирконии  $D_{\text{FeZr}}$  для слоистых систем и массивных образцов могут сильно отличаться друг от друга. Поэтому в наших расчетах частотный фактор  $D_{\text{FeZr}}^0 = 3.5 \cdot 10^5 \text{ мкм}^2/\text{с}$  и энергия активации  $Q_{\text{FeZr}} = 2.0 \cdot 10^5 \text{ Дж/моль}$  были подобраны с целью наилучшего описания экспериментальных данных, полученных при проведении последовательных изохронных термических отжигов.

Для сравнения результатов моделирования с относительными интенсивностями рефлексов образующихся фаз, полученных методами рентгеновской дифрактометрии, были проведены оценки эффективных глубин проникновения рентгеновского излучения в слоистую систему. Эти глубины зависят от коэффициента поглощения рентгеновского пучка компонентами слоистой системы и угла дифракции. Их оценки были получены при помощи программы AbsorbDX V 1.1.2. Рентгеновский фазовый анализ проводился после ряда отжигов в слоистых системах Fe-Zr в интервале углов  $34^\circ \leq 2\vartheta \leq 85^\circ$ . При расчетах были взяты средние на этих интервалах значения эффективных глубин проникновения рентгеновского излучения в образец:  $x_{\text{Fe}}^{\text{eff}} = 1 \text{ мкм}$ ,  $x_{\text{Zr}}^{\text{eff}} = 3 \text{ мкм}$ . При этом были учтены также различия форм-факторов  $f$  для компонентов слоистой системы (см., например, [14]) путем умножения вклада в рефлексы от компоненты Zr на корректирующий постоянный множитель:  $f_{\text{Zr}}^2/f_{\text{Fe}}^2 = 2.8$ .

Цирконий обладает высокой степенью химического сродства к кислороду, поэтому в процессе от-

жига он подвержен окислению в остаточной атмосфере вакуумной печи. Исходя из рентгеновских дифрактограмм, полученных со стороны циркониевого покрытия при исследовании слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) [4], можно судить об образовании значительного оксидного слоя  $\text{ZrO}_2$  на поверхности слоистой системы со стороны Zr. В связи с этим толщина диффундирующего слоя циркония  $d_{\text{Zr}} = 1.3 \text{ мкм}$  была подобрана нами с целью наилучшего соответствия расчетных и экспериментально определенных с помощью методов мёссбауэрской спектроскопии соотношений фаз. В аналогичном эксперименте для системы  $\alpha\text{-Fe}(10\text{мкм})\text{-Zr}(2\text{мкм})$  [5] наблюдался заметно меньший оксидный слой циркония на поверхности системы, поэтому подобранный толщина циркония, используемая при расчете, оказалась равной 1.9 мкм.

## 2.2. Результаты моделирования

Приготовленные с помощью магнетронного распыления циркония на фольги из  $\alpha\text{-Fe}$  слоистые системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) и  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) подвергались последовательным изотермическим отжигам различной длительности при температуре  $900^\circ\text{C}$  [4, 5]. После каждого отжига эти системы исследовались при комнатной температуре методами мёссбауэрской спектроскопии в геометрии на прохождение. В частности, определялись относительные интенсивности парциальных мёссбауэрских спектров образующихся фаз. После некоторых из этапов отжига был проведен также рентгенофазовый анализ.

Зависимости относительных интенсивностей  $I_{\text{MS}}$  парциальных мёссбауэрских спектров от времени  $t_{\text{ann}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$  для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) представлены на рис. 1. Как видно из рисунка, уже после первого этапа термического отжига ( $t_{\text{ann}} = 2 \text{ ч}$ ) появляются фазы  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  и  $\text{Fe}_3\text{Zr}$ . Затем содержание интерметаллида  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  плавно растет, а количество  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  в образце уменьшается. После 10 ч отжига обнаружить соединение  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  практически не удается. При дальнейшем отжиге соотношение количества фаз  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  и  $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$  практически не изменяется. Сравнение расчетных зависимостей (рис. 1, б) с экспериментальными данными (рис. 1, а) показывает, что результаты моделирования хорошо описывают кинетику

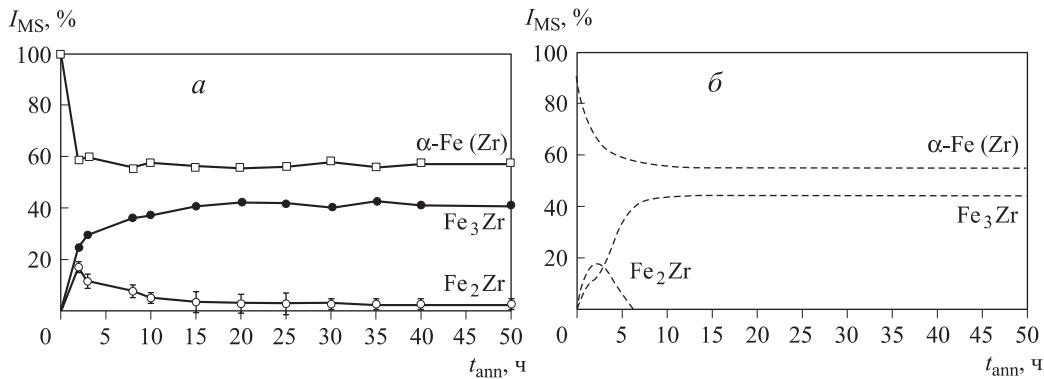


Рис. 1. Экспериментальные (а) и теоретические (б) зависимости относительных интенсивностей  $I_{\text{MS}}$  парциальных мёссбауэрских спектров от времени  $t_{\text{ann}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$  для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм)

процессов диффузии и фазообразования в слоистой системе  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм), а также соотношение образующихся интерметаллидов на всех этапах термического отжига.

На рис. 2 представлены относительные интенсивности  $I_{X\text{-ray}}$  дифракционных рефлексов образующихся фаз для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$ (5 мкм)-Zr(2 мкм) со стороны циркония в зависимости от времени  $t_{\text{анн}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{анн}} = 900^\circ\text{C}$ . Наблюдаемая с помощью рентгеновской дифрактометрии (рис. 2, *a*) последовательность фазообразования и характерные времена существования фаз в процессе изотермиче-

ского отжига слоистой системы соответствуют результатам, полученным методом мёссбауэровской спектроскопии (рис. 1, *a*). Наблюдаемое существенное отличие относительных интенсивностей дифракционных рефлексов от относительных интенсивностей парциальных мёссбауэровских спектров для образующихся фаз на всех этапах отжига объясняется главным образом тем, что рентгеновская дифрактометрия в геометрии Брэгга-Брентано дает информацию о приповерхностном слое образца, определяемом эффективной глубиной проникновения рентгеновского излучения, а мёссбауэровская спектроскопия в геометрии на прохождение —

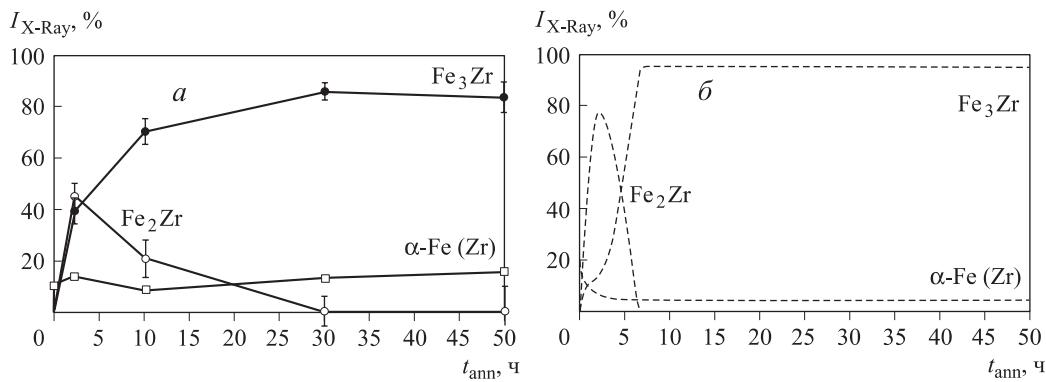


Рис. 2. Экспериментальные (*a*) и теоретические (*б*) зависимости относительных интенсивностей  $I_{X\text{-ray}}$  дифракционных рефлексов образующихся фаз от времени  $t_{\text{анн}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{анн}} = 900^\circ\text{C}$  для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) со стороны циркония

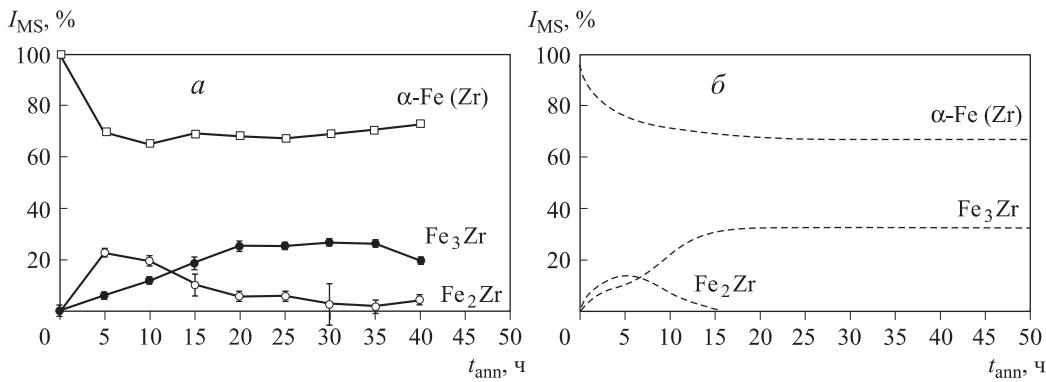


Рис. 3. Экспериментальные (*a*) и теоретические (*б*) зависимости относительных интенсивностей  $I_{MS}$  парциальных мёссбауэровских спектров от времени  $t_{\text{анн}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{анн}} = 900^\circ\text{C}$  для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм)

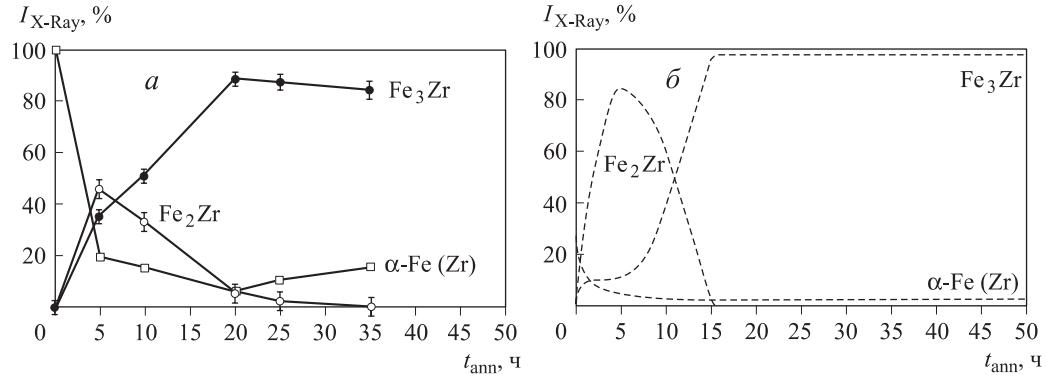


Рис. 4. Экспериментальные (*a*) и теоретические (*б*) зависимости относительных интенсивностей  $I_{X\text{-ray}}$  дифракционных рефлексов образующихся фаз от времени  $t_{\text{анн}}$  изотермического отжига при  $T_{\text{анн}} = 900^\circ\text{C}$  для слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) со стороны циркония

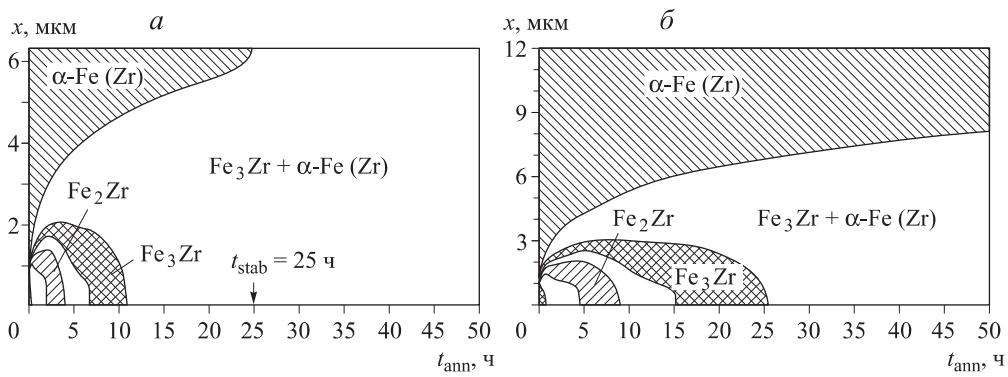


Рис. 5. Координаты  $x$  межфазных границ в зависимости от времени  $t_{\text{анн}}$  изотермического отжига в слоистых бинарных системах:  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)– $\text{Zr}$  (2 мкм) (а) и  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)– $\text{Zr}$  (2 мкм) (б)

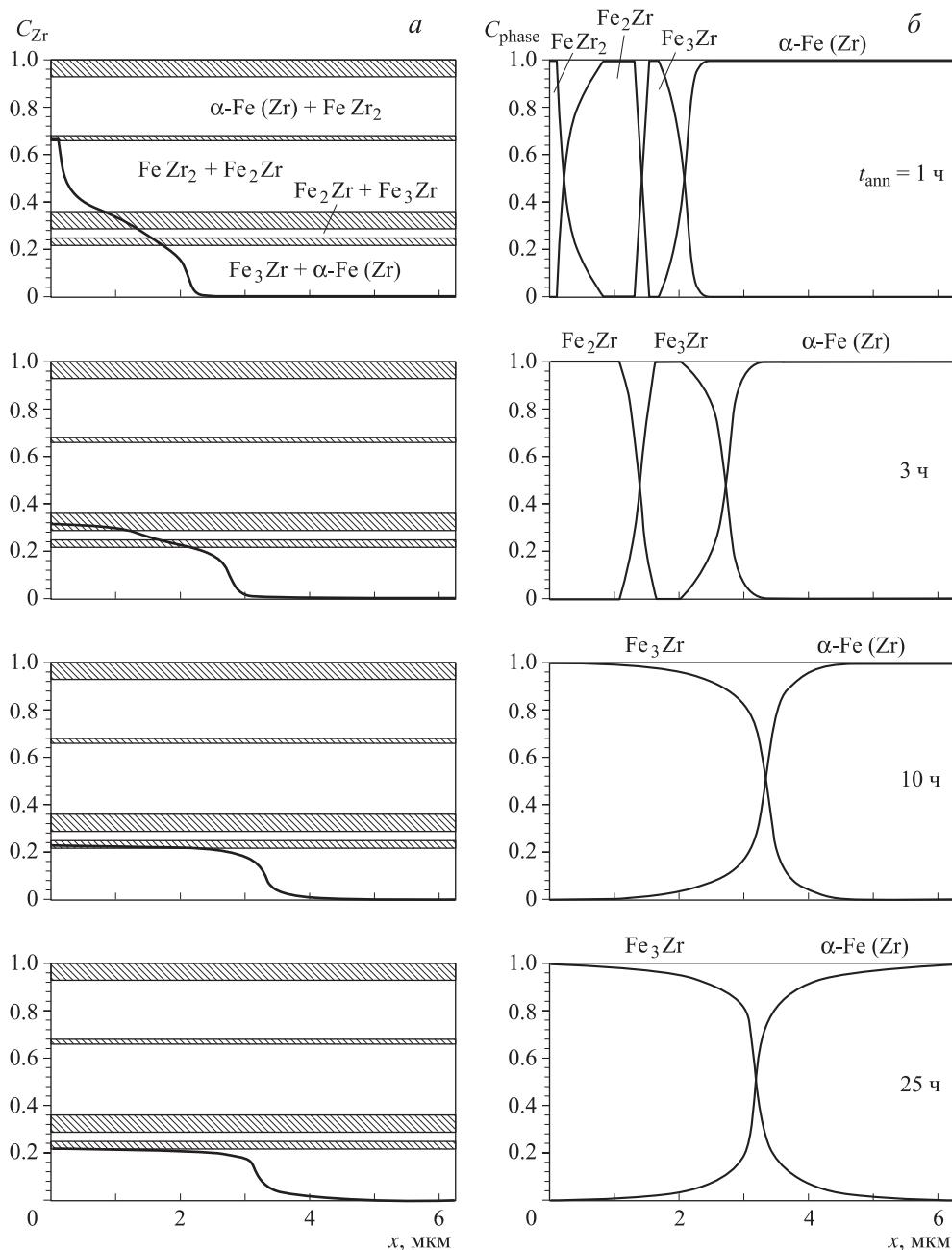


Рис. 6. Концентрационные профили атомов  $\text{Zr}$  по глубине слоистой системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)– $\text{Zr}$  (2 мкм) на различных этапах последовательного изотермического отжига

обо всем объеме образца. Следовательно, система  $\alpha$ -Fe (5 мкм)-Zr (2 мкм) остается слоистой на всех этапах изотермического отжига. Результаты теоретических расчетов (рис. 2, б) отражают основные особенности изменения относительных интенсивностей дифракционных рефлексов фаз, полученных экспериментально (рис. 2, а).

Зависимости относительных интенсивностей  $I_{MS}$  парциальных мёссбауэровских спектров и относительных интенсивностей  $I_{X-ray}$  рентгеновских рефлексов образующихся фаз от времени  $t_{ann}$  изотермического отжига для слоистой системы  $\alpha$ -Fe(10 мкм)-Zr(2 мкм) представлены на рис. 3, а и 4, а. Как следует из рисунков, последовательность фазообразования в системе  $\alpha$ -Fe (10 мкм)-Zr (2 мкм) такая же, как и в системе

$\alpha$ -Fe (5 мкм)-Zr (2 мкм), но при других соотношениях и временах существования фаз (рис. 1, а, б). После ~20 ч отжига в обеих системах присутствуют в основном только интерметаллид  $Fe_3Zr$  и твердый раствор  $\alpha$ -Fe(Zr), при этом их соотношение при дальнейшем отжиге, как для системы  $\alpha$ -Fe (5 мкм)-Zr (2 мкм), так и для системы  $\alpha$ -Fe (10 мкм)-Zr (2 мкм) остается практически неизменным. Различие в этих соотношениях для обеих систем соответствует различию в толщине подложек из  $\alpha$ -железа при одинаковой толщине напыленных слоев циркония.

Хорошее согласие на всех этапах изотермического отжига результатов расчета с экспериментальными данными, полученными с помощью мёссбауэрской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии, позволяет

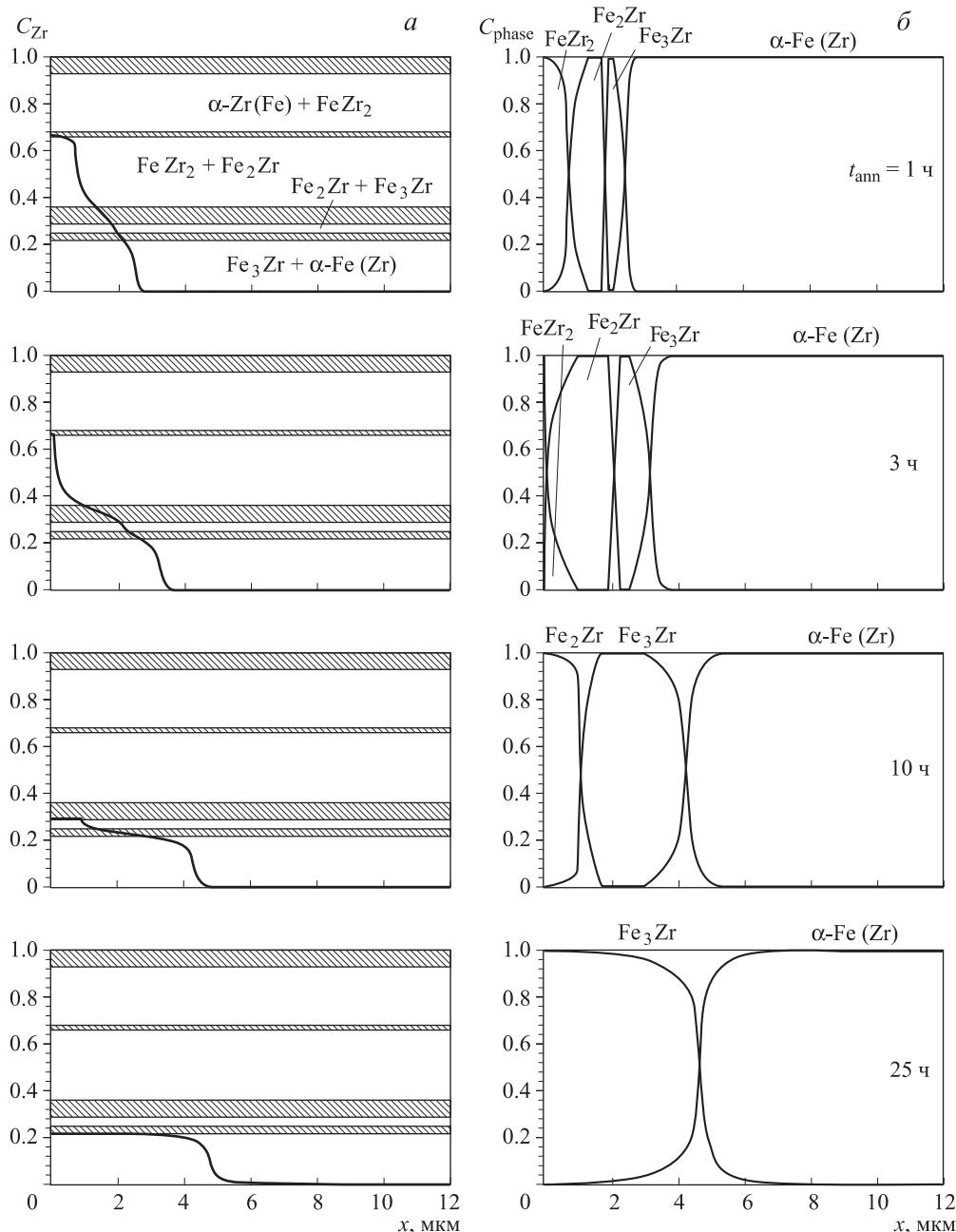


Рис. 7. Концентрационные профили атомов Zr по глубине слоистой системы  $\alpha$ -Fe (10 мкм)-Zr (2 мкм) на различных этапах последовательного изотермического отжига

считать, что результаты расчетов и других физических величин, описывающих кинетику процессов диффузии и фазообразования, близки к реальным значениям. В частности, это координаты границ образующихся фаз  $x$  с двухфазными областями (рис. 5) в зависимости от времени отжига  $t_{\text{ann}}$  и концентрационные профили циркония  $C_{\text{Zr}}(x)$  и фаз  $\text{phase}(x)$  по глубине на всех этапах отжига (рис. 6 и 7).

Из рис. 5 следует, что в начале отжига границы всех фаз появляются из межслойной области систем. В системе  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) (рис. 5, а) граница однофазной области интерметаллида  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  с двухфазной областью  $\text{FeZr}_2 + \text{Fe}_2\text{Zr}$  уже при 2 ч отжига достигает поверхности, а в системе  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) — при  $t_{\text{ann}} = 4$  ч. Однофазная область существования  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  пропадает в случае первой системы при 11 ч, а в случае второй — после 25 ч. Расчет показывает, что система  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) достигает состояния термической стабилизации при 25 ч отжига, когда координата границы фазы  $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$  достигает граничного значения и вся слоистая система становится двухфазной. В этом состоянии слоистая система неоднородна по глубине — со стороны покрытия образуется в основном интерметаллид  $\text{Fe}_3\text{Zr}$ , а со стороны подложки — насыщенный раствор  $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$  (рис. 6, б). В отличие от системы  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) координата границы фазы  $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$  для системы  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) не достигает граничного значения даже после 50 ч (рис. 5, б). Это означает, что состояния стабилизации в этой системе в ходе проведения эксперимента не наблюдалось. Расчет показал, что система  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) достигнет состояния стабилизации при временах отжига, превышающих 150 ч.

Из рис. 6 и 7 видно, что на начальном этапе отжигов обеих слоистых систем термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования идут достаточно быстро. В то же время в обеих системах еще до достижения состояния стабилизации, когда остаются только две фазы — интерметаллид  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  и раствор  $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$ , относительное содержание фаз меняется очень медленно (см. рис. 1-4). Это обусловлено тем, что скорость диффузии и фазообразования в системах определяется величиной взаимного коэффициента диффузии, который зависит от локальной концентрации и парциальных коэффициентов диффузии компонентов (см. (2)). На начальном этапе отжига, когда образуются фазы  $\text{FeZr}_2$ ,  $\text{Fe}_2\text{Zr}$  и  $\text{Fe}_3\text{Zr}$  с достаточно большим содержанием Zr, в соответствии с (2) скорости процессов определяются в основном парциальным коэффициентом диффузии железа в цирконии  $D_{\text{FeZr}}$ , который в десятки раз превышает парциальный коэффициент диффузии циркония в железе  $D_{\text{ZrFe}}$ . На последующих этапах отжига концентрация атомов Zr в однофазных областях системы становится малой, и в соответствии с (2) взаимный коэффициент диффузии определяется в основном существенно меньшим по величине парциальным коэффициентом диффузии циркония в железе  $D_{\text{ZrFe}}$ .

## Заключение

Проведено моделирование термически индуцированных процессов в слоистых бинарных металлических системах  $\alpha\text{-Fe}$  (5 мкм)-Zr (2 мкм) и  $\alpha\text{-Fe}$  (10 мкм)-Zr (2 мкм) при последовательных изотермических отжигах в рамках физической модели, в основе которой лежат феноменологическая теория Даркена и механизм взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы. Результаты моделирования хорошо описывают экспериментально установленные последовательности фазовых превращений, в том числе процесс термической стабилизации, а также относительное содержание интерметаллидов на всех этапах термического отжига. Согласие численных расчетов с экспериментальными данными, полученными методами мёссбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии, указывает на то, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах в соответствии с предложенкой физической моделью определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их взаимной диффузии и соответствует особенностям фазовой диаграммы равновесных состояний бинарной системы Fe-Zr.

## Список литературы

1. Kadyrzhanov K.K., Rusakov V.S., Turkebaev T.E. et al. // Нур. Intern. 2002. **141-142**, N 1-4. P. 453.
2. Кадыржанов К.К., Керимов Э.А., Плаксин Д.А. и др. // Поверхность. 2003. № 8. С. 74.
3. Сергеева Л.С., Верещак М.Ф., Манакова И.А. и др. // Вестн. НЯЦ РК. 2006. № 4. С. 28.
4. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркебаев Т.Э. // Физика металлов и металловедение. 2007. **104**, № 4. С. 387.
5. Аргынов А.Б., Жубаев А.К., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. // ФММ. 2008. **105**, № 2. С. 182.
6. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркебаев Т.Э. // Изв. РАН. 2005. **69**, № 10. С. 1482.
7. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркебаев Т.Э. и др. // Поверхность. 2006. № 1. С. 33.
8. Kadyrzhanov K.K., Rusakov V.S., Turkebaev T.E. // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. **18**. P. 4113.
9. Даркен Л.С., Гурри Р.В. Физическая химия металлов. М., 1960.
10. Гуров К.П., Карташkin Б.А., Угасте Ю.Э. Взаимная диффузия в многофазных металлических системах. М., 1981.
11. Диаграммы состояния двойных металлических систем: Справочник: В 3 т. Т. 2. / Под общ. ред. Н. П. Лякишева. М., 1997.
12. Кубашевский О. Диаграммы состояния двойных систем на основе железа. М., 1985.
13. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Структура и свойства металлов и сплавов. Диффузия в металлах и сплавах. Киев, 1987.
14. Авдюхина В.М., Батсурь Д., Зубенко В.В. и др. Рентгенография: Спецпрактикум / Под общ. ред. А. А. Канцельсона. М., 1986.

**Simulation of diffusion and phase formation processes during isothermal annealings of lamellar systems Fe–Zr**

**V. S. Rusakov<sup>1,a</sup>, I. A. Sukhorukov<sup>1,b</sup>, A. M. Zhankadamova<sup>2</sup>, K. K. Kadyrzhanov<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Department of General Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*

<sup>2</sup>*Institute of Nuclear Physics, National Nuclear Center of the Republic of Kazakhstan, Ibragimova str. 1, Almaty 050032, Republic of Kazakhstan.*

*E-mail:* <sup>a</sup>*vsrusakov@physics.msu.ru,* <sup>b</sup>*iasias@mail.ru.*

Results of the simulation of diffusion and phase formation processes during sequential isothermal annealing of lamellar systems Fe–Zr are presented. The simulation is conducted using a physical model, based on the Darken phenomenological theory and on the mechanism of mutual diffusion of components along the continuous diffusion channels of phases in the two-phase regions of the system. The results of the simulation agree well with the experimental data, obtained by the methods of Mössbauer spectroscopy and X-ray diffraction, indicating that the character of phase formations in the investigated lamellar systems is determined by changes of local concentration of components in the process of mutual diffusion and conforms to the features of the equilibrium phase diagrams of the binary system.

**Keywords:** layered binary metal system, diffusion, phase formation, simulation, Mössbauer spectroscopy.

**PACS:** 66.10.cg, 63.22.Np.

*Received 22 September 2010.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 2(2011).

**Сведения об авторах**

1. Русаков Вячеслав Серафимович — докт. физ.-мат. наук, профессор, профессор; тел.: (495) 939-23-88, e-mail: rusakov@phys.msu.ru; vsrusakov@physics.msu.ru.
2. Сухоруков Иван Андреевич — аспирант; тел.: (495) 939-23-88, e-mail: iasias@mail.ru.
3. Жанкадамова Акторгын Магишатовна — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. ИЯФ НЯЦ РК; e-mail: aktorgyn@mail.ru.
4. Кадыржанов Кайрат Камалович — докт. физ.-мат. наук, профессор, ген. директор НЯЦ РК; тел. +7(327) 254-56-60, e-mail: kadyrzhhanov@nnc.kz.