

ФРАГМЕНТАРНАЯ МОДЕЛЬ И АТОМНАЯ СТРУКТУРА АМОРФНОГО СПЛАВА $Al_{83}Ni_{10}La_7$

К. Б. Алейникова*, А. А. Змейкин**

* Воронежский государственный университет

** Воронежский государственный технический университет

Поступила в редакцию 09.03.2009 г.

Аннотация. Применение фрагментарной модели к анализу атомной структуры сплава $Al_{83}Ni_{10}La_7$ показал, что аморфная составляющая данного состава состоит преимущественно из фрагментов структур чистого Al и двух интерметаллических соединений Ni_3Al , Al_2La .

В сплаве $Al_{83}Ni_{10}La_7$, полученном быстрой закалкой из расплава на вращающемся барабане-холодильнике, наряду с аморфной фазой, присутствует и кристаллическая фаза — $Al_{11}La_3$.

Ключевые слова: аморфный сплав, дифракция рентгеновских лучей, фрагментарная модель, фазовый анализ.

Abstract. Fragmentary model was used to analysis of the atomic structure of $Al_{83}Ni_{10}La_7$ alloy. It was shown that amorphous component of this structure consists of pure Al and two intermetallic compounds — Ni_3Al and Al_2La . $Al_{11}La_3$ crystal and amorphous phases were found in this matter, obtained by fast hardening in a rotating barrel.

Key words: Amorphous alloy, fragmentary model, X-rays diffraction, phase analysis.

ВВЕДЕНИЕ

Аморфные сплавы (АС) обладают особыми, по сравнению с обычными, свойствами, которые значительно расширяют сферу их применения.

Атомную структуру аморфных металлов обычно моделируют с помощью метода случайных плотных упаковок, который не позволяет обнаружить в аморфной фазе структурные фрагменты каких-либо интерметаллических соединений. Найти структурные фрагменты интерметаллидов в сплаве можно только с помощью фрагментарной модели, основные положения которой изложены в [1, 2].

В данной статье приведены результаты анализа атомной структуры аморфной составляющей металлического сплава состава $Al_{83}Ni_{10}La_7$ с помощью фрагментарной модели.

Фрагментарная модель позволяет анализировать любые многокомпонентные аморфные вещества. Преимущество этой модели в том, что при построении модельной функции радиального распределения атомов (ФРРА) не используются параметры экспериментальной ФРРА. Модельные ФРРА рассчитывают с использованием полных кристаллоструктурных данных

кристаллического аналога. В данном методе моделирования структуру аморфного сплава $Al_{83}Ni_{10}La_7$ представляют в виде мозаики, состоящей из фрагментов структур кристаллических фаз, образование которых возможно при данном элементном составе.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Аморфный сплав (АС) состава $Al_{83}Ni_{10}La_7$ был получен быстрой закалкой из расплава на вращающемся барабане-холодильнике. Скорость закалки превышала 10^6 К/сек. Исследуемый образец представлял собой толстую (40—45 мкм) фольгу, шириной 3 мм. Фольгу закрепляли с помощью очень тонкого слоя клея БФ-2 на пластине монокристаллического кремния, вырезанной таким образом, чтобы она не давала ни одного отражения во всем интервале углов поворота рентгеновского дифрактометра. Пластины кремния с образцом для исследования помещали в кювету модернизированной установки ДРОН-3М. Кривую интенсивности $I(2\theta)$ получали с пошаговой регистрацией в интервале по 2θ от 8 до 140° , шаг 0.2° по 2θ , время накопления импульсов 20—30 сек. Использовалось $Cu K_\alpha$ излучение с монохроматором LiF на вторичном луче. В экспериментальную кривую интенсивности вводили поправку

на поляризацию с помощью множителя $P(2\theta) = (1 + \cos^2 2\alpha \cdot \cos^2 2\theta) / 2$, где α — угол отражения монохроматора LiF. Формульным составом считали весь состав сплава $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$. Для выявления всех особенностей тонкой структуры кривой интенсивности съемку проводили не менее трех раз для каждого образца.

На кривой $I(2\theta)$, полученной с образца $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$, наряду с аморфной фазой наблюдаются три хорошо выраженные дифракционные линии поликристаллической фазы (рис. 1). Анализ межплоскостных расстояний дифракционных линий показал, что наиболее вероятной фазой является $\text{Al}_{11}\text{La}_3$ [3]. Обработку кривой интенсивности аморфной фазы проводили по методу, предложенному в [4]. При об-

работке кривой интенсивности, поликристаллические линии исключали. Полученную интенсивность аморфной фазы масштабным коэффициентом N приводили к построенной по табличным данным функции $\sum f_i^2(s)$. Суммирование проводили по всему формульному составу. Проведение средней линии функции $I(s) / \sum f_i^2(s)$ [5] позволило устранить рассеивание независимыми атомами и фон. Полученная интерференционная функция $i(s)$ приведена на рис.2.

За единицу рассеивания принимали рассеивание самым легким атомом данного состава — алюминием. Относительные рассеивающие способности атомов и единичную атомную амплитуду определяли в соответствии с [5].

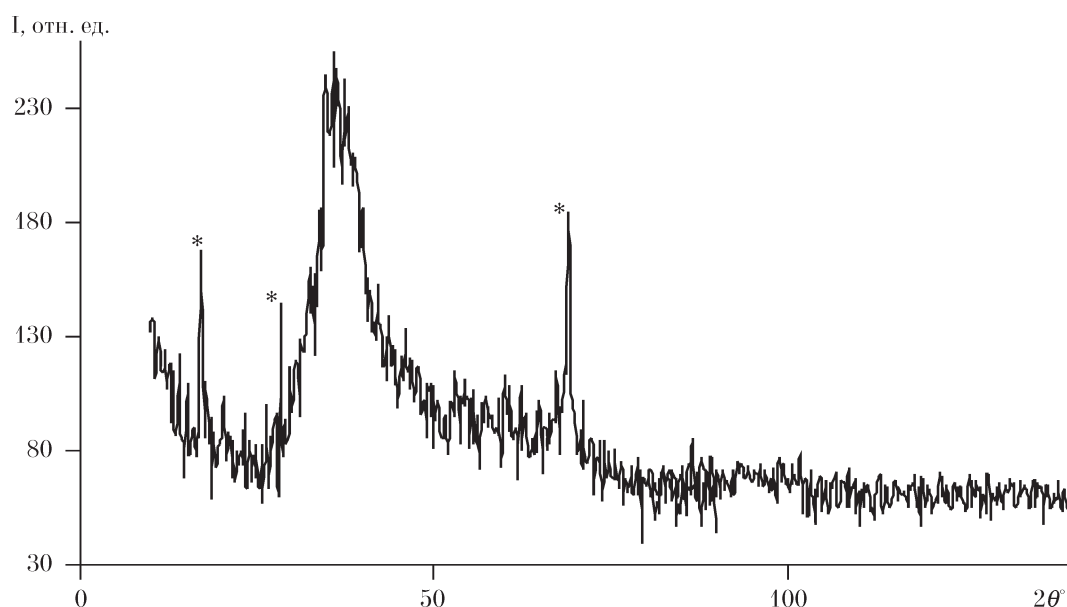


Рис. 1. Диффрактограмма $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$

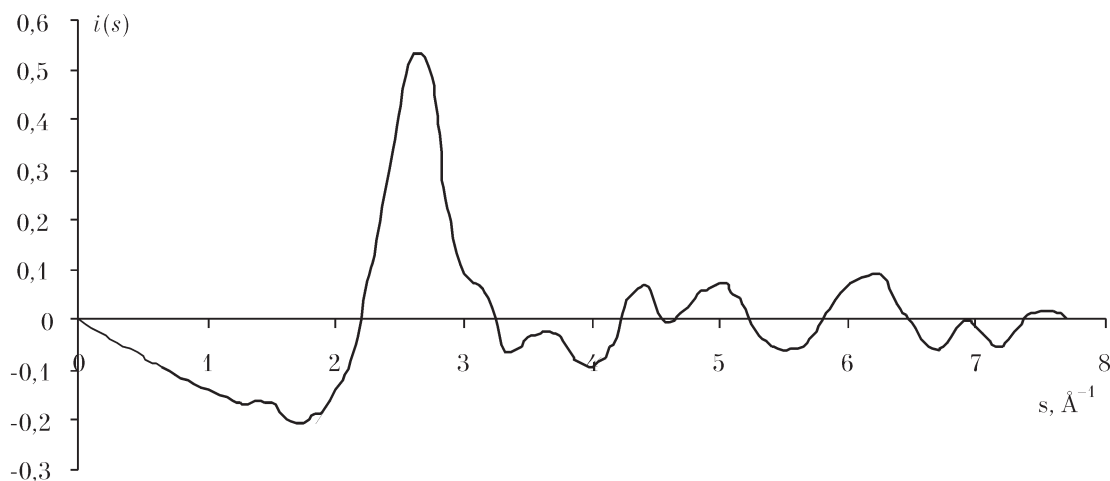


Рис. 2. Интерференционная функция

Учет тонкой структуры диффузных максимумов позволил получить экспериментальную функцию радиального распределения атомов (ФРРА) с упорядочением до 1 нм (рис. 3).

Максимумы данной функции соответствуют наиболее вероятным межатомным расстояниям в сплаве $Al_{83}Ni_{10}La_7$, а площади под ними пропорциональны числу атомов находящихся на данном расстоянии от атома, принятого за начальный. На экспериментальной ФРРА отчетливо видны 9 максимумов. Первый широкий максимум состоит из двух неразрешенных, положения которых примерно $r_1 \sim 2.6 \text{ \AA}$ и $r_2 \sim 3.2 \text{ \AA}$. Остальные максимумы четкие, их положения: $r_3 \sim 4.8 \text{ \AA}$, $r_4 \sim 5.37 \text{ \AA}$, $r_5 \sim 6.41 \text{ \AA}$, $r_6 \sim 7.6 \text{ \AA}$, $r_7 \sim 8.55 \text{ \AA}$, $r_8 \sim 9.32 \text{ \AA}$, $r_9 \sim 10.31 \text{ \AA}$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

ФРРА сплава, который на 83 атомных процента состоит из алюминия, должна содержать в себе межатомные расстояния чистого алюминия. Однако положение уже первого (раздвоенного) максимума ($r \sim 2.6 \text{ \AA}$ и $r \sim 3.2 \text{ \AA}$) экспериментальной ФРРА не соответствует первому максимуму модельной ФРРА чистого алюминия ($r \sim 2.9 \text{ \AA}$) (рис. 2). Это может указывать на присутствие в сплаве фрагментов структуры интерметаллических фаз. Для интерпретации экспериментальной ФРРА были построены модельные ФРРА всех известных нам кристаллических фаз, включающих в свой состав Al, Ni, La, как-то: $AlNi_3$, Al_2La , $LaAl_4$, $AlLa$, $AlNi$, $AlNi_3$ и даже $AlLa_3$ и $Al_{11}La_3$. Структурные данные были представлены институтом металлургии и материаловедения имени

А. А. Байкова РАН. На большинстве модельных ФРРА, построенных по кристаллоструктурным данным соединений алюминия с лантаном, радиус первой координационной сферы больше, чем на экспериментальной ФРРА сплава и на модельной ФРРА алюминия (2.9 \AA). Меньше, чем у алюминия радиусы первых координационных сфер были на модельных ФРРА, построенных по кристаллоструктурным данным соединений алюминия с никелем. Дальнейший анализ показал, что в аморфном сплаве присутствуют фрагменты структуры интерметаллида Ni_3Al . Радиус первой координационной сферы на его модельной ФРРА $r \sim 2.6 \text{ \AA}$ соответствует положению первого максимума экспериментальной ФРРА. Его присутствие также подтверждает положение третьего максимума экспериментальной ФРРА и остальные максимумы модельной ФРРА, построенной по полным кристаллоструктурным данным Ni_3Al , хорошо вписываются в соответствующие максимумы эксперимента. Следовательно, можно предположить наличие в образце структурных фрагментов Ni_3Al . Имеющееся смещение второго максимума экспериментальной ФРРА, по отношению к модельной ФРРА, построенной на основе полных кристаллоструктурных данных Al, в сторону больших межатомных расстояний, дало возможность предположить о присутствии в сплаве структурных фрагментов еще одного интерметаллида. Сравнив все полученные модельные ФРРА с экспериментом, решили, что в исследуемом аморфном сплаве наиболее вероятно присутствие фрагментов структуры интерметаллида Al_2La . На (рис. 4) показано,

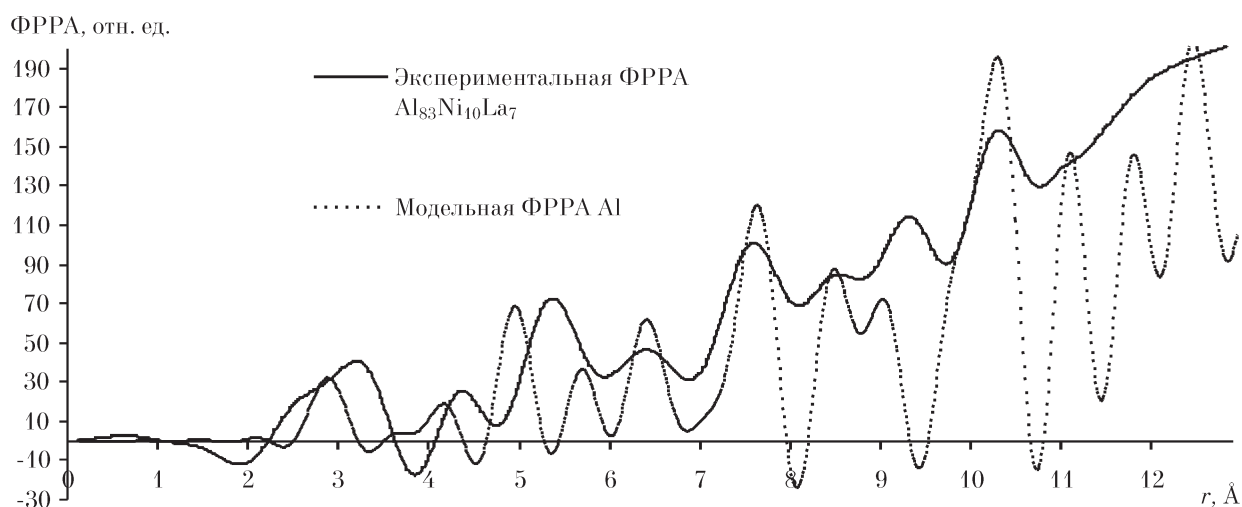
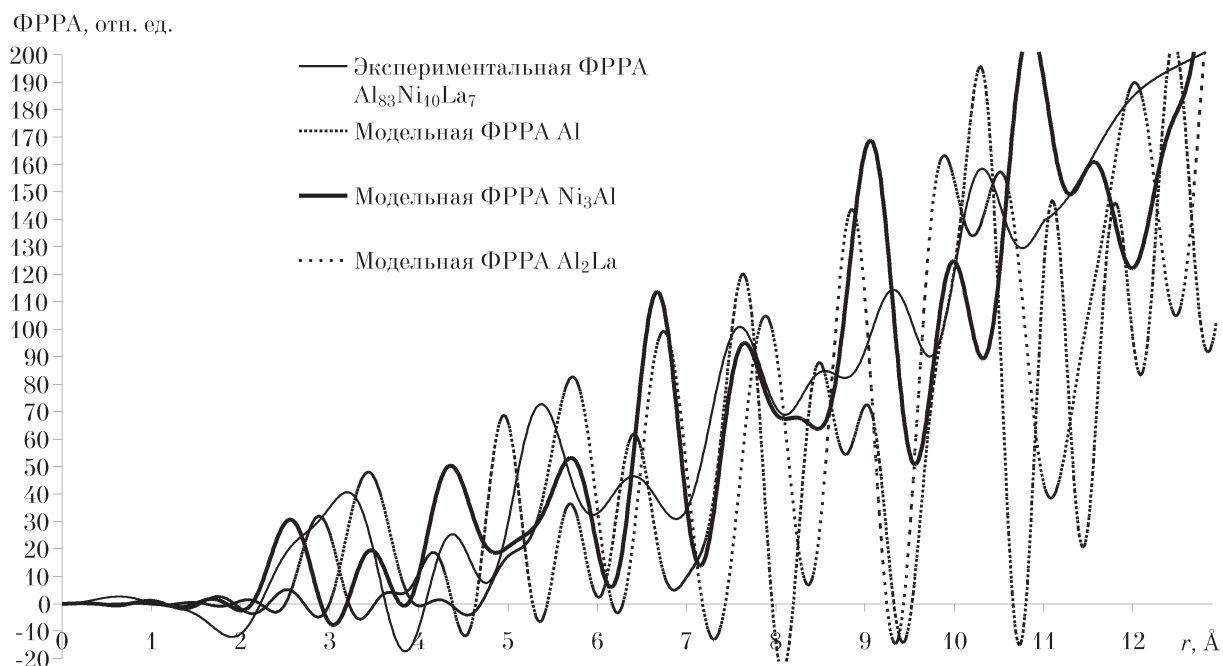


Рис. 3. ФРРА $Al_{83}Ni_{10}La_7$ и модельная ФРРА алюминия

Рис. 4. Экспериментальная ФРРА $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$ и модельные ФРРА.

что именно суперпозиция модельных ФРРА, построенных на основе полных кристаллоструктурных данных Al, Ni_3Al и Al_2La после приведения их к одному усредненному атому и к рентгеновской плотности Al, способна объяснить наличие всех максимумов экспериментальной ФРРА во всей области упорядочения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной статье показано, что применение фрагментарной модели для анализа структуры аморфного сплава $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$ позволило установить наличие в нем структурных фрагментов интерметаллических фаз. Основной вклад в формирование первых четырех максимумов экспериментальной ФРРА вносят интерметаллиды. Высшие координационные сферы в основном образованы межатомными расстояниями, свойственными чистому алюминию. Это дает возможность предположить, что образование интерметаллических соединений в аморфном сплаве $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$ на основе алюминия идет в областях не превышающих 1 нм.

Ранее данный метод применялся к соединениям с преимущественно ковалентными связями. Впервые данный метод применен к анализу структуры металлического сплава. Его применение позволило установить, что в сплаве со-

става $\text{Al}_{83}\text{Ni}_{10}\text{La}_7$, полученного быстрой закалкой из расплава на вращающемся барабане — холодильнике, в аморфной фазе присутствуют фрагменты Al, Ni_3Al , Al_2La , а в кристаллической фазе — $\text{Al}_{11}\text{La}_3$.

Авторы благодарят доктора химических наук В.В. Вавилову за предоставление образцов и инженера ЦКПНО ВГУ Е. Н. Зинченко за помощь в рентгендифракционных исследованиях, предоставление расчетных программ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Алейникова К.Б. Дифракционные методы анализа нанодисперсных материалов / К. Б. Алейникова, Е. Н. Зинченко, Н. И. Лихач // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. — 2005. — Т. 71. — № 4. — С. 27–31.
2. Алейникова К.Б. Идентификация фаз в тонких аморфных пленках фосфидов цинка / К. Б. Алейникова, Е. Н. Зинченко, М. В. Лесовой // Кристаллография. — 2007. — Т. 52. — № 2. — С. 354–358.
3. Карточка ICDD. — № 24-0501.
4. Набитович И.Д. Определение когерентной интенсивности и интенсивности фона по экспериментальной кривой рассеяния электронов / И. Д. Набитович, Я. И. Стецев, Я. В. Волощук // Кристаллография. — 1967. — Т. 12. — № 4. — С. 584–590.
5. Вайнштейн Б.К. К теории метода радиального распределения / Б. К. Вайнштейн // Кристаллография. — 1957. — Т. 2. — № 1. — С. 29–37.

Алейникова Ксения Борисовна — к.ф.-м.н., доцент кафедры физики твердого тела и наноструктур ВГУ; тел.: (4732) 208-805, e-mail: zmeykin@list.ru.

Змейкин Алексей Анатольевич — аспирант кафедры физики металлов ВГТУ; тел (4732) 461-379, e-mail: zmeykin@list.ru.

Aleynikova K.B. — the candidate of physical and mathematical sciences, associate professor of the department of solid state physics and nanostructures of the VSU.

Zmeykin A.A. — post-graduated student of the physics of metals department of the VSTU.