

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУР ГЦК РЕШЕТОК ДЛЯ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ БЛИЖНЕГО
ПОРЯДКА**

Л.Д. Баркалов, А.А. Белослудцева

Научные руководители: к. ф.-м. н. Н.Г. Бобенко, к. ф.-м. н. А.Н. Пономарёв

Томский университет систем управления и радиоэлектроники,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 40, 634050

E-mail: krakozabrik@yandex.ru

**MODELING OF STRUCTURES FCC LATTICES FOR CALCULATING THE SHORT RANGE
ORDER PARAMETERS**

L.D. Barkalov, A.A. Belosludtseva

Scientific Supervisor: PhD N.G. Bobenko, PhD A.N. Ponomarev

Tomsk University of Control System and Radioelectronics, Russia, Tomsk, Lenin str., 40, 634050

E-mail: krakozabrik@yandex.ru

***Abstract.** Program that allows to calculate the parameters of short-range order of the bcc, fcc and simple cubic lattices has been developed. The verification program was carried for the two structures (TiAl₃ and Cu₃Au). The values of the short-range order parameters for the first two coordination spheres agree with the theoretically expected values, and at the same time are different for the two studied structures. Also, the influence on the value of short range order parameters with the appearance in an ideal material short-range ordering structure was investigated. It is shown that only a change in position from 2 to 6 atoms of 108 reduces the modulus values of short range order parameters for the first and second coordination spheres at preservation its sign. This confirms that the short-range order parameter values determined by the relative location of the atoms in the structure, rather than their concentration.*

Введение. Параметр ближнего порядка определяется различными видами взаимного упорядочения в расположении атомов разного сорта на малых расстояниях. Экспериментальные и теоретические исследования, впервые проведенные еще в 1950х годах на поли- и монокристаллах Вильчинским и Каули [1,2], доказали существование ближнеупорядоченных структур в металлических сплавах и обнаружили зависимость физических свойств материалов от параметров ближнего порядка, на примере электросопротивления, эффекта Холла и ряда других. Авторы связывают такое влияние с тем, что ближний порядок приводит к изменению времени релаксации, концентрации электронов вблизи уровня Ферми, и т.д. С появлением новых наноматериалов изучение изменения параметров ближнего порядка, а, следовательно, и физических свойств кристаллических и аморфных структур при структурных перестройках является актуальным в настоящее время.

Существует ряд методик расчета параметров ближнего порядка для различных структур с автоматизированными или экспериментальными расчетами параметров ближнего порядка для двух- и трехмерных структур [3,4]. Однако, для метода, описанного в [5], который применяется в ряде практических работ [6] автоматизации расчетов до настоящего момента предложено не было. В

настоящей работе была разработана программа, позволяющая рассчитать значения параметров ближнего порядка для различных ГЦК структур согласно [5].

Материалы и методы исследования. Выражение для расчета параметра ближнего порядка в неупорядоченном твердом растворе для i -ой координационной сферы имеет вид [1]:

$$\alpha_i = 1 - \frac{p_i^{AB}}{c_B} \quad (1)$$

где p_i^{AB} - вероятность нахождения атома B на i -ой сфере около атома A , находящегося в начале координат, усредненная по всем атомам i -ой координационной сферы, c_B - концентрация атомов сорта B .

В (1) вероятность нахождения атома B на i -ой сфере около атома A описывалось выражением:

$$p_i^{AB} = \frac{N_{AB}}{N_{AB} + N_{AA} + N_{BB}} \quad (2)$$

Здесь N_{AB}, N_{AA}, N_{BB} число пар соответствующих атомов во всем кристалле. При моделировании, атомы, составляющие наибольшую концентрацию, считались атомами типа A , остальные атомы – типом B .

Основой логики программы являлось моделирование трехмерной кристаллической решетки с возможностью задания взаимного расположения атомов и их типа в ГЦК структуре. Моделировалась замкнутая кристаллическая система, в которой путем обхода всех атомов велся поиск и расчет необходимых величин для получения значения параметров ближнего порядка по (1). На первом этапе производился последовательный поиск наименьших следующих расстояний, определяемых заранее заданными структурированными векторами для всех типов решеток. Алгоритм поиска составлен с учетом первых 4 размеров радиус–векторов ОЦК, ГЦК и простых кубических решеток. Далее, с учетом выбранного расстояния осуществлялся поиск пар атомов AA, AB и BB , для получения значения вероятности нахождения атома B на определенной сфере относительно атома A во всем моделируемом кристалле. На последнем этапе проводился расчет по (1) и (2).

Результаты. Для верификации результата работы программы были выбраны структуры $TiAl_3$ и Cu_3Au со сходной концентрацией двух типов атомов (75% и 25%), но различным их расположением в ГЦК структурах. В первую очередь были проведены расчеты для идеальных сверхструктур $TiAl_3$ и Cu_3Au , так как в [1,2] представлены значения параметров ближнего порядка для случаев полного упорядочения исследуемых материалов. Расчеты проводились для различного количества элементарных ячеек от $1 \times 1 \times 1$ (4 атома) до $7 \times 7 \times 7$ (1327 атомов). Оказалось, что число атомов в области при полном упорядочении структуры не изменяет значение параметра ближнего порядка, а полученные расчетные значения для α_1 и α_2 совпадают с данными из [1,2]. Рассчитанные значения параметров ближнего порядка в этом случае для $TiAl_3$ равны -0.33 и 0.64 для первой и второй координационной сферы. Для Cu_3Au -0,33 и 1 соответственно. Полученные значения совпали с теоретическими и экспериментальными данными, приведенными в [2,5].

Изменение параметра ближнего порядка в случае появления в структуре идеального кристалла ближнеупорядоченных областей было проведено на структуре Cu_3Au . Оказалось, что при изменении местоположения двух ближайших и более атомов разного типа (от 0-6 дефектных атомов) модуль

параметра ближнего порядка уменьшается, а его знак сохраняется. Результаты этих расчетов представлены в Табл.1 для ячейки $3 \times 3 \times 3$ (108 атомов).

Таблица 1

Значения параметров ближнего порядка для 1-ой и 2-ой координационной сферы, для различного количества дефектных атомов для структуры Cu_3Au (ячейка $3 \times 3 \times 3$, 108 атомов).

Количество дефектных атомов	Значение параметра для i -ой координационной сферы	
	α_1	α_2
0	-0,333	1
2	-0.300613	0.924528
4	-0.268293	0.846154
6	-0.236364	0.764706

Заключение. Была разработана программа, позволяющая рассчитывать параметры ближнего порядка ОЦК, ГЦК и простых кубических решеток. Проведена верификация программы для двух структур (TiAl_3 и Cu_3Au). Получены значения параметров ближнего порядка для первых двух координационных сфер совпадают с теоретически ожидаемыми, и при этом оказываются различными для двух исследуемых структур. Также, проведено исследования влияния на значения параметров ближнего порядка появление в структуре идеального материала ближнеупорядоченных областей. Показано, что только изменение местоположения от 2 до 6 атомов из 108 приводит к уменьшению модуля значения параметров ближнего порядка для 1-ой и 2-ой координационных сфер при сохранении знака. Это подтверждает, что значения параметров ближнего порядка определяется взаимным расположением атомов в структуре, а не их концентрацией. В дальнейшем планируется использование функционала созданной программы для расчетов параметров ближнего порядка тонких пленок на подложке (эпитаксиального графена).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wilchinsky Z.W. X-Ray Measurement of Order in the Alloy Cu_3Au [Electronic version] // J. App. Phys. – 1944. – No. 15. – Pp. 806.
2. Cowley J.M. An Approximate Theory of Order in Alloys // Phys. Rev. – 1950. – No. 77. – Pp. 669.
3. Мирзоев А.А., Смолин Н.А., Гельчинский Б.Р. Новая методика моделирования структуры ближнего порядка бинарных неупорядоченных систем в рамках метода сильной связи // Известия Челябинского научного центра. – 1998. – № 2. – С. 21–26.
4. Садовников С.И., Ремпель А.А. Ближний порядок и парные корреляции в бинарном твердом растворе с квадратной решеткой // Физика твердого тела. – 2007. – Т.1. – № 8. – С. 1470–1474.
5. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. – М.: Наука, 1977. – 256 с.
6. Ponomarev, A. N., Egorushkin, V. E., Melnikova, N. V., Bobenko, N.G. On the low-temperature anomalies of specific heat in disordered carbon nanotubes // Physica E. – 2015. – No. 66. – Pp. 13-17.