

УДК 539.266:538.214

ПОЛИТЕТРАЭДРИЧЕСКИЙ ПОРЯДОК И ЛОКАЛЬНОЕ ХИМИЧЕСКОЕ  
УПОРЯДОЧЕНИЕ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВАХА.С. Роик<sup>1</sup>, А.В. Аникеенко<sup>2</sup>, Н.Н. Медведев<sup>2,3</sup><sup>1</sup>Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко, химический факультет

E-mail: sasha78@univ.kiev.ua

<sup>2</sup>Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск<sup>3</sup>Новосибирский государственный университет

Статья поступила 22 мая 2012 г.

Исследуются причины возникновения препика и асимметрии второго максимума на кривой структурного фактора, наблюдаемые в различных металлических расплавах. Препик проявляется в виде дополнительного максимума на левом крыле главного пика структурного фактора многокомпонентных расплавов и связывается с их локальным химическим упорядочением. Асимметрия второго пика, которая обычно объясняется "икосаэдрическим" (политетраэдрическим) порядком в расплаве, наблюдается как для многокомпонентных систем, так и для чистых металлов. Однако для некоторых расплавов алюминия с переходными металлами характерно наличие обеих особенностей одновременно, что требует объяснения. Проведено рентгенодифракционное исследование тройного расплава  $\text{Al}_{66,6}\text{Mn}_{16,7}\text{Co}_{16,7}$  при 1393 К и жидкой меди при 1353, 1403, 1553 К. Методом обратного Монте-Карло (ОМК) получены структурные модели этих и других расплавов и проведен их структурный анализ с использованием симплексов Делоне. Проведено теоретическое моделирование локального химического порядка на модели жидкого алюминия, структурный фактор которого не имеет указанных особенностей. Обсуждается, что локальное химическое упорядочение в расплаве может существовать независимо от наличия политетраэдрического порядка.

**Ключевые слова:** металлические расплавы, рентгеноструктурный анализ, препик, икосаэдрический ближний порядок, химический ближний порядок, политетраэдрические кластеры.

## ВВЕДЕНИЕ

Возможность получения квазикристаллических фаз методом закалки из металлических расплавов вызывает интерес к структуре равновесных и переохлажденных расплавов алюминия с переходными металлами, склонных к образованию таких фаз [1, 2]. С увеличением количества компонентов возрастают трудности анализа дифракционных данных и интерпретации структуры расплава, поэтому кроме дифракционных экспериментов широко используется компьютерное моделирование. Анализ структурных моделей расплава дает дополнительную информацию о парциальных характеристиках и локальной структуре.

Характерными особенностями на кривых структурного фактора (СФ) металлических расплавов являются *препик*, дополнительный максимум (наплыв) в области малых значений вектора дифракции и *асимметрия второго максимума*. Существование препика связывают с наличием "среднего порядка" в системе, т.е. с некой структурной организацией атомов, выходящей за пределы ближайшей координационной сферы [3]. Другими словами, препик возникает, если в системе имеется характерный масштаб длины, превышающий размер атомов [4, 5]. Препик