

УДК 531.19

Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Р. Н. Ласовский

## ПОЛУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

*Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13<sup>а</sup>,  
220006 Минск, Беларусь*  
*[gbokun@mail.ru](mailto:gbokun@mail.ru), [vvikhre@mail.ru](mailto:vvikhre@mail.ru), [lasovsky@tut.by](mailto:lasovsky@tut.by)*

Известно, что при переходе от макроструктур к микроструктурам, размер которых определяется нанометровым масштабом, свойства вещества могут коренным образом изменяться. Так, например, отмечается сильная зависимость диффузионных характеристик от величины зерна в наноструктуре. В целом оказывается, что переход в наноструктурированное состояние определяет коренную перестройку материала не только в масштабном отношении, но и, прежде всего, в свойствах элементов, его образующих, характере их взаимодействия и т.д. [1]. При этом свойства наноструктур определяются не только размером кластеров, но и способами их организации и самоорганизации в нанокластерную структуру.

В данной работе с использованием основного кинетического уравнения сформулированы дифференциально-разностные уравнения эволюции поля концентрации. Для учета межчастичных корреляций используется квазихимическое приближения. Исследована возможность получения с помощью температурных и пространственных возмущений самоорганизованных структур в решеточных системах с различной глубиной потенциальных ям несущей подсистемы.

Эволюция поля концентраций  $\rho_i$  в системе исследовалась с помощью уравнения баланса числа частиц

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\sum_{j=1}^z I_{ij}, \quad (1)$$

где средний поток числа частиц через границу ячеек  $i$  и  $j$  [2]

$$I_{ij} = w_0 \left[ \exp(\beta\mu_i) - \exp(\beta\mu_j) \right] F(0_i, 0_j), \quad (2)$$

где  $\beta = 1/k_B T$  – обратная температура,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура системы,  $\mu_i$  – химический потенциал в  $i$ -м узле.

Интенсивность термоактивированных перескоков частиц при предельно низких концентрациях определяется выражением

$$w_0 = v_0 \exp(-\beta u_0), \quad (3)$$

где  $u_0$  – разность энергий потенциального рельефа несущей системы в точке перевала между узлами и в узле решетки,

Для расчета корреляционных функций и химических потенциалов, т.е. замыкания выражения (1), применялось квазихимическое приближение для неравновесных состояний. Вероятность двум соседним узлам быть вакантными (корреляционная функ-

ция) определяется выражением

$$F(0_i, 0_j) = \rho_{0i}\rho_{0j} / K_{ij}, \quad (4)$$

где  $\rho_{0i}$  – концентрация вакансий в  $i$ -м узле,

$$K_{ij} = \rho_{0j} + \rho_{1j} / \eta_{ij}, \quad (5)$$

$\rho_{1i}$  – концентрация частиц в  $i$ -м узле, а  $\eta_{ij}$  определяется как положительный корень квадратного уравнения:

$$\eta_{ij}^2 + \eta_{ij} \frac{\rho_{1j} - \rho_{0i} - W(\rho_{1i} - \rho_{1j})}{\rho_{0j}} - \frac{W_i \rho_{1j}}{\rho_{0j}} = 0, \quad (6)$$

где  $W_i = \exp(-\beta J_{ij})$ ,  $J_{ij}$  – энергия взаимодействия частиц, расположенных в узлах  $i$  и  $j$ .

Химический потенциал в произвольном узле  $i$  определяется выражением:

$$\exp(\beta \mu_i) = \frac{\rho_{1i}}{\rho_{0i}} / \prod_{j \neq i}^Z \eta_{ji}. \quad (7)$$

Система уравнений (1)–(7) решалась численно при одно- или двухмерном нарушении симметрии системы в начальный момент времени. Исследовалась эволюция поля концентрации решеточной системы с притяжением ближайших соседей при условии, что в начальный момент концентрация частиц во всей системе была постоянной и соответствовала метастабильному состоянию (значение концентрации находилось между равновесными значениями, соответствующими конденсированной и разреженной фазам). При равномерном распределении концентрации потоки числа частиц (2) через границы любых ячеек системы оказываются равными нулю. Поэтому инициация эволюционного процесса обеспечивалась неоднородностями начального распределения плотности, температурным или энергетическим возмущением.

Показано, что нарушение симметрии системы посредством отклонения концентрации частиц от однородного распределения инициирует волнообразное распространение по системе неоднородностей, имеющих квазипериодический характер, так что в результате в системе устанавливается квазипериодическое распределение концентрации интеркалированных частиц. Отмечено, что при инициализации фазового расслоения системы, как посредством локального температурного возмущения, так и изменением взаимодействия между частицами интеркалянта процесс наноструктуризации протекает аналогично таковому при начальной концентрационной неоднородности.

По результатам анализа полученных решений можно сделать вывод, что в результате эволюции система переходит в новое, тоже метастабильное, состояние, характеризующееся наличием квазипериодического наноразмерного распределения концентрации, причем это распределение является достаточно устойчивым по отношению к возможным не очень сильным возмущениям.

[1] Колобова, Ю. Р. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов / Ю. Р. Колобова, Р. З. Валиева // Новосибирск: Наука, 2000. – 231 с.

[2] Lasovsky, R. N. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds / R. N. Lasovsky, G. S. Bokun, V. S. Vikhrenko // Solid State Ionics. – 2011. – Vol. 188. – P.15.