

Rendezett és rendezetlen atomstruktúrák fémötvözetekben

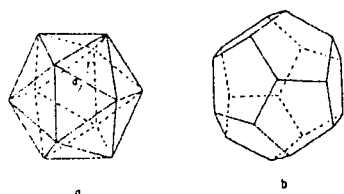
Zsoldos Ibolya*, Dr. Janik József*, Dr. Szász András*

Bevezetés

A fémötvözetek között megkülönböztetünk rendezett és rendezetlen atomstruktúrájú osztályokat. A rendezett struktúrák mindig specifikálhatók egyetlen rácsméret és egy elemi cellán belüli elrendeződés, legtöbbször csak egy koordinációs poliéder** periodikus ismétlésével. Ilyenek pl. a térközepes és lapközepes köbös, valamint a hexagonális rácsszerkezetű fémek és ötvözetek. A rendezetlen struktúráknak (pl. túlhűtött folyadékok, fémüvegek, csiszolati makrostruktúrák) ilyen egyszerű megadási módja nem lehetséges. Ebben a cikkben rendezetlen struktúrák alkalmasan választott paraméterek segítségével történő leírásának egy lehetőségét mutatjuk meg.

A rendezetlenség eredete

Az atomok elrendeződését két alapvető kényszer alakítja. Az egyik a térkitöltési kényszer, az ún. hosszú távú rend, amelynek ismert képviselői a köbös és hexagonális rácsszerkezetek. A másik az energetikai kényszer, az ún. rövidtávú rend, amelynek jellemző koordinációs poliédere az ikozaéder: 20db közös csúcsban illeszkedő tetraéder, amely energetikailag stabilabb, mint a köbös cellák, de nem lehet vele párhuzamos eltolással kitölteni a teret.



1. ábra
a: ikozaéder és
b: Voronoi
sejtje: a
dodekaéder

Ikozaéderek létezésének bizonyítékai pl. a Frank-Kasper fázis ötvözetek. A két kényszer

* Gödöllői Agrártudományi Egyetem, Mezőgazdasági Gépészmérnöki Kar

** Ha az atomokat pontszerűnek tekintjük, akkor egy atom közvetlen szomszédjai lesznek a koordinációs poliéder csúcspontjai.

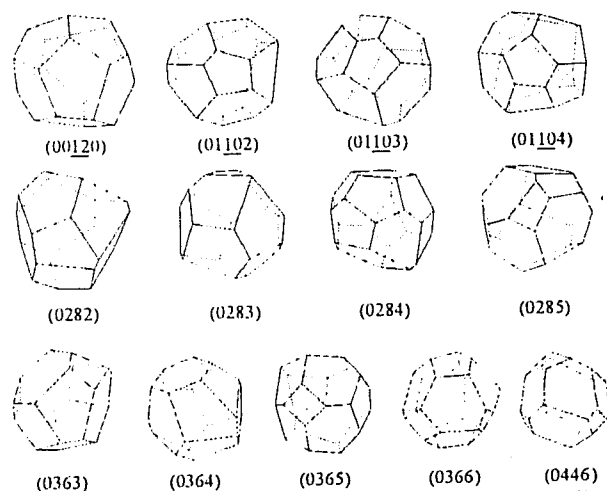
*** Egy atom közvetlen szomszédjainak száma a koordinációs szám.

ellentétes hatású, amely az atomok számára ún. geometriai frusztrációt okoz, s innen ered a rendezetlen struktúrák kialakulása [1].

Rendezetlen struktúrák modellje

A Voronoi vagy Wiegner-Seitz poliéder ill. sejt minden atom köré megszerkeszthető úgy, hogy az atom és a közvetlen szomszédjai között páronként kifeszített felezősíkok metszéspontjait tekintjük a poliéder, sejt csúcspontjainak. Ahány közvetlen szomszédja van egy atomnak, annyi oldallapja van a Voronoi sejtjének [1], a két duál rendszer vizsgálata tehát egyenértékű.

Modellünkben egy kockában elhelyezett 100 db atom Voronoi sejtrendszerét állítottuk elő. A kocka oldallapjainál a kristályos szilárdtestek Born-Karman határfeltételeit alkalmaztuk [2]. Ilyen módon a minden irányban translációsan ismétlődő kockák egy végtelen mintázatot képeznek. A 2. ábrán a leggyakoribb Voronoi sejteket mutatjuk.



2. ábra A leggyakoribb Voronoi sejték. Zárójelben a Schläfli szimbólumok [3].

A Voronoi algoritmusra készített számítógépes programunk számára egyetlen adathalmaz bevitele szükséges: a pontszerűnek tekintett atomok, koordinátái. Ezeket először véletlenszerűen adtuk meg

(Random módszer), ezután a következő relaxációs módszereket vezettük be:

Merev-gömb módszer: az atomok nem kerülhetnek egymáshoz egy bizonyos távolságnál közelebb. E módszer két változatára hivatkozunk: Merev-gömb1 ahol a megengedett távolság nagyobb, és Merev-gömb2 ahol a megengedett távolság kisebb.

Súlypont módszer: véletlen kijelölés után az atomokat áthelyeztük a sejt (poliéder) súlypontjába, majd újraszámoltuk a csúcsok koordinátáit, s ezt az eljárást néhány iterációs lépésen keresztül megismételtük.

Potenciális módszer: feltételeztük, hogy az atomok közötti potenciáletteret a Lennard-Jones

$$\text{potenciál írja le: } U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{R_0}{r} \right)^{-12} - 2 \left(\frac{R_0}{r} \right)^{-6} \right],$$

ahol r két atom távolsága, R_0 a potenciál minimumhoz tartozó távolság [1].

Véletlen kijelölés után a függvényre alkalmazott gradiens módszerrel számítottuk az atomok helyét. Az iteráció pontosságától függően ezt is két esetre választottuk szét: Potenciál1 a pontosabb és Potenciál2 a durvább közelítést jelenti. Ezzel a módszerrel az energetikai kényszert alkalmaztuk modellünkre.

Eredmények

A következő paramétereket számítottuk: $\langle F \rangle$ a sejtrendszer átlagos oldallapszáma, ekvivalens az átlagos koordinációs számmal*** [1], amely azt mutatja, milyen sűrű a pakolás az atomstruktúrában. Az ún. 2. momentum: $\mu_2 =$

$$\sum_{i=3} \left(\langle F \rangle - i \right)^2 P(i), \text{ ahol } P(i) \text{ az } i\text{-oldalú}$$

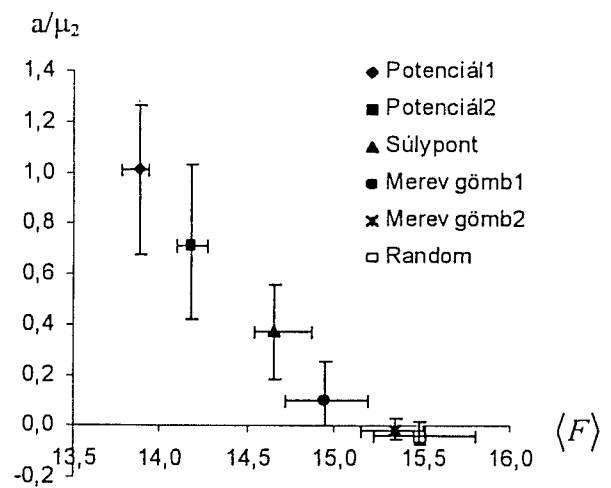
poliéderek aránya a rendszerben. μ_2 az átlagos koordinációs szám körüli szórásnak felel meg, tehát a rendezetlenség mértékét fejezi ki [4]-[6]. Az ún. korrelációs vagy kollektivitási paraméter:

$$a = \langle F \rangle - \frac{\sum_{i=3} (i - \langle F \rangle) i m(i)}{\sum_{i=3} (i - \langle F \rangle) i}, \text{ ahol } m(i) \text{ az } i\text{-oldalú}$$

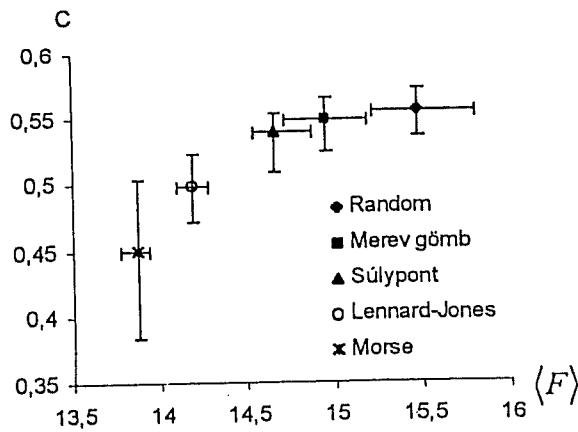
poliéderek közvetlen szomszédjainak átlagos oldalélszáma a rendszerben. Korábbi

tapasztalatok és számításaink szerint is egy sejtrendszerben általában antikorreálált sejtek kapcsolódása jellemző (átlagosnál kisebb oldalszámú mellett átlagosnál nagyobb oldalszámú sejt), ennek a korrelációnak a mértékét mutatja az 'a' paraméter [4]-[7]. Végül bevezettünk egy C , ún. kristályosodási paramétert, amelynek számítási módja: sejtenként számoljuk a 3, 4 és a hatszög alakú oldallapok arányát, ezeknek rendszerre átlagolt értéke C . Indoklás: a köbös elemi cellák Voronoi sejtjeit 3, 4 és hatszögek alkotják, tehát C a hosszú távú rend hatását, másképpen a kristályosodás fokát mutatja.

Módszerenként 10, összesen 60 számítógépes futtatás eredményei szerint a négy paraméter az alábbi intervallumokban vesz fel értékeket: $13,78 < \langle F \rangle < 15,8$, $0,87 < \mu_2 < 14,15$, $1,15 < a < 1,57$, $0,38 < C < 0,57$. Az ismertett relaxációs módszerekkel a paraméterek változását az intervallumokban folytonosan tudtuk követni. Relaxált rendszereknél $\langle F \rangle$, μ_2 és C értéke kisebb, 'a' értéke nagyobb, azaz a struktúrában az atomok pakolása sűrűbb, a rendezetlenség mértéke kisebb, a kristályosodási arány csökken és az antikorreálációs elrendeződés jellemzőbb. A paraméterek nem vehetnek fel egymástól függetlenül értékeket, a/μ_2 és $\langle F \rangle$ valamint C és $\langle F \rangle$ kapcsolatát mutatjuk a 3. és 4. ábrán.



3. ábra a/μ_2 és $\langle F \rangle$ kapcsolata



4. ábra C és $\langle F \rangle$ kapcsolata

Konklúziók

A rendezetlen atomstruktúrákat topológiai, 4 paraméter segítségével sikerült leírni, ezek: átlagos koordinációs szám, második momentum, korrelációs- és kristályosodási paraméter. Ezek a számok egy rendszerre nézve állandók, de rendszerenként más-más értékeket vesznek fel. Értékkészletük meghatározott, egymástól nem függetlenek.

Paraméteres leírásunk nemcsak rendezetlen atomstruktúrák, hanem más véletlen sejtrendszerek – fémek és fémötvözetek szemcseszerkezete, biológiai szövetek, habok – leírására is alkalmas.

IRODALOM

- [1] M.V.Jaric: Introduction to Quasicrystals Chap.1,2.,1988.
- [2] W.H.Butler-W.Kohn: NBS Spec. Publ. 323:465, 1971.
- [3] V.S.Stepanyuk-A.Szász-A.A.Katsnelson -O.S.Trushin-H.Müller: J. Non-Cryst. Solids 159: 80-87, 1993.
- [4] D.A.Aboav: Metallography 16: 265-273, 1983.
- [5] M.A.Fortes: J.Phys.A:Math. 28:1055-1068, 1995.
- [6] B.Dubertret - N.Rivier - M.A.Peshkin: J.Phys.A:Math. 31:879-900, 1998.
- [7] I.Zsoldos - A.Szász: submitted to Phil.Mag.Letters, 1998.

